

**Fluxo de Calor em Estados Estacionários de
Não Equilíbrio:
Um Estudo Microscópico.**

Ricardo de Carvalho Falcão

Outubro de 2006

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

**Fluxo de Calor em Estados Estacionários de Não Equilíbrio:
Um Estudo Microscópico.**

Ricardo de Carvalho Falcão

Orientador: Prof. Emmanuel Araújo Pereira

Tese apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS
GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do grau de
Doutor EM CIÊNCIAS (Física).

Agradecimentos

Ao professor Emmanuel pela orientação e por tudo que ele me ensinou durante estes anos.

Aos colegas de grupo, Antônio, Fernando, Humberto e Rafael pelas discussões e ajuda.

À família pelo apoio e incentivo.

A Nibs pelo amor.

A todos os professores que tive, por tudo o que aprendi com eles.

Aos amigos por tornarem a vida mais feliz.

Ao Programa de Pós-Graduação em Física pela oportunidade.

A CAPES pela bolsa

Sumário

RESUMO	v
ABSTRACT	vii
1 Introdução	1
1.1 A Lei de Fourier	3
1.2 Teoria Cinética	5
1.3 Condução de Calor em Cristais (eletricamente isolantes)	6
1.4 Mecânica Estatística: tratamento rigoroso	7
1.5 Alguns Trabalhos Importantes	9
2 Cristal Harmônico	19
2.1 Descrição do Modelo	19
2.2 Fluxo de Calor	27
2.3 Formalismo integral	30
2.4 A Lei de Fourier	32
2.5 O fluxo de calor e o perfil de temperatura	38
3 Tratamento Rigoroso	43
4 Cristal anarmônico	50
4.1 Descrição do Modelo	53
4.2 Formalismo Integral	54
4.3 Fluxo de Calor	56

5	O Modelo do Rotor	59
5.1	Descrição do Modelo	60
5.1.1	Regime de baixa temperatura	69
5.1.2	Regime de Alta Temperatura	73
5.2	A lei de Fourier	81
6	Conclusão	83
A	O Método de Laplace	85
B	Integrais Gaussianas	91
C	Cálculo de $e^{-A^0 t}$	93
D	Equações Diferenciais Estocásticas	95
D.1	Construção da integral de Itô	96
D.2	A Fórmula de Cameron-Girsanov-Martin	98
E	Números de Catalan	100
F	Solução do cristal harmônico	102

Lista de Figuras

1.1	Propagação do calor por partículas na presença de um perfil de temperatura uniforme na direção x	6
1.2	Condutividade térmica κ em função do comprimento da cadeia N obtida por meios de dinâmica molecular	12
1.3	Perfil da temperatura para a cadeia harmônica em contato com reservatórios térmicos de temperatura T_1 e T_N	16
2.1	Cristal harmônico com reservatórios auto-consistentes	20
4.1	Região no espaço de parâmetros (g, \tilde{T}) onde a condutividade térmica para o potencial de FK converge (a) e diverge (b).	51
4.2	Razão do fluxo de calor $J(400)/J(800)$ vs temperatura média	52
5.1	Dependência do $\ln \kappa$ com $\ln N_1$	60
5.2	Dependência da condutividade térmica κ com a temperatura T	60
5.3	Comportamento da função $g(s)$ para termos do tipo a	75
5.4	Argumento da integral (5.71) para dois perfis de temperatura T_1 e T_2	76
5.5	Comportamento da função $g(s)$ para termos do tipo b	79
5.6	Perfil onde ζ_i varia lentamente e vai a zero no interior do sistema	80
A.1	Esboço da função $f(x)$	88

Resumo

O contexto desse trabalho é o estudo e a caracterização de estados estacionários de não equilíbrio a partir de modelos microscópicos Hamiltonianos. Em particular estamos interessados no problema da condução de calor em sólidos que fornece um exemplo bastante elementar de estudo de um estado estacionário de não equilíbrio.

Um modelo microscópico bastante estudado na literatura é a cadeia de osciladores harmônicos, ou sua versão anarmônica em contato com reservatórios térmicos de Langevin, i.e. reservatórios representados por variáveis estocásticas. O estudo destes modelos matemáticos simples é de grande valor para o entendimento mais profundo das hipóteses necessárias para a validade da lei de Fourier. Em particular estamos interessados no papel da não harmonicidade no potencial local ou na interação entre as partículas, e no papel da temperatura para a validade ou não da lei de Fourier.

Sabemos da mecânica estatística de equilíbrio que se todos os reservatórios térmicos estão na mesma temperatura o estado estacionário atingido é aquele de temperatura uniforme descrito pela medida de Gibbs, porém quando o sistema está submetido a diferentes temperaturas, não sabemos qual medida descreve este estado. Não podemos nem garantir a existência de uma distribuição estacionária, nem se esta distribuição é única. O nosso objetivo neste trabalho é estudar algumas propriedades destes estados estacionários.

Neste trabalho analisamos a dinâmica estocástica de Langevin de um cristal

(an)harmônico, i.e. estudamos um modelo de campo escalar na rede, com variáveis de *spin* não limitadas. Em uma caixa $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ acoplados à banhos térmicos estocásticos em cada sítio. Precisamente estamos considerando um sistema de N osciladores com o Hamiltoniano

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} [p_j^2 + U^{(1)}(q_j)] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq l=1}^N U^{(2)}(q_j - q_l), \quad (1)$$

onde $U^{(1)}$ é um potencial local e $U^{(2)}$ um potencial de interação. A evolução temporal é dada pelas seguintes equações diferenciais estocásticas

$$\begin{aligned} dq_j &= p_j dt, & j &= 1, \dots, N, \\ dp_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} dt - \zeta p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j, & j &= 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (2)$$

onde B_j são processos de Wiener independentes, isto é, dB_j/dt são ruídos branco independentes, ζ é a constante de acoplamento com o banho térmico e $\gamma_j = 2\zeta T_j$, onde T_j é a temperatura do j-ésimo banho térmico.

Desenvolvemos uma abordagem para tratar este problema. Essa abordagem está baseada na construção de uma fórmula integral que na física estatística de equilíbrio seria algo parecido com a função de partição e em teorias de campo seria uma fórmula similar a de Feynman-Kac. De posse desta fórmula integral estamos aptos a realizar cálculos analíticos para diversos sistemas concretos. Analisamos três sistemas em particular que são: o cristal harmônico, o cristal anarmônico, e o modelo do rotor.

Abstract

The context of this work is the study and the characterization of non equilibrium steady states from Hamiltonian microscopical models. In particular we are interested in the problem of the heat conduction in solids that supplies a elementary example of a non equilibrium steady state.

A microscopical model frequently studied in literature is the chain of harmonic oscillators, or its anharmonic version, in contact with Langevin thermal reservoirs, i.e. reservoirs represented by random variable. The study of these simple mathematical models is of great value for a deeper understanding of the necessary hypotheses for the validity of the Fourier law. In particular we are interested in the role of the anharmonicity in the on-site potential or in the interaction between particles, and in the role of the temperature for the validity or not of the law of Fourier.

We know from equilibrium statistical mechanics that if all the thermal reservoirs are in a same temperature the reached stationary state is that one of uniform temperature described by the Gibbs measure, however when the system is submitted to different temperatures, we don't know which measure describes this state, we cannot guarantee the existence of a stationary distribution, nor if this distribution is the only one. Our objective in this work is to study some properties of these stationary states.

In this work we analyze the stochastic Langevin dynamics of a (an)harmonic crystal, i.e. we study a scalar field lattice model with unbounded spin variable in

a d -dimensional lattice space box $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$ with stochastic heat bath at each site. Precisely, we take a system of N oscillators with the Hamiltonian

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} [p_j^2 + U^{(1)}(q_j)] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq l=1}^N U^{(2)}(q_j - q_l), \quad (3)$$

where $U^{(1)}$ is an on-site potential and $U^{(2)}$ is a interaction potential. We consider the time evolution given by the stochastic differential

$$\begin{aligned} dq_j &= p_j dt, & j &= 1, \dots, N, \\ dp_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} dt - \zeta p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j, & j &= 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (4)$$

where B_j are independent Wiener process, i.e., dB_j/dt are independent white noise; ζ is the heat bath coupling and $\gamma_j = 2\zeta T_j$, where T_j is the temperature of j -th heat bath.

We develop an approach to treat this problem. Our approach is based on the construction of an integral formula. With this integral formula we are apt to carry out analytical calculations for concrete systems. In particular we analyze tree systems they are: the harmonic crystal, the anharmonic crystal, and the rotor model.

Capítulo 1

Introdução

A mecânica estatística tem como objetivo explicar as propriedades macroscópicas da matéria a partir da hipótese atômica, i.e, de que a matéria é composta de átomos ou moléculas que se movem de acordo com as leis da mecânica clássica ou da mecânica quântica. Alguns destes fenômenos macroscópicos são simplesmente o efeito da soma da ação individual de cada átomo, como a pressão exercida por um gás na parede do seu reservatório. Outros fenômenos são mais intrigantes e não possuem uma relação tão direta com a dinâmica microscópica. Talvez os dois exemplos mais surpreendentes desses fenômenos macroscópicos sejam a origem da irreversibilidade temporal no comportamento macroscópico dos sistemas e a existência de transições de fase.

A mecânica estatística de equilíbrio foi fundada por Boltzmann, Maxwell e Gibbs há mais de 100 anos e se fundamenta na hipótese ergódica. Em particular ela nos diz como calcular a densidade de probabilidade de um dado estado com uma determinada energia (para isso usamos a equação de Boltzmann). Além de podermos calcular o valor da energia no estado de equilíbrio podemos calcular as flutuações do sistema em torno deste valor.

Ao contrário da mecânica estatística de equilíbrio, que possui vários resultados de sucesso que relacionam as propriedades microscópicas dos sistemas com suas propriedades e leis macroscópicas, nosso entendimento atual da mecânica estatística de não equilíbrio é bastante incompleto [1, 2, 3]. Existem várias tentativas

de se estender os resultados da mecânica estatística de equilíbrio para sistemas de não-equilíbrio. Vários destes trabalhos são dedicados a descrever modelos de não-equilíbrio a partir de sua dinâmica microscópica. Talvez o resultado mais relevante sobre o assunto seja o teorema de Gallavotti-Cohen [4, 5], que caracteriza simetrias nas flutuações da produção de entropia para sistemas fora do equilíbrio.

Uma abordagem macroscópica comum no estudo de fenômenos fora do equilíbrio é baseada na definição de coeficientes de transporte através de equações fenomenológicas. Isso normalmente é feito postulando a proporcionalidade entre os fluxos e as forças termodinâmicas [6] quando tratamos sistemas próximos o suficiente do equilíbrio global. Existem várias leis que descrevem o transporte de grandezas conservadas como a lei de Fick para o transporte de massa, e a lei de Ohm para o transporte elétrico. Juntamente com essas leis fenomenológicas existe a possibilidade de efeitos cruzados entre os vários fenômenos. Um exemplo é o chamado efeito Soret que implica em um fluxo de matéria devido a existência de um gradiente de temperatura.

Se estamos preocupados com o problema de transporte de energia em sólidos define-se a condutividade térmica κ através da lei de Fourier

$$J_Q = -\kappa(T)\nabla T(x, t) \quad (1.1)$$

onde J_Q é o calor transportado através de uma superfície de área unitária por unidade de tempo, $T(x, t)$ é a temperatura local, e κ é a condutividade térmica. Essa lei fenomenológica foi proposta em “1822” por Jean Baptiste Fourier em seu famoso tratado “Theorie Analytique de la chaleur” que começa com a seguinte introdução

“Les causes primordiales ne nous sont point connues; mais elles sont assujetties à des lois simples et constantes, que l’on peut découvrir par l’observation, et dont l’étude est l’objet de la philosophie naturelle. La chaleur pénètre, comme la gravité, toutes les substances de l’univers, ses rayons occupent toutes les parties de l’espace. Le but de notre ouvrage est d’exposer les lois mathématiques que suit cet élément. Cette théorie formera désormais une des branches importantes de la

physique générale.”

Após uma breve descrição da mecânica Newtoniana e das suas aplicações Fourier continua com o seguinte parágrafo

“Mais quelle que soit l’étendue des théories mécaniques, elles ne s’appliquent point aux effets de la chaleur. Ils composent un ordre spécial de phénomènes qui ne peuvent s’expliquer par les principes du mouvement et de l’équilibre. On possède depuis long-temps des instruments ingénieux, propres à mesurer plusieurs de ces effets; on a recueilli des observations précieuses; mais on ne connaît ainsi que des résultats partiels, et non la démonstration mathématique des lois qui les comprennent tous.”

Fourier continua seu tratado com uma descrição fenomenológica do transporte de calor e com a derivação de uma equação diferencial parcial que descreve o fluxo de calor (a equação do calor). O resto do tratado é dedicado à solução dessa equação para diversas geometrias e condições de fronteira.

Nas décadas seguintes ao trabalho de Fourier houve a invenção da mecânica estatística com os trabalhos de Boltzmann, Gibbs e Maxwell. A partir de então passou-se a acreditar que Fourier estava errado, e que seria possível descrever o transporte de calor através das leis da mecânica usando o formalismo da mecânica estatística. Porém, mais de um século após o desenvolvimento da mecânica estatística ainda não temos uma derivação da lei de Fourier por primeiros princípios, e pode-se dizer que ainda não estamos nem próximos deste resultado.

1.1 A Lei de Fourier

Sabemos que a lei de Fourier é válida para gases, líquidos e sólidos e em pelo menos duas situações distintas. São elas:

1. Um sistema macroscópico isolado onde em algum tempo inicial $t = 0$, tem uma distribuição não uniforme de temperatura $T_0(r)$. Para $t > 0$ este perfil de temperatura irá produzir um fluxo de energia $J(r)$. Devido à conservação

de energia e das leis da termodinâmica:

$$c_v(T) \frac{\partial}{\partial t} T(r, t) = -\nabla \cdot J$$

onde $c_v(T)$ é o calor específico por unidade de volume. Como já foi dito para sistemas próximos o suficiente do equilíbrio assumimos que a lei de Fourier

$$J(r) = -\kappa(T(r)) \nabla T(r)$$

é válida onde κ é a condutividade térmica. Juntando as duas equações obtemos a chamada equação do calor:

$$c_v(T) \frac{\partial}{\partial t} T(r, t) = -\nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot [\kappa \nabla T]. \quad (1.2)$$

Estamos assumindo que não existe transporte de massa nem outra forma de transporte de energia. Esta equação é resolvida sujeita às condições iniciais $T(r, 0) = T_0(r)$, e como o sistema está isolado, não ha fluxo de calor através da fronteira do sistema. O estado estacionário atingido quando $t \rightarrow \infty$ é o de temperatura uniforme \bar{T} determinado pela energia total do sistema.

- Um sistema em contato com reservatórios térmicos, onde cada reservatório α fixa a temperatura em alguma parte $(\partial\Lambda)_\alpha$ da fronteira $\partial\Lambda$. O resto da fronteira é isolante. Quando o sistema atingir um estado estacionário o seu perfil de temperatura será dado pela solução da equação (1.2) com o lado esquerdo igual a zero,

$$\nabla \cdot J(t) = \nabla \cdot (\kappa \nabla T(r)) = 0$$

sujeito às condições $T(r) = T_\alpha$ para $r \in (\partial\Lambda)_\alpha$ e sem fluxo de calor no resto da fronteira

Aqui assumimos implicitamente que o sistema é completamente descrito ao especificarmos a sua temperatura $T(x, t)$ em todos os pontos x . Isto significa que em um nível microscópico o sistema está em equilíbrio térmico local (LTE), isto é, imaginamos que o sistema está dividido em pequenos cubos, cada um grande o

suficiente para conter muitas partículas, porém pequenos o suficiente para que em uma escala macroscópica ele seja precisamente descrito, em um tempo t , como um sistema em equilíbrio na temperatura $T(x_i, t)$ onde x_i é o centro do i -ésimo cubo. Para variações lentas no espaço e no tempo podemos usar a descrição contínua $T(x, t)$.

A lei de Fourier é observada em uma grande variedade de materiais para uma grande faixa de temperaturas. Muitas vezes devido a maior simplicidade matemática, considera-se sistemas $1d$ ou $2d$ na esperança destes sistemas mais simples reproduzirem o comportamento termodinâmico esperado dos sistemas $3d$. É claro que a existência de sistemas reais que podem, pelo menos a princípio, ser descritos por modelos $1d$ ou $2d$ também justificam o estudo destes modelos. De fato, recentemente os nanotubos e nanofios de carbono tem atraído a atenção por suas notáveis propriedades eletrônicas, térmicas e mecânicas. Existem na literatura trabalhos experimentais e de dinâmica molecular [7, 8] que indicam que este materiais possuem condutividade anômala.

1.2 Teoria Cinética

As primeiras análises feitas com o objetivo de calcular a condutividade térmica, ou pelo menos obter o seu comportamento como uma função da temperatura, para modelos realísticos foram baseadas na teoria cinética e remetem aos trabalhos de Clausius, Maxwell e Boltzmann. Clausius e Maxwell usaram o conceito de “livre caminho médio”: i.e. a distância média que uma partícula (átomo ou molécula) viaja entre as colisões em um gás com uma densidade de partícula ρ . Considerando um gás com um gradiente de temperatura na direção x e assumindo que o gás está (aproximadamente) em equilíbrio térmico local com densidade ρ e temperatura $T(x)$. Vamos considerar que as partículas vindas da posição x contribuem com uma energia $u(x) \propto T(x)$. Portanto o fluxo de calor será dado pelo o número de partículas por volume, vezes sua velocidade, vezes a energia que ele carrega. Para estimar essa quantidade temos de realizar a média deste produto sobre todos os pontos onde a

ultima colisão pode ter ocorrido. Assumindo que a última colisão ocorreu a uma distância $\lambda = v\tau$ do ponto x_0 em uma direção que faz um ângulo θ com o eixo x (veja a fig. (1.1)) temos

$$J = \langle v \cos \theta C_v (T(x_0 - \lambda \cos \theta)) \rangle_\theta \quad (1.3)$$

onde C_v é a capacidade térmica por volume. Em primeira ordem do gradiente de temperatura temos

$$J = -\frac{1}{3} v \lambda C_v \frac{\partial}{\partial x} (T) = J = -\frac{1}{3} \sqrt{T} \lambda C_v \frac{\partial}{\partial x} (T) \quad (1.4)$$

onde estamos considerando que $v \propto \sqrt{T}$.

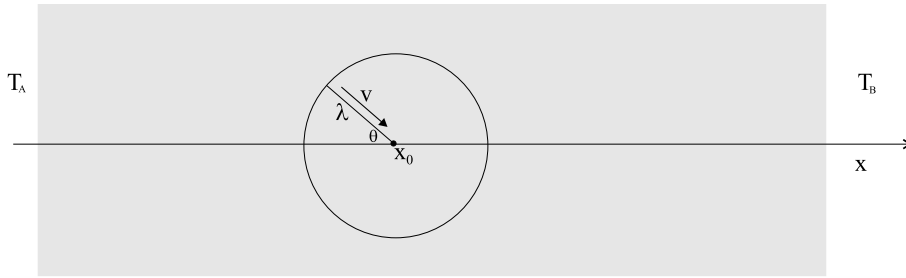


Figura 1.1: Propagação do calor por partículas na presença de um perfil de temperatura uniforme na direção x . O fluxo de calor na posição x_0 é devido a partículas que tiveram a sua última colisão no ponto P a uma distância $\lambda \cos \theta$ na direção do gradiente de temperatura.

1.3 Condução de Calor em Cristais (eletricamente isolantes)

O fluxo de calor em sólidos eletricamente condutores é devido quase que exclusivamente aos elétrons. Neste caso pode-se adaptar a teoria cinética descrita acima [9]. Porém, para sólidos eletricamente isolantes o calor é transmitido através de vibrações da rede cristalina. Para usar os conceitos da teoria cinética é útil imaginar

o sólido como um gás de fônons capaz de transmitir e armazenar energia. Debye formulou um tipo de teoria cinética para os fônons para descrever a condutividade térmica. Assumindo que um pequeno gradiente de temperatura é imposto ao sistema e que a colisão entre os fônons mantém o equilíbrio térmico local e repetindo os mesmos argumentos da seção anterior chegamos a uma condutividade térmica $\propto C_v v^2 \tau$ onde C_v é o calor específico dos fônons, v a velocidade média e τ é o tempo médio entre colisões. Para calcular a dependência da condutividade térmica com a temperatura é necessário uma teoria mais refinada, que foi feita por Peierls [10] através de uma equação de Boltzmann para fônons. A grosso modo podemos sintetizar a teoria de Peierls da seguinte forma: Em um cristal puramente harmônico os estados dos fônons são estados estacionários, portanto não existem maneiras de espalhar estes fônons e a condutividade térmica é infinita. Porém os estados estacionários do cristal harmônico são apenas uma aproximação para os do sistema com um potencial anarmônico. Esse efeito da não harmonicidade produz transições entre os auto estados do cristal harmônico. Esses processos de criação e destruição de fônons podem ser divididos em processos Normais (aqueles que o momento dos fônons são conservados) e processos “Umklapp” (aqueles em que os momentos iniciais e finais diferem por um vetor da rede recíproca). Observa-se que na ausência dos processos “Umklapp” o livre caminho médio é infinito e portanto a condutividade térmica é também infinita. A existência ou não do processo “Umklapp” depende da temperatura do sistema. A teoria de Peierls descreve corretamente a dependência da condutividade térmica com a temperatura.

1.4 Mecânica Estatística: tratamento rigoroso

Para um tratamento rigoroso deste problema temos de formulá-lo de um ponto de vista matemático. Uma maneira natural de realizar esse feito é adaptar o formalismo da mecânica estatística para este caso. Para isso vamos supor que o sistema é descrito pela posição Q e o momento P de um número grande de partículas, onde $Q = (q_1, \dots, q_N) \in \Lambda^N$, $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ e $P = (p_1, \dots, p_N) \in \mathbb{R}^{dN}$. A dinâmica no

volume é descrita pelo Hamiltoniano $H(Q, P)$ e o estado do sistema é uma medida de probabilidade $\mu(Q, P)$ no espaço de fase. Como na mecânica estatística de equilíbrio o valor de um observável $f(Q, P)$ é dado pelo valor esperado de f com respeito a medida μ .

Se queremos uma descrição matemática para condutividade térmica em cristais temos de especificar o Hamiltoniano do sistema ou uma versão simplificada capaz de reproduzir o comportamento esperado. Um cristal é caracterizado pelo fato de que todos os seus átomos oscilam próximos de uma posição de equilíbrio, que pode ser pensada como pontos de uma rede regular em \mathbb{Z}^d . Seja $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$ um conjunto finito de cardinalidade N , cada átomo é identificado pela sua posição $x_i = i + q_i$ onde $i \in \Lambda$ é a sua posição de equilíbrio, e $q_i \in \mathbb{R}^d$ é o deslocamento desta posição de equilíbrio. Vamos chamar de p_i o seu momento e m a sua massa. Uma descrição razoável para as forças interatômicas é assumir que os átomos interagem apenas com os primeiros vizinhos através de um potencial que depende da distância entre eles. Ou seja, Hamiltonianos da forma geral dado por

$$H(P, Q) = \sum_{i \in \Lambda} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{|i-j|=1} V(q_i - q_j) + \sum_i U_i(q_i). \quad (1.5)$$

A adição do termo $U_i(q_i)$ tem justificativas físicas que iremos comentar mais tarde.

Para produzir um fluxo de calor estacionário no sistema, ele deve ser acoplado a banhos térmicos de diferentes temperaturas. Existem várias maneiras de modelar a ação destes reservatórios. Obviamente é de se esperar que todas estas formas produzam o mesmo efeito longe da fronteira do sistema, porém isso não foi provado.

Uma maneira usual de modelar a ação dos reservatórios térmicos é usar reservatórios de Langevin que atuam nos átomos da fronteira do cristal. O modelo que temos em mente é o de uma barra em contato com banhos térmicos nas suas extremidades. As partículas da extremidade da esquerda estão a temperatura T_E e as da direita T_D . Para estas partículas as equações Hamiltonianas de movimento são modificadas com a adição de um processo de Ornstein-Uhlenbeck [11]

$$m_i \dot{p}_i = -\nabla H(p, q) - \xi_\alpha p_\alpha / m + \sqrt{2\xi_\alpha T_\alpha} \eta_\alpha(t), \quad (1.6)$$

onde $\alpha \in \{E, D\}$ são índices dos reservatórios, ξ_α é a intensidade de acoplamento com o reservatório de temperatura T_α e $\eta_\alpha(t)$ é um ruído branco de covariância $\langle \eta_\alpha(t)\eta_\beta(s) \rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta(t-s)$. Os coeficientes do termo de dissipação e do termo de ruído são escolhidos para que a dinâmica obedeça a equação de balanço detalhado. Essa condição em particular implica que para o sistema acoplado com reservatórios à mesma temperatura, então a medida de Gibbs $Z^{-1} \exp(-H(Q, P)/T)$ é um estado estacionário do sistema.

1.5 Alguns Trabalhos Importantes

Nessa seção vamos descrever rapidamente os resultados dos trabalhos mais relevantes sobre o tema, para podermos avaliar o atual estado de conhecimento do assunto. Frisamos que a grande maioria dos resultados são obtidos por meio de simulações.

Uma revisão dos problemas e dos poucos resultados rigorosos conhecidos relacionados à lei de Fourier são apresentados em [12, 13]. No primeiro trabalho é apresentada uma visão geral do estado atual do nosso conhecimento (ou como prefere o autor, do estado atual da nossa ignorância) sobre a derivação da lei de Fourier. No segundo trabalho é considerado o transporte estacionário de energia em cristais tratando modelos matemáticos simples que consistem de osciladores acoplados em uma rede.

Grande parte dos trabalhos encontrados na literatura relacionados ao transporte de energia em sólidos tratam do estudo de uma cadeia de N átomos acoplados a banhos térmicos. Estes sistemas podem ser descritos por Hamiltonianos da seguinte forma geral

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + U^{(1)}(x_i) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq i}^N U^{(2)}(x_i - x_k), \quad (1.7)$$

o potencial $U^{(2)}$ descreve a interação entre as partículas, e na ausência do potencial $U^{(1)}$ temos que o momento se conserva.

Na classe de modelos onde $U^{(1)} = 0$, um exemplo bastante comum na literatura

é o dado pelo potencial de Lennard-Jones

$$U^{(2)}(z) = \epsilon \left[\left(\frac{a}{z} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{z} \right)^6 \right].$$

Esse modelo foi estudado em [14] onde foi calculada a função de autocorrelação de equilíbrio para o fluxo de calor (fórmula de Green-Kubo) para uma cadeia de 200 partículas interagindo com o potencial de Lennard-Jones. Foi observada uma convergência lenta para zero, o que indica uma divergência da condutividade térmica.

Outro exemplo bastante comum é o potencial de Fermi-Pasta-Ulam (FPU)

$$U^{(2)}(z) = \frac{g_2}{2}(z - a)^2 + \frac{g_3}{3}(z - a)^3 + \frac{g_4}{4}(z - a)^4.$$

Este modelo é bastante usado computacionalmente. Dois casos particulares aparecem freqüentemente e por razões históricas são conhecidos como FPU- α (quando $g_4 = 0$), e FPU- β (quando $g_3 = 0$).

Este modelo surgiu na literatura no famoso trabalho de Fermi-Pasta-Ulam [15] intitulado “Estudos de problemas não lineares I”. Nas referências [16, 17, 18] é apresentada uma revisão sobre esse modelo com seus principais resultados e características. A primeira intenção de Fermi, Pasta e Ulam ao propor este modelo era testar como um conjunto de osciladores não lineares acoplados se aproximavam do equilíbrio (equipartição), e como já havia sido notado por Fermi este problema possui uma conexão com o problema da transmissão de energia vibracional. De fato, em 1914 Debye já havia proposto que a não linearidade nas forças interatômicas era necessária para a validade da lei de Fourier. Apesar das simplificações, o modelo FPU possui essa não linearidade como ingrediente básico, e poderia ser possível verificar a lei de Fourier para um caso concreto.

Ao contrário das expectativas, as simulações do modelo FPU revelaram um fato surpreendente que pelo menos para alguns casos (para alguns conjuntos de condições iniciais) a evolução do modelo FPU não exhibe equipartição de energia entre os modos normais. Ou seja, apesar deste modelo possuir interação entre todos os modos, que a princípio deveria ser capaz de distribuir a energia entre eles, apresenta a localização da energia em apenas alguns modos. Se interpretarmos esse fato usando a teoria de Debye para a condução iríamos obter um condutividade térmica infinita.

Modelo	Referência	α (NEMD)
FPU- β	[20]	0.37
FPU- α	[13]	$\lesssim 0.44$
Toda diatômica $r = 2$	[13]	0.35 – 0.37
Toda diatômica $r = 8$	[13]	0.44

Tabela 1.1: Valor estimado do expoente α da divergência da condutividade térmica com o tamanho N do sistema obtidos por dinâmica molecular de não-equilíbrio (NEMD).

Alguns anos mais tarde apareceram os primeiros estudos sistemáticos da dependência da condutividade térmica com o tamanho do sistema. Uma série de simulações fora do equilíbrio foram realizadas para a cadeia FPU [19, 20]. O resultado destes estudos numéricos é que a condutividade térmica para o modelo FPU diverge com a seguinte lei

$$\kappa(N) \propto N^\alpha \tag{1.8}$$

onde o expoente α para o modelo FPU e para outros modelos estão na tabela (1.1) Nessa classe de modelos também está a chamada rede de Toda onde

$$U^{(2)}(z) = \frac{a}{b} [\exp(bz) - bz - 1].$$

Este potencial consiste de uma interação exponencial repulsiva entre primeiros vizinhos de alcance b^{-1} e uma atração linear de intensidade a . Uma variação desse modelo é a sua versão diatômica, quando as massas m_l são uma seqüência alternada, com a razão entre as massas dada pelo parâmetro r . Na tabela (1.1) apresentamos o valor do expoente α para este modelo.

O modelo do rotor é um dos modelos mais simples com interação de primeiros vizinhos que pode possuir condutividade térmica normal. Este modelo é descrito pelo potencial

$$U^{(2)} = 1 - \cos(x). \tag{1.9}$$

Podemos interpretar esse modelo como uma cadeia de N pêndulos acoplados, onde p_i 's e q_i 's representam variáveis angulares. Um sistema físico que pode ser descrito por este modelo é uma macromolécula linear que pode sofrer torção. Ao contrário das

expectativas esse modelo exibe uma condutividade térmica normal [13, 21, 22, 23] para alguns parâmetros do sistema. Na figura (1.2) mostramos o resultado obtido em [23] onde podemos ver a convergência de $k(N)$ para um valor finito no limite de $N \rightarrow \infty$. Esse é o primeiro sistema sem a presença de um potencial externo local que exibe uma condutividade térmica finita. Voltaremos a tratar este modelo com mais detalhes no capítulo (5).

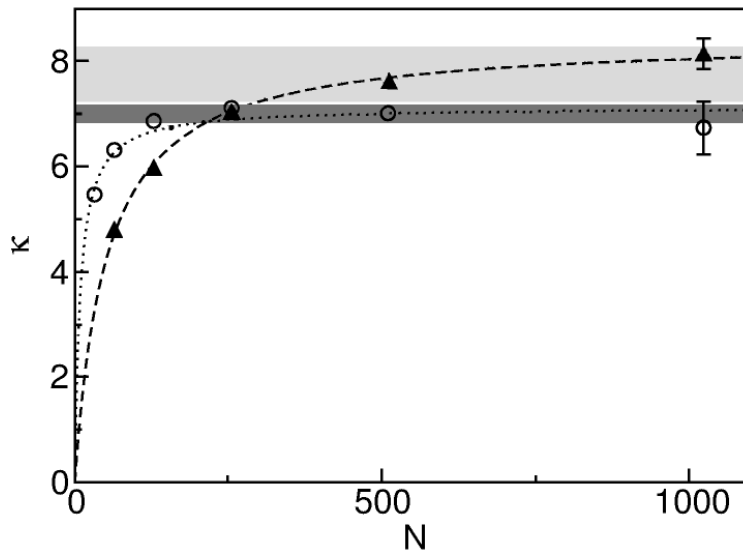


Figura 1.2: Condutividade térmica κ em função do comprimento da cadeia N obtida por meios de dinâmica molecular

Outra classe de modelos bastante comum na literatura é a representada pelo Hamiltoniano onde está presente um potencial local $U^{(1)} \neq 0$, que para sistemas unidimensionais e bidimensionais podemos interpretar como a ação de um substrato. A presença deste potencial local quebra a invariância translacional e o momento deixa de ser uma constante de movimento.

Nesta classe de modelos estão os chamados modelos “ding-a-ling” que foram introduzidos como “Toy model’s” para o estudo do plasma 1D. Uma versão modificada deste modelo foi introduzida por [24], onde os osciladores harmônicos eram

intercalados por partículas livres que tinham a única restrição e ficar entre dois osciladores adjacentes. Estes modelos podem ser representados simbolicamente pelo Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2} \sum_l^N [p_l^2 + \omega_l^2 q_l] + \text{“potencial de esfera dura”}.$$

A validade da lei de Fourier foi estabelecida para este modelo com uma série de simulações de não equilíbrio, onde as partículas livres das extremidades foram colocadas em contato com banhos térmicos de Maxwell (i.e., Colocar definição). O fluxo médio J foi calculado somando a variação de energia trocada com um dos reservatórios para todas as colisões durante o tempo de simulação.

Uma subclasse bastante comum são aquelas em que o potencial entre as partículas é harmônico i.e

$$H = \sum_{l=1}^N \left[\frac{p_l^2}{2m} + U(q_l) + \frac{1}{2} C (q_{l+1} - q_l)^2 \right].$$

Estes modelos são usualmente conhecidos como rede de Klein-Gordon. Para o caso do potencial

$$U(x) = -U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right),$$

este modelo é conhecido como FK (Frenkel-kontorova) e pode ser interpretado como uma cadeia de partículas ligadas por molas harmônicas submetidas a campo externo periódico. Este modelo foi introduzido por Ya Frenkel e T. Kontorova em 1939, que sugeriam o uso deste modelo para descrever, de uma forma mais simples, a estrutura e a dinâmica de uma rede cristalina nas proximidades de um centro de deslocamento. Desde então tem sido amplamente usado para modelar fenômenos na física do estado sólido. O artigo [25] traz uma revisão sobre o modelo FK. A existência de uma condutividade térmica finita para este modelo foi mostrada em [26, 27]. No artigo [28] foi feito um estudo da dependência da condutividade térmica com a variação da temperatura e dos demais parâmetros do sistema. Os autores alegam que dependendo da região de parâmetros o sistema pode exibir tanto condutividade normal como anômala.

Ainda na classe de modelos com potencial local está o modelo ϕ^4 dado por

$$U^{(2)}(x) = \frac{a}{2}x^2 + \frac{b}{4}x^4.$$

Este modelo é estudado nas referências [29, 28] e parece apresentar uma condutividade térmica finita para alguma faixa de parâmetros. Além de vários estudos numéricos existem alguns estudos analíticos sobre o modelo ϕ^4 , que iremos comentar com mais detalhes no capítulo 4.

Todos estes modelos já foram exhaustivamente estudados na literatura por meios de simulações, mas ainda não se sabe quais são as hipóteses necessárias que levam a lei de Fourier. Na maioria dos trabalhos numéricos os reservatórios são modelados através de forças determinísticas não Hamiltonianas. Estes modelos são chamados de termostatos. Um termostato bastante usado em simulações é o chamado termostato de Nosé-Hoover. Impondo este termostato a pequenas partes do sistema, por exemplo em uma cadeia unidimensional à esquerda e à direita Λ_L e Λ_R , as equações de movimento das partículas nesta região são dadas por:

$$m\ddot{q}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \nu_L \dot{q}_i \tag{1.10}$$

$$m\ddot{q}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \nu_R \dot{q}_i, \tag{1.11}$$

onde as variáveis ν_L e ν_R modelam a ação do termostato e obedecem as seguintes equações

$$\dot{\nu}_\alpha = \frac{1}{\Theta^2} \left(\frac{1}{T_\alpha} \sum_{i \in \Lambda_\alpha} \frac{p_i^2}{2m} - 1 \right), \tag{1.12}$$

onde $\alpha \in \{L, R\}$, Θ é interpretado como o tempo de resposta do reservatório e T_α é a temperatura do α -ésimo reservatório.

Como vimos existem disparidades entre os trabalhos encontrados na literatura. Alguns trabalhos defendem a hipótese de que a anarmonicidade local é suficiente para garantir a lei de Fourier [29, 26]. Por outro lado uma análise perturbativa em [30] mostra, para um sistema anarmônico, que o fluxo de calor não depende do tamanho do sistema. Outros trabalhos [28, 31] defendem que a não harmonicidade é insuficiente para garantir a lei de Fourier.

Existem trabalhos[32, 33] que defendem hipótese de que para quaisquer sistemas unidimensionais com conservação de momento a condutividade térmica é anômala. Por outro lado o modelo do rotor apresenta condutividade térmica normal.

Alguns trabalhos indicam que o caos é o mecanismo básico para existência de uma condutividade térmica normal [24, 34], porém alguns trabalhos mais recentes [35, 36, 37] indicam que o papel do caos (expoente de Lyapunov positivo) ainda não está claro.

Um dos primeiros trabalhos dedicado ao assunto, e um dos poucos com resultados rigorosos, é o artigo [38], publicado em 1967, onde foram estudadas as propriedades de um cristal harmônico em contato com banhos térmicos nas extremidades. O Hamiltoniano de um cristal harmônico contendo \mathcal{N} partículas pode ser escrito como

$$H = \sum_{i=1}^N p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \phi_{ij} x_i x_j \quad ; \quad N = s\mathcal{N} \quad (1.13)$$

onde x_i para $i = 1 \dots N$ são as coordenadas cartesianas das partículas e p_i são os momentos conjugados com x_i .

Para descrever a interação com os reservatórios é usado um formalismo geral desenvolvido nos trabalhos [39, 40] que descreve a evolução temporal de um “ensemble” de Gibbs representando um sistema em contato com um ou mais banhos térmicos, onde os reservatórios são constituídos de um número infinito de componentes idênticos e não interagentes, e cada um interage com o sistema no máximo uma vez. Esta interação é impulsiva e assume-se que antes da interação os componentes de cada reservatório têm uma distribuição de equilíbrio, com temperatura específicas.

Para o caso do cristal harmônico unidimensional (cadeia de pistons) com interação de primeiros vizinhos, onde o contato com o banho acontece para o primeiro e o último piston, a distribuição estacionária é calculada explicitamente, e as propriedades do estado estacionário, i.e o perfil de temperatura e o fluxo de calor são estudados, mostrando que o perfil de temperatura do sistema não é linear (veja

fig.(1.3)), e que o fluxo de calor no sistema é proporcional à diferença de temperatura e não ao gradiente de temperatura. No capítulo 2 voltaremos a tratar deste modelo com mais detalhes.

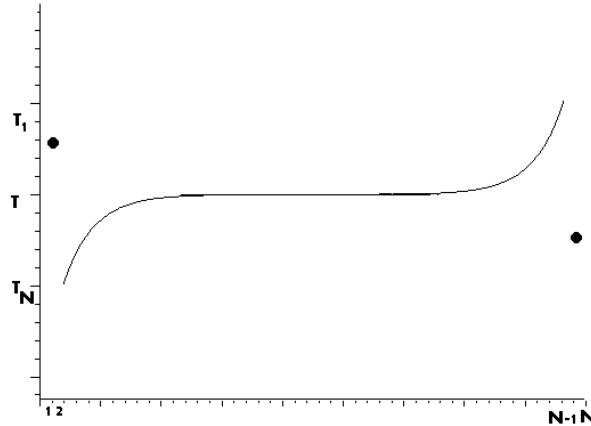


Figura 1.3: Perfil da temperatura para a cadeia harmônica em contato com reservatórios térmicos de temperatura T_1 e T_N

O modelo harmônico com massas diferentes foi estudado em [41, 42, 43], nas seguintes situações: cadeias harmônicas com massas alternadas, com massas escolhidas aleatoriamente, e cadeias alternadas de massas diferentes. Em todos os casos acima as diferentes distribuições de massa são insuficientes para garantir a lei de Fourier.

O modelo denominado de cristal harmônico com reservatórios auto consistentes foi introduzido na literatura em [44], onde foi postulado que reservatórios térmicos independentes interagem com os átomos de uma cadeia harmônica como substitutos para as forças não harmônicas reais. A temperatura de cada reservatório é determinada com a condição de que o sistema não troque energia com os reservatórios interiores. Através de argumentos não rigorosos a lei de Fourier é verificada para este sistema.

Recentemente o cristal harmônico auto-consistente foi tratado de forma rigo-

rosa [45] por um dos autores que resolveu o cristal harmônico 40 anos atrás. Neste trabalho são usados reservatórios de Langevin para modelar o acoplamento com os banhos térmicos, i.e., as equações Hamiltonianas de movimento das partículas em contato com os reservatórios são modificadas pela adição de um processo de Ornstein-Uhlenbeck

$$m_i \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \zeta_i p_i + \sqrt{2\zeta_i T_i} \eta_i(t), \quad (1.14)$$

onde ζ_i é intensidade do acoplamento com o reservatório, T_i é a temperatura; η_i é um ruído branco.

Estas equações diferenciais estocásticas podem ser escritas na forma matricial como

$$\dot{\mathbf{x}} = -\mathbf{A}\mathbf{x} + \sigma\eta, \quad (1.15)$$

onde $\mathbf{x} = (q, p)$ é um vetor no espaço de fase, os η_i são ruídos brancos independentes, \mathbf{A} e σ são as matrizes $2N \times 2N$ dadas por

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \Phi & \Gamma \end{pmatrix} \quad e \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\Gamma T} \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Aqui I é a matriz identidade $N \times N$, $\Gamma_{ij} = \delta_{ij}\zeta$, $T_{ij} = \delta_{ij}T_i$, Φ é uma interação entre primeiros vizinhos.

Esse modelo difere do cristal harmônico pois nele as temperaturas dos banhos térmicos das extremidades estão fixas em valores específicos T_L e T_R e as demais temperaturas são escolhidas auto-consistentemente de forma que o fluxo médio de energia entre os reservatórios internos e o sistema seja nulo no estado estacionário. Os reservatórios térmicos do interior podem ser interpretados fisicamente como graus de liberdade do sistema.

Mostra-se que esta escolha determina unicamente as temperaturas do sistema e que este sistema auto consistente possui um único estado estacionário. O fluxo de calor obedece à lei de Fourier e o perfil de temperatura é linear. No capítulo 2 trataremos deste modelo com mais detalhes.

Não se conhece uma forma simples de encontrar as propriedades de um sistema em um estado estacionário. Em particular uma lei fenomenológica simples como a

lei de Fourier ainda não foi demonstrada rigorosamente a partir de um modelo microscópico Hamiltoniano [12, 13]. O que torna a análise de sistemas simples descrevendo processos de não-equilíbrio um problema de interesse.

O restante dessa tese está organizado da seguinte forma. No capítulo 2 tratamos o problema do cristal harmônico com reservatórios auto-consistentes. No capítulo 3 apresentamos uma prova rigorosa para a validade dos cálculos perturbativos realizados no capítulo 2. No capítulo 4 realizamos uma análise perturbativa para um modelo anarmônico, no capítulo 5 estudamos o chamado modelo do rotor, e finalmente no capítulo 6 apresentamos as conclusões, perspectivas e algumas considerações. Essa tese ainda tem vários apêndices, que tratam de algumas definições e técnicas utilizadas.

Capítulo 2

Cristal Harmônico

O primeiro modelo que vamos estudar é o cristal harmônico com reservatórios auto-consistentes. Um caso específico deste modelo foi tratado por [45] de forma rigorosa. Escolhemos este modelo para iniciar nosso estudo, pois podemos comparar nosso resultado com os resultados obtidos em [45]. Além disso podemos tomar o limite dos acoplamentos com os banhos térmicos interiores indo a zero e comparar com os resultados para o cristal harmônico com reservatórios apenas na extremidades, que é um dos poucos modelos tratados rigorosamente na literatura [38].

2.1 Descrição do Modelo

Estamos interessados em analisar a dinâmica estocástica de Langevin de um cristal harmônico, isto é, queremos estudar um modelo de campo escalar na rede, com variáveis de *spin* não limitadas, em uma caixa $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, acoplados a banhos térmicos estocásticos em cada sítio (veja figura 2.1). Precisamente estamos considerando um sistema de N osciladores com o Hamiltoniano

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} [p_j^2 + M q_j^2] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq l=1}^N q_l J_{lj} q_j, \quad (2.1)$$

onde $M > 0$ e J_{lj} é a interação entre os sítios. Cada oscilador i será acoplado a um banho térmico de Langevin de temperatura $T_i \geq 0$ com uma constante de acoplamento $\zeta > 0$. A evolução temporal do sistema é dada pelas seguintes equações

diferenciais estocásticas:

$$\begin{aligned} dq_j &= p_j dt, & j &= 1, \dots, N, \\ dp_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} dt - \zeta p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j, & j &= 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde B_j são processos de Wiener independentes, isto é, $dB_j/dt = \eta_j$ são ruídos branco independentes de média nula, ou seja,

$$\begin{aligned} \langle \eta_j(t) \rangle &= 0, \\ \langle \eta_j(t) \eta_i(s) \rangle &= \delta_{ij} \delta(t-s), \end{aligned} \quad (2.3)$$

ζ é a constante de acoplamento com o banho térmico e $\gamma_j = 2\zeta T_j$, onde T_j é a temperatura do j -ésimo banho térmico.

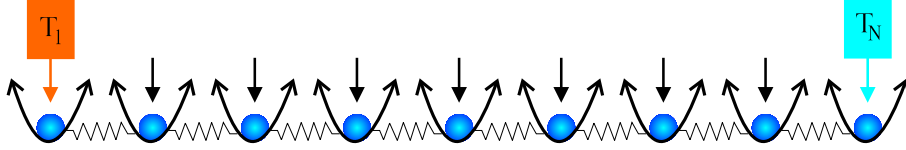


Figura 2.1: Representação do cristal harmônico com reservatórios auto-consistentes

Observe que as equações (2.2) são as equações de Hamilton para a dinâmica, adicionadas de um termo de ruído e de uma dissipação em cada sítio. Estes termos modelam o contato com o banho térmico. Para o modelo auto consistente todos os sítios estão acoplados a banhos térmicos, as temperaturas nas extremidades estão fixas e os banhos térmicos interiores podem ser interpretados como graus de liberdade extra do sistema.

Vamos reescrever as equações acima usando o vetor $\phi = (q, p) \in \mathbb{R}^{2N}$ para designar um vetor no espaço de fase. Dessa maneira podemos reescrever as equações (2.2) como uma equação matricial da forma

$$\frac{d\phi}{dt} = -A\phi + \sigma\eta, \quad (2.4)$$

onde $A = (A^0 + \mathcal{J})$ e σ são as matrizes $2N \times 2N$ dadas por

$$A^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \mathcal{M} & \Gamma \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ J & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\Gamma\mathcal{T}} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

I acima é a matriz unitária $N \times N$; J é uma matriz $N \times N$ que nos dá a interação entre os sítios, e \mathcal{M} é a matriz diagonal $N \times N$ das massas $\mathcal{M}_{jl} = M\delta_{jl}$ (de fato M não é a massa de cada partícula, mas sim o coeficiente do termo quadrático do potencial local, estamos nos apropriando da terminologia usada em teorias de campos), Γ, \mathcal{T} são matrizes diagonais $N \times N$: $\Gamma_{jl} = \zeta\delta_{jl}$, $\mathcal{T}_{jl} = T_j\delta_{jl}$. η são ruídos brancos independentes. Nesse problema tanto M quanto ζ são os mesmos para todos os sítios.

A eq. (2.4) define um processo de Ornstein-Uhlenbeck que pode ser resolvido: multiplicando a direita os dois lados da eq.(2.4) por e^{At} passamos a ter

$$e^{At}d\phi = -e^{At}A\phi dt + e^{At}\sigma dB. \quad (2.6)$$

Usando a fórmula integral de Itô [46] para obtermos uma expressão para $d(e^{At}\phi)$ temos

$$d(e^{At}\phi) = Ae^{At}\phi dt + e^{At}d\phi. \quad (2.7)$$

usando a eq.(2.6) para substituímos o termo $d\phi$ na equação acima obtemos

$$d(e^{At}\phi) = e^{At}\sigma dB.$$

Integrando temos para a solução do processo de Ornstein-Uhlenbeck a seguinte equação integral estocástica

$$\phi(t) = e^{-At}\phi(0) + \int_0^t e^{-(t-s)A}\sigma dB, \quad (2.8)$$

onde $\phi(0)$ são as condições iniciais. Este é um processo Gaussiano determinado unicamente por sua média e covariância. Assumindo que $\phi(0)$ é distribuído de acordo com uma medida Gaussiana de média ϕ_0 e covariância C_0 , temos que a média evolui como

$$\langle \phi(t) \rangle = e^{-tA}\phi_0. \quad (2.9)$$

Por simplicidade posteriormente faremos $\phi(0) = 0$. Para obtermos a covariância temos de calcular $\langle \phi(t')\phi(t)^\top \rangle$. Usando a eq.(2.8) temos

$$\begin{aligned} \langle \phi(t')\phi(t)^\top \rangle &= \left\langle e^{-At'}\phi(0)\phi(0)^\top e^{-A^\top t} + \int_0^{t'} e^{-A(t'-s)}\sigma dB_s\phi(0)^\top e^{-A^\top t} + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^t e^{-At'}\phi(0)dB_s^\top e^{-A^\top(t-s)} + \int_0^t \int_0^{t'} e^{-A(t'-s)}\sigma dB_s dB_{s'}^\top \sigma e^{-A^\top(t-s')} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Usando a propriedade (D.5) da integral de Itô e a propriedade (2.3) do ruído branco temos

$$\langle \phi(t')\phi(t)^\top \rangle = e^{-At'}C_0e^{-A^\top t} + \int_0^{t'} e^{-A(t'-s)}\sigma^2 e^{-A^\top(t-s)} ds \quad \text{para } t' < t. \quad (2.11)$$

Colocando $e^{-A(t'-t)}$ em evidência e fazendo uma mudança de variável podemos escrever esta covariância na forma

$$\langle \phi(t)\phi(s) \rangle \equiv \mathcal{C}(t, s) = \begin{cases} e^{-(t-s)A}C(s, s) & t \geq s, \\ C(t, t)e^{-(s-t)A^\top} & t \leq s, \end{cases} \quad (2.12)$$

onde

$$C(t, t) = \int_0^t ds e^{-sA}\sigma^2 e^{-sA^\top}. \quad (2.13)$$

Estamos interessados em estudar as propriedades do estado estacionário, isto é, o comportamento do sistema no limite $t \rightarrow \infty$. Em [47] mostra-se que para matrizes A onde a parte real dos autovalores é positiva, a única solução da equação $AC + CA^\top = \sigma^2$ é a covariância

$$C = \int_0^\infty ds e^{-As}\sigma^2 e^{-A^\top s}.$$

Podemos mostrar este fato definindo $C \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} C(t, t)$; portanto

$$\begin{aligned} AC + CA^\top &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t (Ae^{-sA}\sigma^2 e^{-sA^\top} + e^{-sA}\sigma^2 e^{-sA^\top})A^\top ds \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \frac{d}{ds} \left(-e^{-As}\sigma^2 e^{-A^\top s} \right) ds = \sigma^2. \end{aligned} \quad (2.14)$$

A solução da equação $AC + CA^\top = \sigma^2$ nos dá a covariância da distribuição Gaussiana no estado estacionário. Com ela podemos calcular as grandezas de interesse do problema como o fluxo de calor e o perfil de temperatura.

Outra forma de encontrar a distribuição estacionária é usar a equação de Fokker-Planck [48, 49]

$$\frac{\partial \mu(\phi, t)}{\partial t} = \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial \phi_i} A_{i,j} \phi_j \mu(\phi, t) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \sigma_{i,j}^2 \mu(\phi, t), \quad (2.15)$$

onde $\mu(\phi, t)$ é a densidade de probabilidade do sistema estar na configuração ϕ no tempo t . Sabemos que no estado estacionário

$$\frac{\partial \mu_s}{\partial t} = 0, \quad (2.16)$$

onde o μ_s é a densidade de probabilidade no estado estacionário. Supondo uma solução Gaussiana de covariância C

$$\mu_s \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (C^{-1})_{i,j} \phi_i \phi_j \right], \quad (2.17)$$

e substituindo esta solução na equação (2.15) vamos obter novamente a equação

$$AC + CA^\top = \sigma^2 \quad (2.18)$$

Porém esta equação, apesar de parecer simples, é difícil de ser resolvida. Na referência [38] esta equação é resolvida para a cadeia unidimensional de osciladores harmônicos em contato com banhos térmicos nas extremidades. Para este sistema as matrizes A e σ são dadas por

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \omega^2 G & \lambda R \end{pmatrix}, \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\lambda k_b T (R + \eta S)} \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

onde $T = (T_+ + T_-)/2$, $\eta = (T_+ - T_-)/T$ e a diferença de temperatura rescalada, G , R e S são matrizes $N \times N$ definidas como

$$\begin{aligned} G_{ij} &= 2\delta_{ij} - \delta_{i+1,j} - \delta_{i,j+1} \\ R_{ij} &= \delta_{ij}(\delta_{i1} + \delta_{iN}) \\ S_{ij} &= \delta_{ij}(\delta_{i1} - \delta_{iN}). \end{aligned} \quad (2.20)$$

A solução deste problema está baseada na solução da equação

$$AC + CA^\top = \sigma^2. \quad (2.21)$$

Para resolver este problema vamos reescrever a matriz C em blocos $N \times N$

$$C = \begin{pmatrix} \tilde{U} & \tilde{Z} \\ \tilde{Z}^\dagger & \tilde{V} \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Quando os banhos térmicos estão a mesma temperatura vemos facilmente que

$$U_e = \frac{k_b T}{\omega^2} \phi^{-1}, \quad V_e = k_b T I, \quad Z_e = 0. \quad (2.23)$$

Essa solução coincide com a distribuição de equilíbrio de Boltzmann.

A solução para o estado estacionário fora do equilíbrio pode ser encontrada no apêndice F e nas referências [38, 13]. O procedimento é relativamente simples mas bastante trabalhoso. O perfil de temperatura encontrado para este sistema é dado por

$$T(i) = T(1 + \eta V_{ii}) = \begin{cases} T_+ - \nu \eta T \phi(1), \\ T [1 - \eta \nu \phi(2i - 1)] \\ T [1 + \eta \nu \phi(2(N - i) - 1)] \\ T_- + \nu \eta T \phi(1) \end{cases} \quad (2.24)$$

onde ϕ é dado pela equação (F.11). Este perfil de temperatura, como já foi dito, é praticamente constante no interior do sistema, onde portanto não existe um gradiente de temperatura. O fluxo de calor médio no estado estacionário é dado por

$$j = \frac{\omega^2 k_b T \eta}{\lambda} \phi(1), \quad (2.25)$$

e no limite de $N \rightarrow \infty$ temos

$$j = \frac{\omega^2 k_b T}{2\lambda} \left[1 + \frac{\omega^2}{2\lambda^2} - \frac{\omega}{\lambda} \sqrt{\frac{\omega^2}{4\lambda^2} + 1} \right] (T_+ - T_-) \quad (2.26)$$

Em [45] essa equação é resolvida para o chamado cristal harmônico auto consistente. Como já foi dito este modelo é descrito por

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \Phi & \Gamma \end{pmatrix} \quad e \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\Gamma\mathcal{T}} \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

Aqui I é a matriz identidade $N \times N$, $\Gamma_{ij} = \delta_{ij}\zeta$, $\mathcal{T}_{ij} = \delta_{ij}T_i$, Φ é uma interação entre primeiros vizinhos. O procedimento para a solução desta equação para este

sistema auto-consistente é bastante similar ao anterior, porém como agora temos reservatórios em todos os sítios não podemos nos aproveitar de algumas propriedades matriciais que facilitavam a solução anterior. Neste caso a solução está baseada na diagonalização do Laplaciano discreto. A solução final para cada bloco B da matriz covariância está apresentada abaixo

$$B_{ij} = \sum_{r=1}^N B_{ij}^r T_r \quad (2.28)$$

onde

$$B_{ij}^r = \sum_{k,l=1}^N F_{ik} F_{jl} f^{(B)}(c_k, c_l) F_{rk} F_{rl}, \quad (2.29)$$

onde $c_k = \cos\left(\frac{\pi k}{N+1}\right)$ e as funções $f^{(B)}$ para diferentes escolhas de B são dadas por

$$\begin{aligned} f^{(U)}(x, y) &= \frac{\lambda^2}{\omega^4} \frac{1}{G(x, y)}, \\ f^{(V)}(x, y) &= 1 - \frac{(x-y)^2}{G(x, y)}, \\ f^{(Z)}(x, y) &= \frac{\lambda}{\omega^2} \frac{y-x}{G(x, y)}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

onde $G(x, y) = (x-y)^2 + \frac{\lambda^2}{\omega^2}(\nu^2 + 2 - x - y)$. Como pode ser visto é bastante difícil executar cálculos com essa covariância. De fato, o que é feito na referência [45] é provar que a condição de auto consistência unicamente determina as temperaturas dos banhos térmicos interiores e que este sistema possui um único estado estacionário. Para o sistema infinito este estado estacionário é um estado em equilíbrio térmico local.

Gostaríamos de enfatizar o fato de que em ambos os trabalhos a solução do problema depende da solução da equação $AC + CA^\top = \sigma^2$, que só é possível para *interações simples* (primeiros vizinhos, homogênea no espaço). Além disso, este é um *problema linear*, portanto não é possível fazer uma extensão direta para um problema anarmônico.

A nossa abordagem para este problema consiste na construção de uma fórmula integral que possa ser aplicada para interações mais gerais entre os sítios e que possa ser estendido para sistemas com um potencial anarmônico local.

Para construirmos este formalismo vamos começar estudando o problema mais simples descrito pela equação

$$\frac{d\phi}{dt} = -A^0\phi + \sigma\eta, \quad (2.31)$$

onde A^0 é dado pela eq.(2.5). O objetivo é incluímos a interação entre os sítios mais tarde em um segundo passo.

A covariância para este problema é dada pela eq. (2.12) portanto precisamos de uma expressão para e^{-A^0t} que está apresentada no apêndice D

$$\exp(-tA^0) = e^{-t\frac{\zeta}{2}} \cosh(t\rho) \left\{ I + \frac{\tanh(t\rho)}{\rho} \begin{pmatrix} \frac{\zeta}{2} & I \\ -\mathcal{M} & -\frac{\zeta}{2} \end{pmatrix} \right\}. \quad (2.32)$$

Uma expressão similar é obtida para $\exp(-tA^{0T})$, onde $\zeta/2$, e \mathcal{M} são as matrizes diagonais $N \times N$ dadas por $(\zeta/2)I$ e MI , sendo I a matriz identidade $N \times N$; $\rho = ((\zeta/2)^2 - M)^{1/2}$, assumindo que $(\zeta/2)^2 > M > 0$. Quando $(\zeta/2)^2 < M$ vamos passar a ter cos no lugar de cosh e tan no lugar da tanh.

Para obtermos $\mathcal{C}(t, s)$ temos que calcular $C(s, s)$, dada por

$$C(s, s) = \int_0^s ds' e^{-s'A_0} \gamma e^{-s'A_0^\top}. \quad (2.33)$$

Usando a equação (2.32) temos a seguinte expressão

$$e^{-sA_0} \gamma e^{-sA_0^\top} = a_s^2 \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} + b_s \begin{pmatrix} 0 & \gamma \\ \gamma & -\zeta\gamma \end{pmatrix} + b_s^2 \begin{pmatrix} \gamma & -\frac{\zeta}{2}\gamma \\ -\frac{\zeta}{2}\gamma & \frac{\zeta^2}{4}\gamma \end{pmatrix} \right\} \quad (2.34)$$

onde

$$a_s = \exp(-s\zeta/2) \cosh(s\rho), \quad (2.35)$$

$$b_s = \frac{1}{\rho} \tanh(s\rho). \quad (2.36)$$

Calculando as integrais obtemos a seguinte expressão para a covariância

$$C(t, t) = \begin{pmatrix} \frac{T}{M} - \gamma e^{-t\zeta} h_1(t) & \gamma e^{-t\zeta} h_3(t) \\ \gamma e^{-t\zeta} h_3(t) & T - \gamma e^{-t\zeta} h_2(t) \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

onde

$$\begin{aligned} h_1(t) &= \frac{1}{8\rho^2 M} \{\zeta \cosh(2t\rho) + 2\rho \sinh(2t\rho)\} \\ h_2(t) &= \frac{1}{2\rho} + \frac{\zeta}{8\rho^2} \cosh(2t\rho) - \frac{1}{4\rho} \sinh(2t\rho) \\ h_3(t) &= \frac{1}{4\rho^2} \cosh(2t\rho) \end{aligned} \quad (2.38)$$

Estamos interessados no estado estacionário do sistema, portanto queremos estudar o limite de $t \rightarrow \infty$.

No modelo mais simples que estamos estudando, $J \equiv 0$, cada sítio está isolado dos demais e em contato com o seu próprio banho térmico. Conseqüentemente no limite de $t \rightarrow \infty$ cada sítio vai para a temperatura de equilíbrio do seu banho térmico, e o estado é Gaussiano com covariância dada por

$$C = \int_0^\infty ds e^{-sA^0} \sigma^2 e^{-sA^{0T}}. \quad (2.39)$$

Como foi dito anteriormente esta covariância C é a única solução da equação

$$A^0 C + C A^{0T} = \sigma^2. \quad (2.40)$$

Resolvendo esta equação temos

$$C = \begin{pmatrix} \frac{\mathcal{T}}{M} & 0 \\ 0 & \mathcal{T} \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

onde \mathcal{T} é uma matriz diagonal com elementos $T_i \delta_{ij}$, ou seja, para cada sítio temos uma medida de Gibbs na temperatura T_i como o esperado. Observe que essa covariância é a mesma que obtemos se tomarmos o limite de $t \rightarrow \infty$ na equação (2.37).

2.2 Fluxo de Calor

A grandeza de interesse neste problema é o fluxo de energia. Vamos obter uma expressão para o fluxo de energia considerando um Hamiltoniano mais geral da forma

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{2} p_j^2 + U^{(1)}(q_j) + \sum_{k \neq j} U^{(2)}(q_j - q_k) \right). \quad (2.42)$$

Para o cristal harmônico temos que $U^{(1)}(q_i)$ são os termos locais e $U^{(2)}(q_j - q_k) = \frac{1}{2}J_{lk}(q_j - q_k)^2$. As equações da dinâmica que estamos considerando são dadas por

$$\begin{aligned} dq_j &= p_j dt, & j &= 1, \dots, N, \\ dp_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} dt - \zeta p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j, & j &= 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Para obtermos uma expressão para o fluxo de energia vamos começar definindo a energia local de cada oscilador dada por

$$\begin{aligned} H_j(q, p) &= \frac{1}{2}p_j^2 + U^{(1)}(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq j} U^{(2)}(q_j - q_l) = \\ &= \frac{1}{2}p_j^2 + U^{(1)}(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{l > j} U^{(2)}(q_j - q_l) + \frac{1}{2} \sum_{l < j} U^{(2)}(q_j - q_l). \end{aligned} \quad (2.44)$$

O fator meio aparece pois a interação é entre pares. Os termos de fronteira $i = 1, N$ são definidos de forma similar, porém sem o fator 1/2 para as interações com $q_0 = 0$ e com $q_{N+1} = 0$. Com essa definição para a energia local temos que $H = \sum_{j=1}^N H_j$. Para obtermos uma expressão para o fluxo de calor devemos obter uma expressão para a variação da energia local

$$\begin{aligned} \frac{dH_j(q, p)}{dt} &= p_j \frac{dp_j}{dt} + \frac{\partial}{\partial q_k} \sum_k U^{(1)}(q_j) \frac{dq_k}{dt} + \\ &+ \sum_k \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\sum_{j < l} (U^{(2)}(q_j - q_l) + \sum_{j > l} U^{(2)}(q_l - q_j)) \right) \frac{\partial q_k}{dt}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Usando que $dq_k/dt = p_k$ e reescrevendo a equação acima em uma forma mais compacta temos

$$\begin{aligned} \frac{dH_i}{dt} &= p_i \frac{dp_i}{dt} + \nabla U^{(1)}(q_i) p_i + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{l > i} \nabla U^{(2)}(q_i - q_l) (p_i - p_l) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{l < i} \nabla U^{(2)}(q_l - q_i) (p_l - p_i). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Pela eq. (2.43) temos

$$\frac{dp_i}{dt} = -\zeta_i p_i - \nabla U^{(1)}(q_j) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} \sum_j \left(\sum_{k > j} U^{(2)}(q_j - q_k) + \sum_{l < j} U^{(2)}(q_l - q_j) \right) + \gamma_i^{1/2} \eta_i(t). \quad (2.47)$$

Calculando as derivadas e reescrevendo de forma mais compacta temos

$$\begin{aligned} \frac{dp_i}{dt} = & -\zeta p_i - \nabla U^{(1)}(q_i) + \\ & - \left(\frac{1}{2} \sum_{k>i} \nabla U^{(2)}(q_i - q_k) - \frac{1}{2} \sum_{j<i} \nabla U^{(2)}(q_j - q_i) + \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \sum_{l<i} \nabla U^{(2)}(q_l - q_i) + \frac{1}{2} \sum_{j>i} \nabla U^{(2)}(q_i - q_j) \right) + \gamma_i^{1/2} \eta_i(t). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Simplificando a equação acima e substituindo na expressão para dH_i/dt temos

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{dH_i}{dt} \right\rangle = & \left\langle -\zeta_i p_i^2 + p_i \gamma_i^{1/2} \eta_i \right\rangle + \\ & - \left\langle \sum_{k>i} \nabla U^{(2)}(q_i - q_k) \frac{(p_i + p_k)}{2} \right\rangle \\ & + \left\langle \sum_{l<i} \nabla U^{(2)}(q_l - q_i) \frac{(p_l + p_i)}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Vamos calcular $\langle p_i \gamma_i^{1/2} \eta_i \rangle$. Sabemos da equação (2.8) que p_i é dado por

$$p_i(t) = [e^{-tA} \phi_0]_i + \int_0^t ds [e^{-(t-s)A} \gamma^{1/2} \eta_i]_i, \quad (2.50)$$

de onde obtemos que

$$\begin{aligned} \left\langle \gamma_i^{1/2} \eta_i(t) p_i(t) \right\rangle &= \left\langle \gamma_i^{1/2} \eta_i(t) [e^{-tA} \phi_0]_{n+i} + \int_0^t ds \gamma_i^{1/2} \eta_i(t) (e^{-(t-s)A} \sigma \eta(s))_{i+n} \right\rangle \\ &= 0 + 2\zeta_i T_i \int_0^t ds e^{-(t-s)A_{n+i,i}} \delta_{t-s}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

onde usamos a propriedade (2.3). Usando que

$$\int_0^t ds \delta(t-s) = 1/2,$$

obtemos a seguinte expressão para o fluxo de energia

$$\left\langle \frac{dH_j(t)}{dt} \right\rangle = \langle R_j(t) \rangle - \langle \mathcal{F}_{j<} - \mathcal{F}_{j>} \rangle, \quad (2.52)$$

onde $\langle \cdot \rangle$ é a média com respeito a distribuição do ruído e $R_j(t)$ é o fluxo de energia do j -ésimo reservatório para o j -ésimo sítio dado por

$$\langle R_j(t) \rangle = \zeta (T_j - \langle p_j^2 \rangle). \quad (2.53)$$

O fluxo de energia dentro do sistema é dado por \mathcal{F}_j

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{j<} &= \sum_{l>j} \nabla U^{(2)}(q_j - q_l) \frac{p_j + p_l}{2}, \\ \mathcal{F}_{j>} &= \sum_{l<j} \nabla U^{(2)}(q_l - q_j) \frac{p_l + p_j}{2}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Em particular, se estivermos no estado estacionário, temos $\langle dH_j(t)/dt \rangle = 0$. Estas expressões serão usadas na seção (2.4) para estudarmos o fluxo de calor no estado estacionário.

2.3 Formalismo integral

Nessa seção vamos obter um formalismo integral para tratar o problema com interação entre os sítios como uma correção do problema mais simples onde $J \equiv 0$. A equação da dinâmica para o processo sem interação entre os sítios é

$$d\phi = -A^0\phi dt + \sigma dB. \quad (2.55)$$

Para esse processo já encontramos uma expressão para a covariância $\mathcal{C}(t, s)$. O que queremos fazer é encontrar a distribuição do processo mais complicado descrito por

$$d\phi = -A\phi dt + \sigma dB, \quad (2.56)$$

como uma correção a distribuição do processo mais simples (2.55).

Esse formalismo está baseado no teorema de Girsanov [46], que nos dá uma medida ρ para o processo (2.56), como uma correção da medida μ_C associada ao processo com $J \equiv 0$. Mais precisamente: para qualquer conjunto mensurável A , temos que $\rho(A) = E_0(1_{(A)}Z(t))$, onde E_0 é a esperança com respeito a medida μ_C e 1_A é a função característica e

$$Z(t) = \exp \left(\int_0^t u \cdot dB - \frac{1}{2} \int_0^t u^2 ds \right), \quad (2.57)$$

onde

$$\gamma_i^{1/2} u_i = -\mathcal{J}_{ij} \phi_j \quad j = 1 \cdots N. \quad (2.58)$$

O produto interno na expressão acima é em \mathbb{R}^{2N} . Note que da expressão (2.5) e da expressão acima, u_i é diferente de zero apenas para $i > N$. Daqui para frente usaremos a seguinte convenção de índices: i para índices no conjunto $[N + 1 \cdots 2N]$, j para índices em $[1 \cdots N]$ e k para índices $[1 \cdots 2N]$

Agora vamos obter expressões para $Z(t)$. Primeiro devemos observar que

$$u_i dB_i = \gamma^{-1/2} u_i \gamma^{1/2} dB_i = \gamma_i^{-1} \gamma_i^{1/2} u_i \gamma_i^{1/2} dB_i. \quad (2.59)$$

Substituindo na eq. (2.59) as eq. (2.58) e (2.55) temos

$$u_i dB_i = -\gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i - \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j A_{ik}^0 \phi_k dt, \quad (2.60)$$

onde estamos assumindo a soma sobre os índices k, j . O próximo passo é reescrever o termo que contem $d\phi_i$. Para isso vamos definir

$$F_1 = \sum \gamma_i^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_j. \quad (2.61)$$

Pela formula de Itô

$$dF_1 = \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial \phi_k} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F_1}{\partial \phi_k \partial \phi_l} d\phi_k d\phi_l. \quad (2.62)$$

Obtemos

$$dF_1 = \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i + \gamma_i^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} d\phi_j + 0. \quad (2.63)$$

O termo de derivada segunda é zero pois $\partial^2 / \partial \phi_l \partial \phi_k$ so possui termo de $k \neq l$, portanto $d\phi_k d\phi_l = 0$. Logo

$$\gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i = dF_1 - \gamma_i^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} d\phi_j. \quad (2.64)$$

Da equação (2.55) temos

$$d\phi_j = -A_{jk}^0 \phi_k dt, \quad (2.65)$$

portanto

$$\gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i = dF_1 + \gamma_i^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} A_{jk}^0 \phi_k dt. \quad (2.66)$$

Para o termo de $\frac{1}{2} \int_0^t u^2 ds$ temos

$$\begin{aligned} u_i &= -(\gamma_i^{1/2} \mathcal{J}_{ij} \phi_j) \\ u^2 &= \sum_i u_i u_i = \sum_i \sum_{j,l} \phi_j \mathcal{J}_{ji}^\top \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{il} \phi_l. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Portanto podemos escrever a seguinte expressão para $Z(t)$

$$Z(t) = \exp(-F_1(\phi(t)) + F_1(\phi(0)) - W_1 - W_2 + W_3 - W_4) \quad (2.68)$$

onde

$$W_1 = \int_0^t \sum_{i,j} M \phi_{i-N}(s) \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s) ds, \quad (2.69)$$

$$W_2 = \int_0^t \sum_{i,j} \zeta \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s) ds, \quad (2.70)$$

$$W_3 = \int_0^t \sum_{i,j} \phi_i \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_{j+N} ds, \quad (2.71)$$

$$W_4 = \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{i,j,j'} \phi_j \mathcal{J}_{j,i}^\top \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{i,j'} \phi_{j'}. \quad (2.72)$$

Para facilitar a visualização vamos reescrever as equações acima usando novamente a notação q e p

$$W_1 = \int_0^t \sum_{i,j} M q_i(s) \gamma_i^{-1} J_{ij} q_j(s) ds \quad (2.73)$$

$$W_2 = \int_0^t \sum_{i,j} \zeta \gamma_i^{-1} p_i(s) J_{ij} q_j(s) ds \quad (2.74)$$

$$W_3 = \int_0^t \sum_{i,j} p_i \gamma_i^{-1} J_{ij} p_j ds \quad (2.75)$$

$$W_4 = \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{i,j,j'} q_j J_{j,i}^\top \gamma_i^{-1} J_{i,j'} q_{j'} \quad (2.76)$$

2.4 A Lei de Fourier

Nesta seção vamos estudar o fluxo de calor no estado estacionário. Para isso temos de analisar a função de correlação de dois-pontos dada pela eq.(2.54). Para o fluxo

de calor do sistema para os reservatórios precisamos de calcular $\langle p_i^2 \rangle$; para o fluxo de calor no interior do sistema temos de calcular a correlação de momento com a posição $\langle p_v q_u \rangle$. Vamos começar calculando o fluxo de calor no interior do sistema.

As médias no estado estacionário serão obtidas como o limite

$$\langle p_u q_v \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle q_u(t) p_v(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \int q_u(t) p_v(t) Z(t) d\mu_C / \text{norm}. \quad (2.77)$$

O fator de normalização presente nesta expressão só é necessário no cálculo perturbativo, pois $E_0(1_A Z(t))$ é uma medida de probabilidade e não precisa ser normalizada. Para realizar as contas primeiro temos que notar que $\mathcal{C}(t, s)$, dado pelas equações (2.12)-(2.13) (para $t > s$), pode ser escrito como

$$\mathcal{C}(t, s) = \exp(-(t-s)A^0)C + \mathcal{O}(\exp[-(t+s)\zeta/2]). \quad (2.78)$$

É fácil verificar este fato se olharmos para a equação (2.37). Os efeitos do segundo termo do lado direito desta equação desaparecem na fórmula para a correlação no limite $t \rightarrow \infty$.

Vamos realizar uma análise perturbativa assumindo que o acoplamento J entre os sítios é pequeno. Expandindo $Z(t)$ no numerador e no denominador na expressão da covariância até ordem J temos

$$\langle p_u(t) q_v(t) \rangle = \frac{\langle \phi_u \phi_v (1 - F(t)) + F(0) - W_1 - W_2 + W_3 \rangle}{\langle 1 - F(t) + F(0) - W_1 - W_2 + W_3 \rangle}, \quad (2.79)$$

que pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \langle p_u(t) q_v(t) \rangle &= \langle \phi_u \phi_v (1 - F(\phi(t)) + F(\phi(0)) - W_1 - W_2 - W_3) \rangle \times \\ &\times (1 - \langle F(t) - F(0) + W_1 + W_2 - W_3 \rangle)^{-1}. \end{aligned} \quad (2.80)$$

Os termos F, W_1, W_2, W_3 são da ordem de J , que estamos considerando pequeno. Usando que $(1-x)^{-1} = 1+x+\dots$, obtemos até primeira ordem em J

$$\begin{aligned} \langle q_r(t) p_m(t) \rangle &= \langle q_r(t) p_m(t) \rangle_{\mu_0} - \langle q_r(t) p_m(t); F(t) \rangle_{\mu_0} + \langle q_r(t) p_m(t); F(0) \rangle_{\mu_0} + \\ &- \langle q_r(t) p_m(t); W_1 \rangle_{\mu_0} - \langle q_r(t) p_m(t); W_2 \rangle_{\mu_0} + \langle q_r(t) p_m(t); W_3 \rangle_{\mu_0}, \end{aligned}$$

onde μ_0 diz respeito a média com relação ao problema mais simples sem interação; o símbolo $\langle \cdot; \cdot \rangle$ significa a função truncada, i.e., $\langle AB; CDFG \rangle = \langle ABCDFG \rangle - \langle AB \rangle \langle CDFG \rangle$. Vamos calcular cada um dos termos da equação acima.

$$I = \langle q_r(t)p_m(t); W_1 \rangle = \left\langle q_r(t)p_m(t); \int_0^t \sum_{i,j} M q_i(s) \gamma_i^{-1} J_{ij} q_j(s) ds \right\rangle. \quad (2.81)$$

Para calcularmos estas médias usamos o teorema de Wick que se encontra no apêndice (B) e obtemos

$$I = M \int_0^t \sum_{ij} E_{ri}(t, s) H_{m,j}(t, s) \gamma_i^{-1} J_{ij} + E_{rj}(t, s) H_{m,i} \gamma_i^{-1} J_{ij}, \quad (2.82)$$

onde E e H são os elementos da matriz de covariância

$$\mathcal{C}(t, s) = \begin{bmatrix} E & F \\ H & G \end{bmatrix}, \quad (2.83)$$

com

$$E = e^{-\frac{\zeta}{2}(t-s)} \left(\cosh((t-s)\rho) + \frac{\zeta}{2\rho} \sinh((t-s)\rho) \right) \frac{T}{M} \quad (2.84)$$

$$F = e^{-\frac{\zeta}{2}(t-s)} \sinh((t-s)\rho) \frac{T}{\rho} \quad (2.85)$$

$$H = -e^{-\frac{\zeta}{2}(t-s)} \sinh((t-s)\rho) \frac{T}{\rho} \quad (2.86)$$

$$G = e^{-\frac{\zeta}{2}(t-s)} \left(\cosh((t-s)\rho) - \frac{\zeta}{2\rho} \sinh((t-s)\rho) \right) T \quad (2.87)$$

Substituindo as expressões para E e H obtemos

$$I = - \int_0^t \frac{e^{-(t-s)\zeta}}{2\zeta\rho M} \left(\cosh((t-s)\rho) + \frac{\zeta}{2\rho} \sinh((t-s)\rho) \right) \sinh((t-s)\rho) (J_{mr}T_r + J_{rm}T_m). \quad (2.88)$$

Essa integral é fácil de ser calculada e no limite $t \rightarrow \infty$ obtemos

$$I = - \frac{J_{mr}T_r + J_{rm}T_m}{4\zeta M}. \quad (2.89)$$

Passamos para o cálculo do segundo termo

$$II = \langle q_r(t)p_m(t); W_2 \rangle_{\mu_0} = \left\langle q_r(t)p_m(t); \int_0^t \sum_{i,j} \zeta \gamma_i^{-1} p_i(s) J_{ij} q_j(s) ds \right\rangle_{\mu_0}. \quad (2.90)$$

Repetindo os mesmos passos anteriores obtemos a seguinte integral

$$II = \int_0^t e^{-(t-s)\zeta} \left(-\frac{T_m J_{rm}}{2\rho^2} \sinh^2((t-s)\rho) + \frac{T_r J_{mr}}{2M} \left(\cosh^2((t-s)\rho) - \frac{\zeta^2}{4\rho^2} \sinh((t-s)\rho) \right) \right) ds \quad (2.91)$$

e o resultado dessa integral no limite de $t \rightarrow \infty$ é

$$II = \frac{T_r J_{mr} - T_m J_{rm}}{4\zeta M}. \quad (2.92)$$

Para o terceiro termo temos

$$III = \left\langle q_r(t) p_m(t); \int_0^t \sum_{i,j} p_i \gamma_i^{-1} J_{ij} p_j ds \right\rangle, \quad (2.93)$$

que é dada pela integral

$$\frac{T_m J_{rm} + T_r J_{mr}}{2\zeta\rho} \int_0^t e^{-(t-s)\zeta} \left(\sinh((t-s)\rho) \cosh((t-s)\rho) - \frac{\zeta}{2\rho} \sinh^2((t-s)\rho) \right) ds, \quad (2.94)$$

que é igual a zero.

Ainda temos de calcular o termo de fronteira que é dado por

$$F_1 = \left\langle q_r(t) p_m(t); \sum_{ij} \gamma_i^{-1} p_i J_{ij} q_j \right\rangle = G_{ri} H_{mj} + E_{rj} F_{mi} = \frac{T_r J_{rm}}{2\zeta M}. \quad (2.95)$$

o termo $F(0)$ vai a zero no limite de $t \rightarrow \infty$. Somando todos os termos obtemos

$$\langle q_r(t) p_m(t) \rangle = \frac{J_{rm}}{2\zeta M} (T_m - T_r). \quad (2.96)$$

Vemos da expressão (2.54) e do resultado acima que ao considerarmos apenas termo de primeira ordem em J na expansão de $Z(t)$ será obtido um fluxo de calor da ordem de J^2 .

Para o cálculo do fluxo de calor entre os reservatórios e os sítios temos de considerar os termos $\mathcal{O}J^2$ na expansão de $Z(t)$. A partir de agora vamos voltar a usar o vetor no espaço de fase $\phi = (q, p)$. Sabemos da equação (2.53) que o fluxo de calor entre os reservatórios e os sítios é dado pela correlação momento-momento

$$\langle \phi_u \phi_u \rangle = \frac{\int \phi_u \phi_u \exp(-F(t) + F(0) - W_a - W_b - W_c) d\mu_c}{\int \exp(-F(t) + F(0) - W_a - W_b - W_c) d\mu_c}. \quad (2.97)$$

Expandindo o numerador e o denominador da expressão acima e considerando apenas termos $\mathcal{O}(J^2)$ obtemos

$$\begin{aligned} \langle \phi_u \phi_u \rangle_\mu &= \langle \phi_u \phi_u \rangle - \langle \phi_u \phi_u; F_1(t) \rangle + \langle \phi_u \phi_u; F_1(0) \rangle - \langle \phi_u \phi_u; W_a \rangle - \langle \phi_u \phi_u; W_b \rangle \\ &- \langle \phi_u \phi_u; W_c \rangle + \langle \phi_u \phi_u; F_1^2/2 \rangle + \langle \phi_u \phi_u; F_1^2/2 \rangle - \langle \phi_u \phi_u; F_1 F_1 \rangle \\ &+ \langle \phi_u \phi_u; W_a W_b \rangle + \frac{1}{2} \langle \phi_u \phi_u; W_a^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle \phi_u \phi_u; W_b^2 \rangle \end{aligned} \quad (2.98)$$

onde estamos usando a seguinte notação:

$$W_a = \int_0^t \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{J}_{ij} A_{ik}^0 \phi_k(s) ds, \quad (2.99)$$

$$W_b = \int_0^t \phi_k(s) A_{ik}^{0\top} \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s) ds, \quad (2.100)$$

$$W_c = \frac{1}{2} \int_0^t \phi_{j'}(s) \mathcal{J}_{j'i}^\top \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s) ds. \quad (2.101)$$

Calculando cada termo separadamente obtemos

$$\begin{aligned} \langle \phi_u \phi_u, W_a W_a \rangle &= \sum_{i,j,i',j'} \frac{\mathcal{J}_{ij} \mathcal{J}_{i'j'}}{4\zeta^2 T_i T_{i'}} \int_0^t \int_0^t ds ds' 2(\langle \phi_u(t) \phi_i(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j+n}(s) \rangle \langle \phi_{i'}(s') \phi_{j'+n}(s') \rangle + \\ &+ \langle \phi_u(t) \phi_{i'}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'+n}(s') \rangle \langle \phi_i(s) \phi_{j+n}(s) \rangle + \\ &+ \langle \phi_u(t) \phi_{j+n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{i'}(s') \rangle \langle \phi_i(s) \phi_{j'+n}(s') \rangle + \\ &+ \langle \phi_u(t) \phi_i(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'+n}(s) \rangle \langle \phi_{j+n}(s) \phi_{i'}(s') \rangle + \\ &+ \langle \phi_u(t) \phi_{j+n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'+n}(s') \rangle \langle \phi_i(s) \phi_{i'}(s') \rangle + \\ &+ \langle \phi_u(t) \phi_i(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{i'}(s') \rangle \langle \phi_{j+n}(s) \phi_{j'+n}(s') \rangle). \end{aligned} \quad (2.102)$$

Usando as expressões para a covariância (2.12) e fazendo as integrais obtemos

$$\sum_i \frac{T_u \mathcal{J}_{u,u-n} \mathcal{J}_{i,i-n}}{2\zeta^3} t + \frac{\mathcal{J}_{u,i-n}^2 T_u}{2\zeta^4} + \frac{\mathcal{J}_{u,i-n}^2 T_u^2}{4\zeta^4 T_i} + \frac{\mathcal{J}_{u,j}^2 T_j}{4\zeta^4}. \quad (2.103)$$

Para facilitar o cálculo do termo $\langle \phi_u(t) \phi_u(t); W_b W_b \rangle$ vamos dividi-lo em quatro

partes A, B, C, D e usar as expressões para A^0 obtendo :

$$\begin{aligned}
 A &= \gamma_i^{-1} \gamma_{i'}^{-1} \mathcal{J}_{i,j} \mathcal{J}_{i',j'} \int_0^t \int_0^t ds ds' \langle \phi_u(t) \phi_u(t); M^2 \phi_{i-n}(s) \phi_j(s) \phi_{i'-n}(s') \phi_{j'}(s') \rangle \\
 B &= \gamma_i^{-1} \gamma_{i'}^{-1} \mathcal{J}_{i,j} \mathcal{J}_{i',j'} \int_0^t \int_0^t ds ds' \langle \phi_u(t) \phi_u(t); M^2 \zeta \phi_{i-n}(s) \phi_j(s) \phi_{i'}(s') \phi_{j'}(s') \rangle \\
 C &= \gamma_i^{-1} \gamma_{i'}^{-1} \mathcal{J}_{i,j} \mathcal{J}_{i',j'} \int_0^t \int_0^t ds ds' \langle \phi_u(t) \phi_u(t); \zeta M^2 \phi_i(s) \phi_j(s) \phi_{i'-n}(s') \phi_{j'}(s') \rangle \\
 D &= \gamma_i^{-1} \gamma_{i'}^{-1} \mathcal{J}_{i,j} \mathcal{J}_{i',j'} \int_0^t \int_0^t ds ds' \langle \phi_u(t) \phi_u(t); \zeta^2 \phi_i(s) \phi_j(s) \phi_{i'}(s') \phi_{j'}(s') \rangle. \quad (2.104)
 \end{aligned}$$

Vamos escrever cada um dos quatro termos explicitamente usando novamente o teorema de Wick para fazer as contrações

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{2 \mathcal{J}_{ij} \mathcal{J}_{i',j'} M^2}{\gamma_i \gamma_{i'}} \int_0^t \int_0^t ds ds' [\langle \phi_u(t) \phi_{i-n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_j(s) \rangle \langle \phi_{i-n}(t) \phi_{j'}(s) \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_{i'-n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'}(s) \rangle \langle \phi_{i-n}(t) \phi_j(s) \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_{i-n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{i'-n}(s) \rangle \langle \phi_j(s) \phi_{j'}(s') \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_{i-n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'}(s) \rangle \langle \phi_j(s) \phi_{i'-n}(s') \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_j(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{i'-n}(s') \rangle \langle \phi_{i-n}(s) \phi_{j'}(s') \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_j(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'}(s) \rangle \langle \phi_{i-n}(s) \phi_{i'-n}(s') \rangle]. \quad (2.105)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B &= \frac{2 \mathcal{J}_{ij} \mathcal{J}_{i',j'} \zeta M}{\gamma_i \gamma_{i'}} \int_0^t \int_0^t ds ds' [\langle \phi_u(t) \phi_{i-n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_j(s) \rangle \langle \phi_{i'}(t) \phi_{j'}(s) \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_{i'}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'}(s) \rangle \langle \phi_{i-n}(t) \phi_j(s) \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_{i-n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{i'}(s') \rangle \langle \phi_j(s) \phi_{j'}(s') \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_j(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'}(s) \rangle \langle \phi_{i-n}(s) \phi_{i'}(s') \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_j(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{i'}(s') \rangle \langle \phi_{i-n}(s) \phi_{j'}(s') \rangle + \\
 &\quad + \langle \phi_u(t) \phi_{i-n}(s) \rangle \langle \phi_u(t) \phi_{j'}(s) \rangle \langle \phi_j(s) \phi_{i'}(s') \rangle \quad (2.106)
 \end{aligned}$$

O termo C é igual ao termo B

$$\begin{aligned}
 D = \frac{2\mathcal{J}_{ij}\mathcal{J}_{i'j'}\zeta^2}{\gamma_i\gamma_{i'}} \int_0^t \int_0^t ds ds' [& \langle \phi_u(t)\phi_i(s) \rangle \langle \phi_u(t)\phi_j(s) \rangle \langle \phi_{i'}(t)\phi_{j'}(s) \rangle + \\
 & + \langle \phi_u(t)\phi_{i'}(s) \rangle \langle \phi_u(t)\phi_{j'}(s') \rangle \langle \phi_i(t)\phi_j(s) \rangle + \\
 & + \langle \phi_u(t)\phi_i(s) \rangle \langle \phi_u(t)\phi_{i'}(s') \rangle \langle \phi_j(s)\phi_{j'}(s') \rangle + \\
 & + \langle \phi_u(t)\phi_i(s) \rangle \langle \phi_u(t)\phi_{j'}(s) \rangle \langle \phi_j(s)\phi_{i'}(s') \rangle + \\
 & + \langle \phi_u(t)\phi_j(s) \rangle \langle \phi_u(t)\phi_{i'}(s') \rangle \langle \phi_i(s)\phi_{j'}(s') \rangle + \\
 & + \langle \phi_u(t)\phi_j(s) \rangle \langle \phi_u(t)\phi_{j'}(s) \rangle \langle \phi_i(s)\phi_{i'}(s') \rangle] \quad (2.107)
 \end{aligned}$$

Usando a expressão para covariância 2.12 e calculando as integrais obtemos

$$\begin{aligned}
 \langle p_u^2 \rangle = & \frac{1}{2} \left[\frac{J_{u,u-N}J_{i,i-N}}{2\zeta^3} T_u t + \frac{(J_{u,i-N})^2}{2\zeta^4} T_u + \frac{(J_{u,i-N})^2}{4\zeta^4} \frac{T_u^2}{T_i} + \right. \\
 & + \frac{(J_{u,j})^2}{4\zeta^4} T_j + \frac{J_{u,u-N}J_{i',i'-N}}{2\zeta^3} T_u t + \frac{(J_{u,j})^2}{4\zeta^4 m^2} T_j (\zeta^2 + M) + \\
 & + \frac{(J_{u,u-N})^2}{4\zeta^4 M} T_u (\zeta^2 + M) + \frac{(J_{i,u-N})^2}{4\zeta^4 M} T_u (\zeta^2 + M) + \\
 & + \frac{(J_{i,u-N})^2}{4\zeta^4 M} \frac{T_u^2}{T_i} (\zeta^2 + M) + \frac{(J_{u,j})^2}{4\zeta^2 M} T_j - \frac{(J_{u,j})^2}{4\zeta^2 M} T_u + \\
 & - \left. \frac{(J_{i,u-N})^2}{4\zeta^2 M} T_u + \frac{(J_{i,u-N})^2}{4\zeta^2 M} \frac{T_u}{T_i} \right] + \left[-\frac{J_{u,u-N}J_{i,i-N}}{4\zeta^3} T_u t + \right. \\
 & - \frac{J_{u,u-N}J_{i,i-N}}{4\zeta^3} T_u t - \frac{(J_{u,j})^2}{4\zeta^4} T_j - \frac{(J_{u,j})^2}{4\zeta^4} T_u - \frac{(J_{i,u-N})^2}{4\zeta^4} T_u \\
 & \left. - \frac{(J_{i,u-N})^2}{4\zeta^4} \frac{T_u^2}{T_i} - \frac{(J_{u,j})^2}{4\zeta^2 M} T_j \right]. \quad (2.108)
 \end{aligned}$$

Simplificando a expressão acima obtemos que o termo de ordem J^2 de $\langle p_u^2 \rangle = 0$. Portanto sobra apenas o termo de primeira ordem que é $\langle p_u^2 \rangle = T_u$

2.5 O fluxo de calor e o perfil de temperatura

De posse da expressão para a função de dois-pontos podemos calcular o fluxo de calor entre os sítios. Para isso usamos a equação (2.54), que para o caso do sistema

harmônico nos dá a seguinte expressão para o fluxo

$$\mathcal{F}_{j<} = \sum_{r>j} J_{jr} (q_j - q_r) \frac{(p_j + p_r)}{2}. \quad (2.109)$$

Portanto, para calcularmos o valor médio do fluxo de energia entre os sítios j e o sítio r com $r > j$, que estão conectados pela interação J , temos de calcular

$$\langle \mathcal{F}_{j<} \rangle = \sum_{r>j} \frac{J_{jr}}{2} \langle q_j p_j + q_j p_r - q_r p_j - q_r p_r \rangle. \quad (2.110)$$

Usando a equação (2.96) obtemos

$$\langle \mathcal{F}_{j<} \rangle = \sum_{r>j} \frac{J_{j,r}}{2\zeta M} (T_r - T_j). \quad (2.111)$$

Se nos determos ao caso particular de interação entre primeiros vizinhos temos

$$\mathcal{F}_{j \rightarrow j+1} \equiv \langle \mathcal{F}_{j<} \rangle = \frac{(J_{j,j+1})^2}{2\zeta M} (T_{j+1} - T_j). \quad (2.112)$$

Sabemos que no estado estacionário $dH/dt = 0$. Esse fato juntamente com a expressão (2.52) e o fato de $\langle R_i \rangle = 0$ nos leva a

$$\mathcal{F}_{1 \rightarrow 2} = \mathcal{F}_{2 \rightarrow 3} = \dots = \mathcal{F}_{N-1 \rightarrow N}. \quad (2.113)$$

Portanto podemos escrever

$$\begin{aligned} J_k (T_k - T_{k-1}) &= J_2 (T_2 - T_1) \\ J_k (T_k - T_{k-1}) &= J_3 (T_3 - T_2) \\ &\vdots \\ J_k (T_k - T_{k-1}) &= J_N (T_N - T_{N-1}) \end{aligned}$$

onde estamos usando a notação $J_i \equiv J_{j,j+1}$. Porém, se dividirmos cada equação por J_i e somarmos temos

$$J_k \left(\frac{1}{J_1} + \frac{1}{J_2} + \dots + \frac{1}{J_N} \right) (T_k - T_{k-1}) = (T_N - T_1). \quad (2.114)$$

Definindo $\frac{\chi}{(N-1)} = \left(\frac{1}{J_1} + \frac{1}{J_2} + \dots + \frac{1}{J_N} \right)^{-1}$ podemos escrever as seguintes equações

$$\begin{aligned} T_k &= \frac{\chi}{N-1} \frac{(T_N - T_1)}{J_{k-1}} + T_{k-1} \\ T_{k-1} &= \frac{\chi}{N-1} \frac{(T_N - T_1)}{J_{k-2}} + T_{k-2} \\ &\vdots \\ T_2 &= \frac{\chi}{N-1} \frac{(T_N - T_1)}{J_1} + T_1 \quad , \end{aligned}$$

de onde obtemos a seguinte expressão para o perfil de temperatura

$$T_k = T_1 + \frac{\chi}{N-1} (T_N - T_1) \left(\frac{1}{J_{k-1}} + \frac{1}{J_{k-2}} + \dots + \frac{1}{J_1} \right) \quad (2.115)$$

Para o fluxo de calor temos

$$\mathcal{F} = \chi \frac{(T_N - T_1)}{N-1}. \quad (2.116)$$

Para o caso simples onde temos a mesma interação entre quaisquer sítios vizinhos i.e. $J_1 = J_2 = \dots = J_{N-1}$, temos a seguinte expressão para a condutividade térmica

$$\chi = \frac{(\mathcal{J}_{1+N,2})^2}{2\zeta M} \quad (2.117)$$

Para fazer a comparação com os resultados da literatura vamos considerar a interação dada por

$$\phi = \omega^2 (\Delta + \nu^2) \quad (2.118)$$

onde Δ é o Laplaciano discreto na rede com condições de fronteira de Dirichlet dado por

$$\Delta = (2\delta_{i,j} - \delta_{i,j-1} + \delta_{i,j+1}). \quad (2.119)$$

Na nossa notação temos o termo de massa e a interação entre vizinhos próximos dados por

$$\begin{aligned} M &= \omega^2 (2 + \nu^2) \\ J_{i,j} &= \omega^2 (\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1}). \end{aligned} \quad (2.120)$$

Para este sistema obtemos a seguinte condutividade térmica

$$\kappa = \frac{\omega^2}{2\zeta(2 + \nu^2)}. \quad (2.121)$$

Para obtermos este resultado foi realizada uma análise perturbativa que considerava J pequeno, portanto nossa fórmula só é válida nessa aproximação. Para compararmos nosso resultado com a condutividade obtida em [45] dada por

$$\kappa = \frac{\omega^2}{\zeta} \frac{1}{2 + \nu^2 + \sqrt{\nu^2(4 + \nu^2)}} \quad (2.122)$$

temos que considerar ω^2 , que é o potencial entre as partículas, pequeno como $\nu^2 = 1/\omega^2$, temos que fazer uma expansão para ν grande. Logo podemos escrever

$$\sqrt{\nu(4 + \nu^2)} \approx \nu^2 \left(1 + \frac{4}{2\nu^2} \right) = \nu^2 + 2 \quad (2.123)$$

Assim obtemos o seguinte valor para a condutividade térmica

$$\kappa = \frac{\omega^2}{2\zeta(2 + \nu^2)}, \quad (2.124)$$

que é o mesmo resultado que obtemos com o cálculo perturbativo.

Uma possível generalização deste modelo é considerar o acoplamento com o banho térmico variando de sítio para sítio. Este problema é bastante similar ao estudado aqui, e pode ser tratado da mesma forma. Esta e outras generalizações podem ser encontradas em [50], que usaram o método aqui desenvolvido para tratar o problema. Neste trabalho a função de dois pontos obtida é

$$\langle \phi_u(t) \phi_v(t) \rangle = \frac{1}{(\zeta_{u-N} + \zeta_v)M} (\mathcal{J}_{u,v} T_{u-N} - \mathcal{J}_{u,v} T_v). \quad (2.125)$$

De posse desta equação é possível calcular o fluxo de calor e a condutividade térmica. Substituindo para \mathcal{J} e M os valores (2.120). Obtemos o seguinte valor para a condutividade térmica

$$\bar{\kappa} = \frac{\omega^2}{\bar{\zeta}(4 + 2\nu^2)} \quad (2.126)$$

onde

$$\bar{\zeta} = \frac{1}{N-1} \left(\sum_j \zeta_j - \frac{\zeta_1 + \zeta_N}{2} \right). \quad (2.127)$$

Esse resultado é igual ao obtido por [45] se considerarmos que estas contas são válidas para J pequeno.

Se tomarmos o limite dos banhos térmicos interiores indo a zero, i.e., $\zeta_j \rightarrow 0$ para $i = 2, \dots, N - 1$, mantendo $\zeta_1 = \zeta_N = \zeta$ fixo, recuperamos o comportamento do cristal harmônico onde condutividade térmica diverge e a lei de Fourier não é válida.

Vimos que os nossos resultados obtidos de forma perturbativa são iguais aos obtidos por [45]. Vimos também que para o modelo linear é possível inferir o comportamento do sistema com reservatórios apenas nas extremidades ao fazermos os acoplamentos com os banhos térmicos interiores ir a zero.

Capítulo 3

Tratamento Rigoroso

Neste capítulo vamos dar um suporte rigoroso para o resultado obtido na seção anterior. Os resultados dessa seção foram submetidos a publicação [51]. Queremos provar o seguinte teorema.

Teorema 1 *Para a cadeia harmônica de osciladores com reservatórios estocásticos em cada sítio (i.e., o sistema descrito pela eq. (2.2)), para o caso de acoplamento fraco entre primeiros vizinhos, i.e. $J_{jl} = J(\delta_{l,j+1} + \delta_{l,j-1})$, com $J < J_0$ para algum J_0 pequeno, a lei de Fourier é válida*

$$\mathcal{F} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \mathcal{F}_{j \rightarrow} \rangle = -\frac{\chi}{N-1} (T_N - T_1), \quad (3.1)$$

com a condição de “auto-consistência” $\langle R_j \rangle = 0$ para os sítios interiores, e com a condutividade térmica dada por

$$\chi = \frac{J^2}{2\zeta M} + \mathcal{O}(J^3). \quad (3.2)$$

Repetindo os mesmos passos anteriores temos que calcular a seguinte função de dois pontos no estado estacionário

$$\langle \phi_u(t) \phi_v(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \int \phi_u(t) \phi_v(t) Z(t) d\mu_C / \int Z(t) d\mu_C. \quad (3.3)$$

Como já foi dito o fator de normalização presente nesta expressão só é necessário no cálculo perturbativo pois $\int Z(t) d\mu_C = 1$.

Para calcularmos esta função de dois pontos vamos expandir $Z(t)$ em séries de potência $\exp[\lambda W] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda W)^n}{n!}$ obtendo

$$\langle \phi_u(t)\phi_v(t) \rangle = \langle \phi_u(t)\phi_v(t) (1 + \lambda W + (\lambda W)^2/2 + \dots) \rangle_{\mu_0}. \quad (3.4)$$

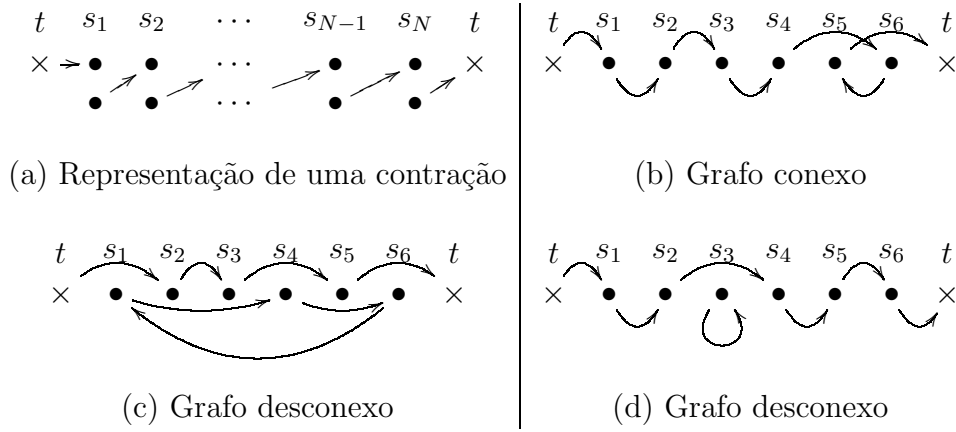
Como a medida μ_0 é uma medida Gaussiana com covariância dada pela eq. (2.12) podemos usar o teorema de Wick (D) para calcular essas médias como o produto de covariâncias. Vamos escrever explicitamente estes termos até a segunda ordem para visualizarmos a estrutura destas contrações

$$\begin{aligned} \langle \phi_u(t)\phi_v(t) \rangle &= \langle \phi_u(t)\phi_v(t) \rangle_{\mu_0} + \int_0^t \langle \phi_u(t)\phi_v(t)(M\phi_{i-N}(s)\gamma_i^{-1}\mathcal{J}_{ij}\phi_j(s)) \rangle ds + \\ &+ \int_0^t \langle \phi_u(t)\phi_v(t)\zeta\gamma_i^{-1}\phi_i(s)\mathcal{J}_{ij}\phi_j(s) \rangle ds + \int_0^t \langle \phi_u(t)\phi_v(t)\phi_i\gamma_i^{-1}\mathcal{J}_{ij}\phi_{j+N} \rangle ds + \\ &+ \int_0^t \frac{1}{2} \langle \phi_u(t)\phi_v(t)\phi_j(s)\mathcal{J}_{j,i}\gamma_i^{-1}\mathcal{J}_{i,j'}\phi_{j'}(s) \rangle ds + \\ &+ \int_0^t \int_0^t \langle \phi_u(t)\phi_v(t)(M\phi_{i-N}(s)\gamma_i^{-1}\mathcal{J}_{ij}\phi_j(s))(M\phi_{i'-N}(s')\gamma_{i'}^{-1}\mathcal{J}_{i'j'}\phi_{j'}(s')) \rangle ds ds' + \\ &+ \int_0^t \int_0^t \langle \phi_u(t)\phi_v(t)(\zeta\gamma_i^{-1}\phi_i(s)\mathcal{J}_{ij}\phi_j(s))(\zeta\gamma_{i'}^{-1}\phi_{i'}(s')\mathcal{J}_{i'j'}\phi_{j'}(s')) \rangle ds ds' + \\ &+ \int_0^t \int_0^t \langle \phi_u(t)\phi_v(t)(\phi_i(s)\gamma_i^{-1}\mathcal{J}_{ij}\phi_{j+N}(s))(\phi_{i'}(s')\gamma_{i'}^{-1}\mathcal{J}_{i'j'}\phi_{j'+N}(s')) \rangle ds ds'. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Ao usarmos o teorema de Wick vamos obter termos com o produto de duas covariâncias, três covariâncias e assim por diante, ou seja, vamos obter termos da seguinte forma

$$\begin{aligned} &\int_0^t \mathcal{C}(t, s_1)\mathcal{C}(s_1, t)ds_1 + \int_0^t \int_0^t \mathcal{C}(t, s_1)\mathcal{C}(s_1, s_2)\mathcal{C}(s_2, t)ds_1 ds_2 + \dots + \\ &+ \int_0^t \dots \int_0^t \mathcal{C}(t, s_1) \dots \mathcal{C}(s_n, t)ds_1 ds_2 \dots ds_n + \dots \end{aligned} \quad (3.6)$$

Na expressão acima estamos omitindo os índices da matriz covariância.



Na figura (a) estamos representando diagramaticamente uma possível contração. Vemos que para o termo de ordem N na expansão da exponencial temos 2^N campos $\phi_\alpha(s_\alpha)$ representados pelos círculos, mais dois campos externos $\phi_v(t)$ e $\phi_u(t)$ representados pelo \times . Cada seta nesse diagrama representa um termo $C(s_\alpha, s_\beta)$. Na figura (b) estamos representando a seguinte integral

$$\int_0^t \mathcal{C}(t, s_1)\mathcal{C}(s_1, s_2)\mathcal{C}(s_2, s_3)\mathcal{C}(s_3, s_4)\mathcal{C}(s_4, s_6)\mathcal{C}(s_6, s_5)\mathcal{C}(s_5, t)ds_1 \cdots ds_6$$

, que é uma das contrações possíveis proveniente do termo de terceira ordem na expansão da exponencial. Vemos que este é um grafo conexo, i.e., todos os pontos internos estão ligados por algum caminho aos vértices externos deste diagrama.

A figura (c) representada outra possível contração. Vemos que este é um grafo desconexo: os pontos s_1, s_4, s_6 não estão ligados às pernas externas. Na figura (d) mostramos outro grafo desconexo: neste caso o ponto s_3 não está ligado às pernas externas.

É fácil notar que as contrações que produzem grafos desconexos explodem no limite de $t \rightarrow \infty$, porém sabemos que os grafos desconexos não entram na teoria perturbativa porque eles são cancelados pelo fator de normalização [52].

Vemos que o termo de ordem n da exponencial possui 2^n campos. Ao usarmos o teorema de Wick temos $(2n - 1)!!$ formas de realizar as contrações, portanto não

vamos ter problemas de contagem com essa série. Grosseiramente falando temos

$$\left| \int \frac{\phi^{2n}}{n!} \right| = \left| \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^{(2n-1)!!} (\underbrace{\mathcal{C} \cdots \mathcal{C}}_n) \right| \leq \frac{2n!!}{n!} |\mathcal{C} \cdots \mathcal{C}| = 2^n |\mathcal{C} \cdots \mathcal{C}|. \quad (3.7)$$

Ou seja, para controlarmos esta expansão temos de encontrar uma cota para o produto das n covariâncias \mathcal{C} da forma $c^n J^n$. Dessa forma, pelo menos para J pequeno, essa análise simples garante a convergência da série perturbativa. Portanto temos de encontrar uma cota para

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \cdots \int_0^t \mathcal{C}(t, s_1) \mathcal{C}(s_1, s_2) \mathcal{C}(s_2, s_3) \cdots \mathcal{C}(s_{k-1}, s_k) \mathcal{C}(s_k, t) ds_1 ds_2 \cdots ds_k. \quad (3.8)$$

Observe que pelo fato de considerarmos apenas os grafos conexos temos de nos preocupar apenas com termos da forma acima, pois todos os grafos conexos podem ser obtidos do grafo acima, bastando renomear os índices. A matriz covariância pode ser cotada por $ce^{-\alpha t}$, pois

$$\begin{aligned} \|C\| &\leq c_1(1 - e^{-2\alpha t}), \\ \|e^{-tA^0}\| &\leq c_2 e^{-\alpha t}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde $\alpha = \min\{\zeta/2, M/\zeta\}$ e $\|\cdot\|$ é uma cota matricial que pode ser obtida pela desigualdade de Holmgren's [53] abaixo

Lema 1 *Seja $a_{\alpha\gamma}$ uma matriz que obedece*

$$\sup_{\alpha} \left(\sum_{\gamma} |a_{\alpha\gamma}| \right) = A, \quad \sup_{\gamma} \left(\sum_{\alpha} |a_{\alpha\gamma}| \right) = B$$

Então a define um operador em $\ell^2(\mathbb{Z}^\nu)$ com

$$\|a\| \leq A^{1/2} B^{1/2}.$$

Usando esta cota na equação (3.8) temos

$$\left| \int_0^t \mathcal{C}(t, s_1) \mathcal{C}(s_1, s_2) \cdots \mathcal{C}(s_n, t) ds_1 \cdots ds_n \right| \leq c_3 \int_0^t e^{-\alpha|t-s_1|} e^{-\alpha|s_1-s_2|} \cdots e^{-\alpha|s_n-t|} ds_1 \cdots ds_n.$$

O lado direito da equação acima pode ser calculado exatamente no limite de $t \rightarrow \infty$, e o resultado é o número de Catalan de ordem $n + 1$. A prova deste fato esta no apêndice E. Como não precisamos deste valor exato vamos usar o seguinte lema para cotar esta integral

Lema 1.1 *Seja*

$$I_t = \int_0^t e^{-\alpha|t-s|} e^{-\alpha|s_1-s_2|} \dots e^{-\alpha|s_n-t|} ds_1 \dots ds_n, \quad \alpha > 0$$

então, $\lim_{t \rightarrow \infty} I_t \leq (c_\alpha)^n$, onde c_α não depende de n

Prova Primeiro vamos observar que a convolução de $N + 1$ funções pode ser escrita na forma da equação (3.8). Seja a seguinte convolução

$$(f * f)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(y)f(x-y)dy \equiv g(x). \quad (3.10)$$

Agora vamos olhar para

$$\begin{aligned} (f * (f * f))(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(k)g(x-k)dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)f(y)f(x-k-y)dkdy, \quad k+y=w \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)f(w-k)f(x-w)dydw \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(u-v-w)f(w-k)f(k)dydw, \quad w' = w+v \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(u-w')f(w'-v-k)f(k)dydw', \quad k' = k+v \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(u-w')f(w'-k')f(k'-v)dy'dw'. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Na frente de cada equação colocamos a mudança de variável usada. Podemos repetir esse procedimento para N convoluções. Portanto temos que

$$\begin{aligned} I_t &= \int_0^t e^{-\alpha|t-s_1|} e^{-\alpha|s_1-s_2|} \dots e^{-\alpha|t-s_N|} ds_1 ds_2 \dots ds_N \leq \\ &\leq \int_0^\infty e^{-\alpha|t-s_1|} e^{-\alpha|s_1-s_2|} \dots e^{-\alpha|t-s_N|} ds_1 ds_2 \dots ds_N. \quad \forall t > 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

Segue então a seguinte desigualdade

$$I \leq \frac{1}{2} \underbrace{f * f * \dots * f * f}_{N+1}(t-t) = \frac{1}{2} f * f * \dots * f(0), \quad (3.13)$$

onde $f(x) = e^{-\alpha|x|}$

Calculando formalmente a transformada de Fourier de f temos

$$\begin{aligned} \tilde{f}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx} e^{-\alpha|x|} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2\alpha}{\alpha^2 + p^2}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Desta forma temos que

$$\frac{2}{\sqrt{2\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{1+4p^2} \right)^{N+1} dp = \frac{4}{\sqrt{2\pi\alpha}} \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{1+4p^2} \right)^{N+1} dp. \quad (3.15)$$

Separando esta integral em duas regiões

$$\frac{4}{\sqrt{2\pi\alpha}} \int_0^c \left(\frac{1}{1+p^2/\alpha} \right)^{N+1} dp + \frac{4}{\sqrt{2\pi\alpha}} \int_c^{\infty} \left(\frac{1}{1+p^2/\alpha} \right)^{N+1} dp, \quad (3.16)$$

onde $c \geq 1$ podemos cotar a primeira integral observando que $1/(1+p^2/\alpha) \leq 1$. Já a segunda integral pode ser cotada observando que $1/(1+p^2/\alpha) \leq 1/(p^2/\alpha)$. Assim temos a seguinte cota

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{1+p^2/\alpha} \right)^{N+1} dp < 2c + \frac{2c^{3-2N}}{\alpha^{-2(N-1)}(2N-3)} < 2c + 1, \quad \forall N \geq 2. \quad (3.17)$$

Usando o teorema de Parseval, que nos diz que $\mathcal{L}^{-1}(f(p)g(p)) = (f * g)(x)$ temos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}^2(p) e^{ipx} dp = \int_{-\infty}^{\infty} f(y) f(x-y) dy. \quad (3.18)$$

Iterando obtemos

$$f * f * f * \dots * f(x) = 2\pi^{(N-1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{f}(p))^{N+1} e^{ipx} dp. \quad (3.19)$$

Calculando em $x = 0$ temos

$$f * f * f * \dots * f(0) = \frac{1}{2} (\sqrt{2\pi})^{(N-1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2^{N+1}}{2\pi^{(N+1)/2} \alpha^{N+1}} \left(\frac{1}{1+p^2/\alpha} \right)^{N+1} dp \leq (c_\alpha)^N, \quad (3.20)$$

onde usamos a cota uniforme em N da equação (3.17).

Usando o lema acima podemos cotar os termos de ordem J^2 e maiores na função de dois pontos por

$$\sum_{j=2}^{\infty} (c'J)^n \leq c''J^2 \quad (3.21)$$

onde c' e c'' são constantes que não dependem de n . Usando o resultado do capítulo 2, onde calculamos a função de dois pontos $\langle \phi_u \phi_v \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \phi_u(t) \phi_v(t) \rangle$, obtemos

$$\langle \phi_u \phi_v \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2\zeta M} [\mathcal{J}_{v+N, u-N} T_{u-N} - \mathcal{J}_{u, v} T_v] & \text{para } u \in [N+1, \dots, 2N], v \in [1, \dots, N], \\ T_u \delta_{u, v} & \text{para } u, v \in [N+1, \dots, 2N]. \end{cases} \quad (3.22)$$

E a expressão para o fluxo de calor

$$\mathcal{F}_{\rightarrow} = \sum_{r>j} \mathcal{J}_{j+N, r} (\phi_j - \phi_r) \frac{(\phi_{j+N} + \phi_{r+N})}{2}, \quad r \in [1, \dots, N]. \quad (3.23)$$

Vemos que ao considerar todas as ordens em J , vamos obter $J \times cJ^2 = cJ^3$ para a condutividade térmica χ . Os termos de temperatura $T_{j+1} - T_j$ podem ser extraídos da análise perturbativa. Portanto o teorema 1 é válido.

Capítulo 4

Cristal anarmônico

Alguns trabalhos defendem a hipótese de que a anarmonicidade local (no sítio) é suficiente para garantir a lei de Fourier [29, 26]. Por outro lado uma análise perturbativa [30] mostra, para um sistema anarmônico, que o fluxo de calor não depende do tamanho do sistema.

No trabalho [28], conclui-se através do estudo numérico dos modelos FK, ϕ^4 e Sinh-Gordon que apenas a anarmonicidade do potencial local é insuficiente para assegurar uma condutividade térmica normal nesses sistemas (veja a figura (4.1)). É feito um estudo detalhado para cada um dos modelos acima concluindo-se que o caráter da condução de calor é determinado pelo espectro das excitações não lineares. A razão é que as peculiaridades das excitações não lineares e de suas interações prescrevem qual vai ser o mecanismo de espalhamento da energia em cada modelo. Esse trabalho também traz uma discussão sobre qual o tipo de termostato mais adequado para se utilizar nas simulações.

Para o modelo ϕ^4 foi feita uma análise em [31] que conclui que para a região de baixa temperatura o sistema se comporta como um sistema integrável e a condutividade térmica diverge. Para a região de temperatura intermediária a condutividade térmica tem o mesmo comportamento que o apresentado para o modelo FPU- β , e na região de alta temperatura a condutividade térmica é normal(veja fig. (4.2)).

Existem na literatura alguns trabalhos rigorosos sobre o papel da anarmonicidade. Em [54] é estudada a mecânica estatística de não equilíbrio de um sistema

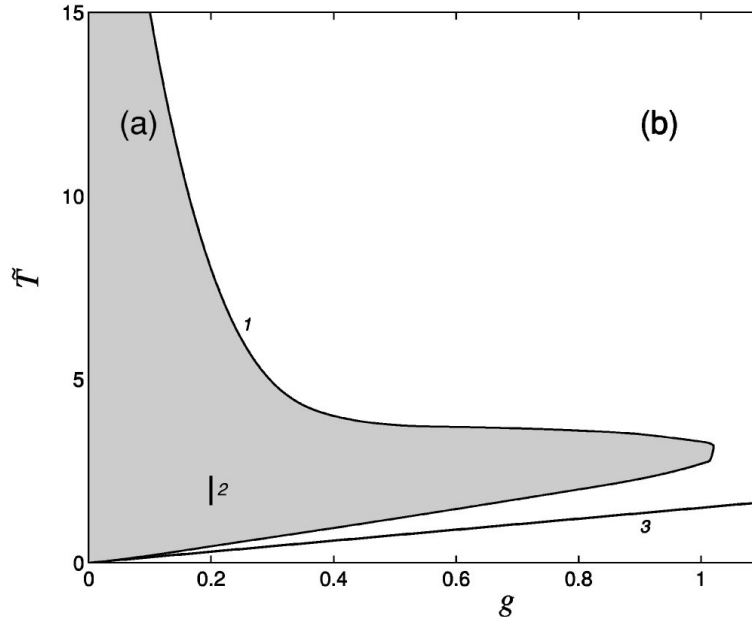


Figura 4.1: Região no espaço de parâmetros (g, \tilde{T}) onde a condutividade térmica para o potencial de FK converge (a) e diverge (b). Para o potencial ϕ^4 só é detectada condutividade térmica finita acima da linha (3) (onde $g = 1/\epsilon$, ϵ é o coeficiente do potencial, $\tilde{T} = T/\epsilon$)

Hamiltoniano não linear de dimensão finita acoplado a dois banhos térmicos infinitos que estão a diferentes temperaturas. É demonstrado que sobre certas suposições nas condições iniciais o sistema evolui para um único estado estacionário de não equilíbrio. A abordagem usada neste trabalho consiste em reduzir, sob suposições aceitáveis, o estudo da dinâmica do sistema acoplado (um sistema Hamiltoniano de dimensão infinita) em um sistema dinâmico estocástico de dimensão finita. Cada banho térmico é um sistema Hamiltoniano linear de dimensão infinita. O sistema menor é um sistema Hamiltoniano não linear com um número arbitrário, porém finito, de graus de liberdade; o potencial tem que ser do tipo quártico. Os reservatórios estão acoplados à primeira e à última partícula do sistema.

Em [55] é estudada uma cadeia de partículas fortemente não linear acoplada a dois banhos térmicos de diferentes temperaturas. Prova-se a existência e a unicidade de um estado estacionário para qualquer temperatura. Esse resultado é uma

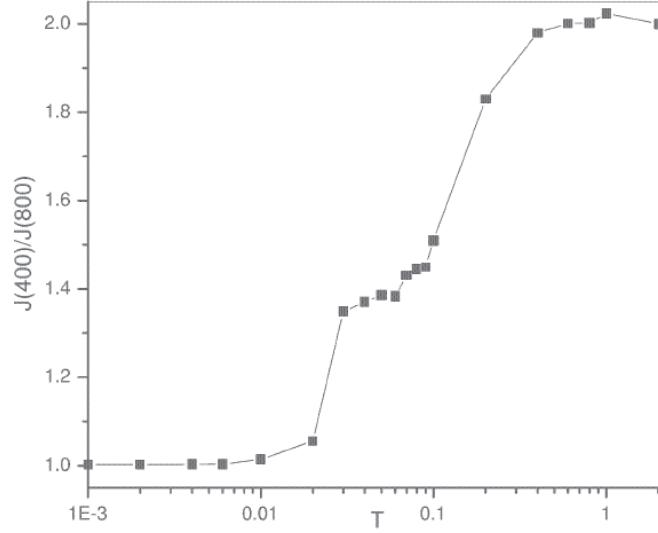


Figura 4.2: Razão do fluxo de calor $J(400)/J(800)$ vs temperatura média $T = (T^+ - T^-)/2$

extensão do trabalho [54] para potenciais com crescimento arbitrário no infinito.

Mais recentemente [56] trata o sistema de uma cadeia Hamiltoniana composta de osciladores anarmônicos fracamente acoplados em uma rede tridimensional $\mathbb{Z}_{2N} \times \mathbb{Z}^2$ sujeitos a forças estocásticas que simulam o papel de reservatórios térmicos, de temperaturas T_1 e T_2 nos hiperplanos 0 e N . Neste trabalho é introduzido um truncamento para as equações de Hopf que descrevem o estado estacionário do sistema, que leva a uma equação não linear para as funções de correlação de dois pontos. É mostrado que estas equações têm uma única solução, que para N grande, é aproximadamente um estado de equilíbrio local satisfazendo a lei de Fourier.

Em [57] é estudada uma cadeia de osciladores harmônicos na presença de um potencial anarmônico local da forma $\lambda\phi^4$. Em uma análise perturbativa mostra-se a validade da lei de Fourier.

Uma extensão dos resultados da seção anterior é tratar o problema harmônico com a adição de um potencial anarmônico para verificarmos se a anarmonicidade muda drasticamente o comportamento do sistema, este resultado foi publicado em

[58]. Acredita-se que pelo menos para alguma região de parâmetros a não harmonicidade é capaz de assegurar a lei de Fourier, porém o problema anarmônico é um problema matematicamente difícil. Neste capítulo vamos usar a mesma estratégia usada para o problema harmônico para tratar o problema anarmônico. Nosso tratamento será ingênuo: não justificaremos a validade da teoria perturbativa nem a fórmula de Girsanov. Porém acreditamos que um tratamento rigoroso deva ser possível se usarmos técnicas mais refinadas como uma expansão em “cluster” para justificar a teoria perturbativa. Existem resultados na literatura para modelos similares como os modelos tratados em [59, 60].

4.1 Descrição do Modelo

Vamos analisar a dinâmica estocástica de Langevin de um cristal anarmônico, isto é, queremos estudar um modelo de campo escalar na rede, com variáveis de *spin* não limitadas, em uma caixa $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ acoplados a banhos térmicos estocásticos em cada sítio. Precisamente estamos considerando um sistema de N osciladores com o Hamiltoniano

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} [p_j^2 + Mq_j^2] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq l=1}^N q_l J_{lj} q_j + \sum_{j=1}^N \lambda \mathcal{P}(q_j), \quad (4.1)$$

onde $M > 0$, \mathcal{P} é um potencial anarmônico local. A evolução temporal é dada pelas seguintes equações diferenciais estocásticas

$$\begin{aligned} dq_j &= p_j dt, & j &= 1, \dots, N, \\ dp_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} dt - \zeta p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j, & j &= 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde B_j são processos de Wiener independentes, isto é, dB_j/dt são ruídos branco independentes, ζ é a constante de acoplamento com o banho térmico e $\gamma_j = 2\zeta T_j$, onde T_j é a temperatura do j -ésimo banho térmico.

4.2 Formalismo Integral

Novamente vamos obter uma fórmula integral para as funções de correlação. Porém, devido ao potencial anarmônico, a fórmula para $Z(t)$ é um pouco mais complicada. Como no caso linear, a estratégia é usarmos a solução para o caso mais simples onde $J \equiv 0$ e $\lambda \equiv 0$. Depois iremos adicionar a interação entre sítios e o potencial on-site anarmônico como uma correção usando o teorema de Girsanov, para depois realizar uma conta perturbativa.

As equações da dinâmica na forma matricial são dadas por

$$\dot{\phi} = -A\phi - \lambda\mathcal{P}'(\phi) + \sigma\eta, \quad (4.3)$$

onde $A = (A^0 + \mathcal{J})$ e σ são matrizes $2N \times 2N$ dadas por

$$A^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \mathcal{M} & \Gamma \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ J & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\Gamma\mathcal{T}} \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

I é a matriz identidade $N \times N$; J é a matriz $N \times N$ para a interação entre os sítios; e \mathcal{M} , Γ , \mathcal{T} são matrizes diagonais $N \times N$ dadas por: $\mathcal{M}_{jl} = M\delta_{jl}$, $\Gamma_{jl} = \zeta\delta_{jl}$, $\mathcal{T}_{jl} = T_j\delta_{jl}$. η são ruídos brancos independentes; $\mathcal{P}'(\phi)$ é uma matriz $2N \times 1$ onde $\mathcal{P}'(\phi)_j = 0$ para $j = 1, \dots, N$ e

$$\mathcal{P}'(\phi)_i = \frac{d\mathcal{P}(\phi_{i-N})}{d\phi_{i-N}} \quad \text{para } i = N+1, \dots, 2N. \quad (4.5)$$

O teorema de Girsanov nos dá uma medida ρ para o processo (4.3), como uma correção da medida μ_C associada ao processo com $J \equiv 0$ e $\lambda \equiv 0$ que já foi resolvido anteriormente. Mais precisamente: para qualquer conjunto mensurável A , temos que $\rho(A) = E_0(1_{(A)}Z(t))$, onde E_0 é a esperança com respeito a medida μ_C e 1_A é a função característica e

$$\begin{aligned} Z(t) &= \exp\left(\int_0^t u \cdot dB - \frac{1}{2} \int_0^t u^2 ds\right), \\ \gamma_i^{1/2} u_i &= -\mathcal{J}_{ik}\phi_k - \lambda\mathcal{P}'(\phi)_i. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Se compararmos a expressão para $\gamma_i^{1/2} u_i$ do caso harmônico eq. (2.58) com a expressão acima, vemos a presença de um termo extra dado por $\lambda\mathcal{P}'(\phi)_i$ devido ao potencial anarmônico.

Repetindo a mesma idéia do caso linear temos de encontrar uma expressão para $Z(t)$. Note que $u_i dB_i$ pode ser escrito como

$$u_i dB_i = \gamma_i^{-1/2} u_i \cdot \gamma_i^{1/2} dB_i = \gamma_i^{-1/2} u_i \cdot (d\phi_i + A_{ik}^0 \phi_k dt) \quad (4.7)$$

$$= (-\gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j - \gamma_i^{-1} \lambda \mathcal{P}'(\phi)_i) (d\phi_i + A_{ik}^0 \phi_k dt). \quad (4.8)$$

Na equação acima usamos a expressão (4.3) com $J \equiv 0$ e $\lambda = 0$ para substituímos o termo dB_i . O próximo passo é substituir os termos com $d\phi_i$, para isso usaremos a formula de Itô para as funções

$$F_1(\phi(t)) = \gamma_i^{-1} \phi_i(t) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(t), \text{ e } F_2(\phi(t)) = \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'_i(\phi)(t) \phi_i(t).$$

Dessa forma obtemos as seguinte expressões

$$\gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i = dF_1 + \gamma_i^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} A_{jk}^0 \phi_k dt \quad (4.9)$$

$$\gamma_i^{-1} \mathcal{P}'_i(\phi(t)) d\phi_i = dF_2 + \lambda \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{P}''_i(\phi)(s) A_{i-N,k}^0 \phi_k(s) dt. \quad (4.10)$$

Na equação acima usamos o fato de $d\phi_j = -A_{jk}^0 \phi_k dt$. Substituindo os termos com $d\phi_i$ na expressão (4.8) pelas equações (4.10),(4.9) obtemos

$$\begin{aligned} \int_0^t u \cdot dB &= -F_1(\phi(t)) + F_1(\phi(0)) - \lambda F_2(\phi(t)) + \lambda F_2(\phi(0)) + \\ &- \int_0^t \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{J}_{ij} A_{jk}^0 \phi_k(s) + \phi_k(s) A_{ki}^{0T} \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s) + \\ &- \int_0^t \lambda \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{P}''_i(\phi)(s) A_{i-N,k}^0 \phi_k(s) + \lambda \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'_i(\phi)(s) A_{ik}^0 \phi_k(s). \end{aligned}$$

Para $\frac{1}{2} \int_0^t u^2 ds$ temos a seguinte expressão

$$\frac{1}{2} \int_0^t u^2 ds = \frac{1}{2} \int_0^t \lambda^2 \gamma_i^{-1} (\mathcal{P}'(\phi)_i)^2(s) A_{i-N,k}^0 \phi_k(s) + \lambda \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'(\phi)_i(s) \mathcal{J}_{ij} \phi_j$$

Portanto temos a seguinte expressão para $Z(t)$

$$\begin{aligned} Z(t) &\equiv \exp \left(\int_0^t u \cdot dB - \frac{1}{2} \int_0^t u^2 ds \right) \\ &= \exp \{ -F_1(\phi(t)) + F_1(\phi(0)) - \lambda F_2(\phi(t)) + \lambda F_2(\phi(0)) \} \\ &\times \exp \left\{ - \int_0^t W_J(\phi(s)) ds - \int_0^t \lambda W_\lambda(\phi(s)) ds - \int_0^t \lambda W_{\lambda J}(\phi(s)) ds \right\}, \end{aligned}$$

com

$$F_1(\phi(t)) = \gamma_i^{-1} \phi_i(t) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(t), \quad F_2(\phi(t)) = \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'(\phi)_i(t) \phi_i(t), \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} W_J(\phi(s)) &= \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{J}_{ij} A_{jk}^0 \phi_k(s) + \phi_k(s) A_{ki}^{0T} \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s) + \\ &+ \frac{1}{2} \phi_{j'}(s) \mathcal{J}_{j'i}^T \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s), \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \lambda W_\lambda(\phi(s)) &= \lambda \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{P}''(\phi)(s) A_{i-N,k}^0 \phi_k(s) + \lambda \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'(\phi)(s) A_{ik}^0 \phi_k(s) + \\ &+ \frac{1}{2} \lambda^2 \gamma_i^{-1} (\mathcal{P}'(\phi))^2(s) A_{i-N,k}^0 \phi_k(s), \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\lambda W_{\lambda J}(\phi(s)) = \lambda \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'(\phi)(s) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s). \quad (4.14)$$

4.3 Fluxo de Calor

Novamente estamos interessados no fluxo de calor. Observando a equação (2.54), vemos que o fluxo de energia só depende do gradiente de $U^{(2)}$, ou seja, da interação entre os sítios. Portanto a formula para fluxo continua a mesma da usada anteriormente. Logo temos de calcular a função de correlação de dois-pontos,

$$\langle \phi_u(t) \phi_v(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \phi_u(t) \phi_v(t) Z(t) d\mu_C / norm. \quad (4.15)$$

Expandiremos em primeira ordem em \mathcal{J} e λ de forma que termos $\mathcal{O}(\lambda \mathcal{J})$ serão desprezados assim como termos $\mathcal{O}(\lambda^2)$ e $\mathcal{O}(\mathcal{J}^2)$.

Vemos que em primeira ordem os termos de ordem \mathcal{J} são os mesmos calculados para o caso linear. Então é suficiente calcular a contribuição dos termos de ordem λ que é dada por

$$\langle \phi_u \phi_v; W_\lambda \rangle = \langle \phi_u \phi_v; \lambda \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{P}''(\phi) A_{i-N,k}^0 \phi_k(s) + \lambda \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'(\phi)_i A_{ik}^0 \phi_k(s) \rangle. \quad (4.16)$$

Por questões de praticidade vamos realizar a conta para um polinômio da forma $\mathcal{P}(\phi) = \frac{a_4}{4} : \phi^4 :$, onde $: :$ representa o ordenamento de Wick [61] com respeito à medida Gaussiana μ_C . Temos de calcular a seguinte função truncada

$$\begin{aligned} \langle \phi_u(t) \phi_v(t); W_\lambda \rangle &= \overbrace{\langle \phi_u(t) \phi_v(t); \lambda \gamma_i^{-1} \phi_i(s) 3a_4 : \phi_{i-N}^2(s) : A_{i-N,k}^0 \phi_k(s) \rangle}^A \\ &+ \underbrace{\langle \phi_u(t) \phi_v(t); \lambda \gamma_i^{-1} a_4 : \phi_{i-N}^3(s) : A_{ik}^0 \phi_k(s) \rangle}_B. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Para calcular esta função truncada usaremos novamente o teorema de Wick, mas agora temos de lembrar que as contrações dentro do próprio polinômio são zero, pois estamos considerando o ordenamento de Wick. Usando as expressões para A^0 temos que calcular o termo A dado por

$$\begin{aligned}
 A &= -3a_4\lambda \int ds \langle \phi_u(t)\phi_v(t); \gamma_i^{-1}\phi_i(s) : \phi_{i-N}^2(s) : \phi_i(s) \rangle \\
 &= -3a_4\lambda \int ds \left(4\gamma_i^{-1} \langle \phi_u(t)\phi_i(s) \rangle \langle \phi_v(t)\phi_{i-N}(s) \rangle \langle \phi_{i-N}(s)\phi_i(s) \rangle + \right. \\
 &\quad + 2\gamma_i^{-1} \langle \phi_u(t)\phi_i(s) \rangle \langle \phi_v(t)\phi_i(s) \rangle \langle \phi_{i-N}(s)\phi_{i-N}(s) \rangle + \\
 &\quad + 4\gamma_i^{-1} \langle \phi_u(t)\phi_{i-N}(s) \rangle \langle \phi_v(t)\phi_i(s) \rangle \langle \phi_{i-N}(s)\phi_i(s) \rangle + \\
 &\quad \left. + 2\gamma_i^{-1} \langle \phi_u(t)\phi_{i-N}(s) \rangle \langle \phi_v(t)\phi_{i-N}(s) \rangle \langle \phi_i(s)\phi_i(s) \rangle \right), \quad (4.18)
 \end{aligned}$$

onde $\langle \phi_{i-N}(s)\phi_{i-N}(s) \rangle = 0$, pois estamos considerando o ordenamento de Wick. O termo B é dado por

$$B = \int ds \langle \phi_u(t)\phi_v(t); a_4\lambda\gamma_i^{-1} : \phi_{i-N}^3(s) : (M\phi_{i-N}(s) + \zeta\phi_i(s)) \rangle. \quad (4.19)$$

Além dos termos W_λ temos que calcular a contribuição do termo de fronteira que é dado por

$$\langle \phi_u(t)\phi_v(t); F_2(t) \rangle = \langle \phi_u(t)\phi_v(t); \lambda\gamma_i^{-1} : \phi_{i-N}^3(t) : \phi_i(t) \rangle. \quad (4.20)$$

O termo de fronteira $F_2(0)$ não contribui devido ao decaimento exponencial da covariância. Este termo vai a zero no limite $t \rightarrow \infty$.

As integrais que devem ser calculadas são integrais simples, portanto não vamos colocar estas contas. Ao somar as contribuições de cada termo obtemos zero. Logo em primeira ordem de J e λ o fluxo de calor no problema anarmônico é igual ao do caso harmônico. Essas contas também foram realizadas para um polinômio $\frac{a_4}{4}\phi^4$ sem ordenamento de Wick e o resultado foi o mesmo.

Para o problema anarmônico não é possível justificar a teoria perturbativa com o mesmo argumento simples que usamos no capítulo 3 para o caso harmônico. Pois devido ao potencial ϕ^4 o número de grafos é muito grande. Grosseiramente

falando teríamos

$$\left| \int \frac{\phi^{4n}}{n!} \right| = \left| \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^{(4n-1)!!} (\underbrace{\mathcal{C}\mathcal{C}\dots\mathcal{C}}_n) \right| \leq \frac{4n!!}{n!} |\mathcal{C}\dots\mathcal{C}| = \frac{2^n(2n)!}{n!} |\mathcal{C}\dots\mathcal{C}|, \quad (4.21)$$

que para n grande nos dá

$$\left| \int \frac{\phi^{4n}}{n!} \right| \leq a^n n^n |\mathcal{C}\dots\mathcal{C}| \quad (4.22)$$

portanto uma cota do tipo $c^n j^n$ para o produto das covariâncias não é suficiente para garantir a convergência.

Mas esperamos desenvolver uma análise perturbativa usando algum tipo de expansão em “cluster”. Para o caso do modelo não linear com dinâmica estocástica não conservativa (descrevendo um sistema em contato com banhos térmicos à mesma temperatura, portanto indo para o equilíbrio), um expansão em “cluster” convergente é apresentada em [59], e o decaimento da função de quatro pontos é estudado em [62] e [63]: o estudo rigoroso [63] adiciona apenas pequenas correções ao cálculo perturbativo de primeira ordem [62].

Capítulo 5

O Modelo do Rotor

Existe na literatura um debate sobre o papel da invariância translacional para a validade da lei de Fourier. Em [32] os autores afirmam que qualquer sistema unidimensional onde o momento é conservado (i.e., o potencial $U^{(1)} = 0$) possui condutividade térmica anômala. Como vimos, o modelo do rotor surge como um exemplo de sistema com invariância translacional que obedece à lei de Fourier [13, 21, 22, 23]. As razões para este comportamento ainda não são claras e o papel da conservação de momento ainda tem de ser esclarecido.

Outro debate recente na literatura [64, 65] é a respeito de uma possível “transição de fase” no modelo do rotor, onde abaixo de uma certa temperatura crítica T_c este modelo teria comportamento anômalo e acima de T_c ele passaria à obedecer a lei de Fourier. Podemos ver na figura (5.1) os resultados obtidos por [22] que mostram o comportamento da condutividade térmica com o tamanho do sistema para dois valores de temperatura. Já na figura (5.2) mostramos a dependência da condutividade térmica em relação à temperatura.

Nesse capítulo vamos tratar um modelo bastante similar ao modelo do rotor na esperança de obtermos algum esclarecimento sobre o assunto. Nossos resultados foram publicados em [66].

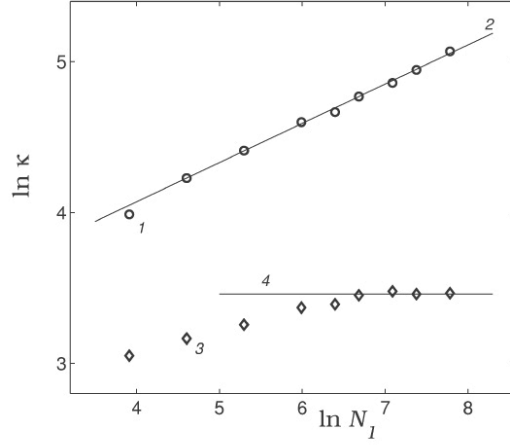


Figura 5.1: Dependência do $\ln \kappa$ com $\ln N_l$. Os círculos representam os dados para a temperatura $T = 0.2$. A reta 2 tem inclinação $\delta = 0.26$. A linha 4 tem inclinação zero ($\kappa = 318$)

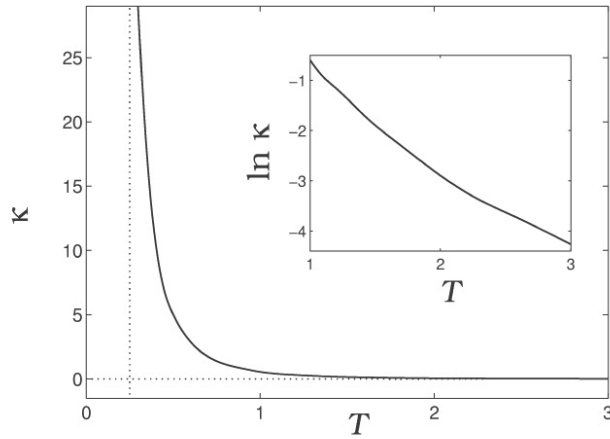


Figura 5.2: Dependência da condutividade térmica κ com a temperatura T . O detalhe apresenta a mesma dependência na escala logarítmica

5.1 Descrição do Modelo

Vamos considerar o modelo dado pelo seguinte Hamiltoniano

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} [p_j^2 + Mq_j^2] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq l=1}^N \lambda [1 - \cos(q_l - q_j)], \quad (5.1)$$

que exceto pelo termo de massa é igual ao modelo do rotor (lembrando que M não é a massa real da partícula). O termo de massa é necessário para a nossa abordagem. As equações da dinâmica são dadas por

$$\begin{aligned} dq_j &= p_j dt, \\ dp_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} dt - \zeta_j p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Observe que agora o termo de acoplamento ζ_j está variando de sítio para sítio. Reescrevendo estas equações na forma matricial temos

$$\dot{\phi} = -A\phi - U^{(2)'} + \sigma\eta, \quad (5.3)$$

onde A e σ são matrizes $2N \times 2N$ dadas por

$$A^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \mathcal{M} & \Gamma \end{pmatrix}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\Gamma\mathcal{T}} \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

Como feito para os casos harmônico e anarmônico usaremos a estratégia de resolver o sistema considerando $U^{(2)} = 0$, e cada sítio esta acoplado ao seu banho térmico. Ou seja, o sistema é descrito por

$$\dot{\phi} = -A^0\phi + \sigma\eta. \quad (5.5)$$

Como vimos no capítulo (2) a solução desta equação é dada pela equação (2.8). E sua covariância é dada por (2.12).

Para recuperar a dinâmica completa com a interação $U^{(2)}$ entre os sítios usaremos novamente o teorema de Girsanov. A correção introduzida pelo termo $U^{(2)}$ é dada por

$$Z(t) = \exp\left(\int_0^t u_i dB_i - \frac{1}{2} \int_0^t u_i^2 ds\right), \quad (5.6)$$

$$\gamma^{1/2} u_i = -\nabla_{i-N} U^{(2)}, \quad (5.7)$$

onde ∇_k significa a derivada com relação a ϕ_k . O próximo passo é encontrar uma expressão para $Z(t)$ para isso observamos que

$$\begin{aligned} u_i &= -\gamma_i^{-1/2} \nabla_{i-N} U^{(2)}, \\ u_i dB_i &= -\gamma_i^{-1} \nabla_{i-N} U^{(2)} \gamma_i^{1/2} dB_i. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Usando a equação (5.5) para a dinâmica do sistema obtemos

$$u_i dB_i = -\gamma_i^{-1} \nabla_{i-N} U^{(2)} (d\phi_i + A_{ik}^0 \phi_k dt). \quad (5.9)$$

Daqui para frente consideraremos apenas interações entre primeiros vizinhos. Desta forma podemos escrever $U^{(2)}$ como

$$U^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_l U^{(2)}(\phi_{l-1} - \phi_l) + U^{(2)}(\phi_l - \phi_{l+1}),$$

portanto

$$\nabla_{i-N} U^{(2)} = \left(U^{(2)'}(\phi_j - \phi_{j+1}) - U^{(2)'}(\phi_{j-1} - \phi_j) \right), \quad (5.10)$$

onde $U^{(2)'}(\phi_j) = dU^{(2)}/d\phi_j$ e $j = i - N$. Como feito anteriormente vamos usar a fórmula de Itô para eliminar o termo $d\phi_i$ da equação (5.9). Para isso vamos definir

$$F = \gamma_i^{-1} (U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'}) \phi_i, \quad (5.11)$$

onde usamos a notação $U_{j,j+1}^{(2)'} = U^{(2)'}(\phi_j - \phi_{j+1})$. Pela formula de Itô obtemos

$$dF = \gamma_i^{-1} (U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'}) d\phi_i + \gamma_i^{-1} \phi_i (U_{j,j+1}^{(2)''} (d\phi_j - d\phi_{j+1}) - U_{j-1,j}^{(2)''} (d\phi_{j-1} - d\phi_j)). \quad (5.12)$$

Substituindo o termo que contém $d\phi_i$ na eq.(5.9) podemos escrever a seguinte expressão para $\int_0^t u_i dB_i$

$$\begin{aligned} \int_0^t u_i dB_i &= -F(t) + F(0) + \int_0^t \left[\gamma_i^{-1} \phi_i (U_{j,j+1}^{(2)''} (d\phi_j - d\phi_{j+1}) - U_{j-1,j}^{(2)''} (d\phi_{j-1} - d\phi_j)) + \right. \\ &\quad \left. - \gamma_i^{-1} \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right] A_{ik}^0 \phi_k(s) \right] ds. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Usando que $d\phi_j = \phi_i dt$ obtemos a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \int_0^t u_i dB_i &= - \gamma_i^{-1} \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right] \phi_i(t) + \gamma_i^{-1} \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right] \phi_i(0) + \\ &\quad + \gamma_i^{-1} \int_0^t \phi_i(s) \left[U_{j,j+1}^{(2)''} (\phi_i - \phi_{i+1}) - U_{j-1,j}^{(2)''} (\phi_{i-1} - \phi_i) \right] (s) ds + \\ &\quad - \gamma_i^{-1} \int_0^t \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right] A_{ik}^0 \phi_k(s) ds. \end{aligned} \quad (5.14)$$

O termo $-\frac{1}{2} \int_0^t u_i^2 dB_i$ é dado por

$$-\frac{1}{2} \int_0^t u_i^2 dB_i = -\frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right]^2 ds. \quad (5.15)$$

Portanto a correção $Z(t)$ é dada por

$$Z(t) = \exp \left[\int_0^t u_i dB_i + \frac{1}{2} \int_0^t u_i^2 ds \right] = \exp(-F(t) + F(0) + W_1 + W_2 + W_3) \quad (5.16)$$

onde

$$F = \gamma^{-1} \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right] \phi_i(t), \quad (5.17)$$

$$W_1 = \gamma^{-1} \int_0^t \phi_i(s) \left[U_{j,j+1}''(\phi_i - \phi_{i+1}) - U_{j-1,j}''(\phi_{i-1} - \phi_i) \right] (s) ds, \quad (5.18)$$

$$W_2 = -\gamma^{-1} \int_0^t \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right] A_{ik}^0 \phi_k(s) ds, \quad (5.19)$$

$$W_3 = -\frac{1}{2} \int_0^t \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right]^2 (s) ds. \quad (5.20)$$

O termo W_3 será desprezado, pois estamos considerando acoplamento fraco entre os sítios e este termo nos dá uma correção de segunda ordem.

Usando a equação (2.54) para o fluxo de calor entre os sítios temos

$$\mathcal{F}_{v,v+1} = \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \frac{(\phi_u + \phi_{u+1})}{2} \right\rangle, \quad \text{onde } u = v + N, \quad (5.21)$$

ou seja, queremos calcular o seguinte valor médio no estado estacionário

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{\int U_{v,v+1}^{(2)'}(\phi_u + \phi_{u+1}) Z(t) d\mu_C}{\int Z(t) d\mu_C}. \quad (5.22)$$

Reescrevendo $Z(t) = e^{-\lambda W}$ e considerando λ pequeno observamos que em primeira ordem em λ o fluxo de calor é dado por

$$\mathcal{F}_{v,v+1} = \langle \Omega \rangle - \langle \Omega; \lambda W \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2), \quad (5.23)$$

onde $\Omega = U_{v,v+1}^{(2)'}(\phi_u + \phi_{u+1})/2$. O termo $\langle \Omega \rangle = 0$, pois o potencial $U^{(2)}$ depende apenas da posição, isto é, de ϕ_v e ϕ_{v+1} . Já o segundo termo de Ω só depende do

momento, isto é, de ϕ_u e ϕ_{u+1} . Porém a medida Gaussiana μ_C dada por (2.12) não conecta termo de momento com posição em tempos iguais, isto é, $\mathcal{C}_{u,v}(t, t) = 0$.

Vamos escrever explicitamente a contribuição de cada termo para o fluxo de calor. A contribuição do termo de fronteira é dada por

$$\begin{aligned}
 \langle \Omega; F \rangle &= \gamma^{-1} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}(\phi_u + \phi_{u+1})(t); \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right] \phi_i(t) \right\rangle \\
 &= \gamma_i^{-1} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_u(t); U_{j,j+1}^{(2)'} \phi_i(t) \right\rangle + \\
 &+ \gamma_i^{-1} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_{u+1}(t); U_{j,j+1}^{(2)'} \phi_i(t) \right\rangle + \\
 &- \gamma_i^{-1} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_{u+1}(t); U_{j-1,j}^{(2)'} \phi_i(t) \right\rangle + \\
 &- \gamma_i^{-1} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_u(t); U_{j-1,j}^{(2)'} \phi_i(t) \right\rangle. \tag{5.24}
 \end{aligned}$$

A contribuição do termo W_1 é dada por

$$\begin{aligned}
 \langle \Omega; W_1 \rangle &= \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}(\phi_u + \phi_{u+1})(t); \phi_i(s) \left[U_{j,j+1}''(\phi_i - \phi_{i+1}) - U_{j-1,j}''(\phi_{i-1} - \phi_i) \right] (s) \right\rangle \\
 &= \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_u(t); \phi_i(s) U_{j,j+1}'' \phi_i(s) \right\rangle + \\
 &+ \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_{u+1}(t); \phi_i(s) U_{j,j+1}'' \phi_i(s) \right\rangle + \\
 &- \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_u(t); \phi_i(s) U_{j,j+1}'' \phi_{i+1}(s) \right\rangle + \\
 &- \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_{u+1}(t); \phi_i(s) U_{j,j+1}'' \phi_{i+1}(s) \right\rangle + \\
 &- \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_u(t); \phi_i(s) U_{j-1,j}'' \phi_{i-1}(s) \right\rangle + \\
 &- \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_{u+1}(t); \phi_i(s) U_{j-1,j}'' \phi_{i-1}(s) \right\rangle + \\
 &+ \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_u(t); \phi_i(s) U_{j-1,j}'' \phi_i(s) \right\rangle + \\
 &+ \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'} \phi_{u+1}(t); \phi_i(s) U_{j-1,j}'' \phi_i(s) \right\rangle \tag{5.25}
 \end{aligned}$$

A contribuição do termo W_2 é dada por

$$\begin{aligned}
 \langle \Omega; W_2 \rangle &= \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t ds \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}(\phi_u + \phi_{u+1})(t); \left[U_{j,j+1}^{(2)'} - U_{j-1,j}^{(2)'} \right] (M\phi_j(s) + \zeta_i\phi_i(s)) \right\rangle \\
 &= \frac{\gamma_i^{-1}M}{2} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}\phi_u(t); U_{j,j+1}^{(2)'}\phi_j(s) \right\rangle + \\
 &+ \frac{\gamma_i^{-1}M}{2} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}\phi_{u+1}(t); U_{j,j+1}^{(2)'}\phi_j(s) \right\rangle + \\
 &- \frac{\gamma_i^{-1}M}{2} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}\phi_u(t); U_{j-1,j}^{(2)'}\phi_j(s) \right\rangle + \\
 &- \frac{\gamma_i^{-1}M}{2} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}\phi_{u+1}(t); U_{j-1,j}^{(2)'}\phi_j(s) \right\rangle + \\
 &+ \frac{\gamma_i^{-1}\zeta_i}{2} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}\phi_u(t); U_{j,j+1}^{(2)'}\phi_i(s) \right\rangle + \\
 &+ \frac{\gamma_i^{-1}\zeta_i}{2} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}\phi_{u+1}(t); U_{j,j+1}^{(2)'}\phi_i(s) \right\rangle + \\
 &- \frac{\gamma_i^{-1}\zeta_i}{2} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}\phi_u(t); U_{j-1,j}^{(2)'}\phi_i(s) \right\rangle + \\
 &- \frac{\gamma_i^{-1}\zeta_i}{2} \left\langle U_{v,v+1}^{(2)'}\phi_{u+1}(t); U_{j-1,j}^{(2)'}\phi_i(s) \right\rangle
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

Até este ponto o formalismo que foi usado serve para qualquer potencial de interação $U^{(2)}$ entre vizinhos próximos. Daqui para frente trataremos o caso específico do modelo do rotor, $U^{(2)}(\cdot) = \lambda(1 - \cos(\cdot))$. Para este potencial temos

$$\begin{aligned}
 U'_{v,v+1} &= \lambda \text{sen}(\phi_{v+1} - \phi_v) = \frac{\lambda}{2i} [e^{i(\phi_{v+1}-\phi_v)} - e^{-i(\phi_{v+1}-\phi_v)}] \\
 U''_{v,v+1} &= \lambda \text{cos}(\phi_{v+1} - \phi_v) = \frac{\lambda}{2} [e^{i(\phi_{v+1}-\phi_v)} + e^{-i(\phi_{v+1}-\phi_v)}]
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

Para o cálculo da contribuição do termo W_1 para o fluxo de calor temos de calcular o seguinte termo chave

$$\frac{\gamma^{-1}}{2} \int_0^t \left\langle U'_{v,v+1}(t)\phi_{\bar{u}}(t); \phi_i(s)U''_{j,j+1}\phi_i(s) \right\rangle. \tag{5.28}$$

Usando as expressões para U' e U'' podemos reescrever este termo chave como

$$\frac{\gamma^{-1}}{4i} \int_0^t \left\langle [e^{i(\phi_{v+1}-\phi_v)} - e^{-i(\phi_{v+1}-\phi_v)}] \phi_{\bar{u}}(t); \phi_i(s) [e^{i(\phi_{j+1}-\phi_j)} + e^{-i(\phi_{j+1}-\phi_j)}] \phi_i(s) \right\rangle, \tag{5.29}$$

que vamos reescrever como

$$\begin{aligned}
 & \frac{\gamma^{-1}}{4i} \int_0^t ds \left(\langle e^{i(\phi_{v+1}-\phi_v)} \phi_{\bar{u}}(t); \phi_i(s) e^{i(\phi_{j+1}-\phi_j)} \phi_{\bar{i}} \rangle + \right. \\
 & \quad + \langle e^{i(\phi_{v+1}-\phi_v)} \phi_{\bar{u}}(t); \phi_i(s) e^{-i(\phi_{j+1}-\phi_j)} \phi_{\bar{i}} \rangle \\
 & \quad - \langle e^{-i(\phi_{v+1}-\phi_v)} \phi_{\bar{u}}(t); \phi_i(s) e^{i(\phi_{j+1}-\phi_j)} \phi_{\bar{i}} \rangle \\
 & \quad \left. - \langle e^{-i(\phi_{v+1}-\phi_v)} \phi_{\bar{u}}(t); \phi_i(s) e^{-i(\phi_{j+1}-\phi_j)} \phi_{\bar{i}} \rangle \right). \quad (5.30)
 \end{aligned}$$

Para cada um dos quatro termos acima (a, b, c, d) usaremos a seguinte notação de índices

$$\begin{aligned}
 a = \begin{cases} h_1 = h_{v+1}(t) = +1 \\ h_2 = h_v(t) = -1 \\ h_3 = h_u(t) \\ h_4 = h_i(s) \\ h_5 = h_{j+1}(s) = +1 \\ h_6 = h_j(s) = -1 \\ h_7 = h_{\bar{i}}(s) \end{cases} & \quad b = \begin{cases} h_1 = h_{v+1}(t) = -1 \\ h_2 = h_v(t) = +1 \\ h_3 = h_u(t) \\ h_4 = h_i(s) \\ h_5 = h_{j+1}(s) = -1 \\ h_6 = h_j(s) = +1 \\ h_7 = h_{\bar{i}}(s) \end{cases} \\
 c = \begin{cases} h_1 = h_{v+1}(t) = -1 \\ h_2 = h_v(t) = +1 \\ h_3 = h_u(t) \\ h_4 = h_i(s) \\ h_5 = h_{j+1}(s) = +1 \\ h_6 = h_j(s) = -1 \\ h_7 = h_{\bar{i}}(s) \end{cases} & \quad d = \begin{cases} h_1 = h_{v+1}(t) = -1 \\ h_2 = h_v(t) = +1 \\ h_3 = h_u(t) \\ h_4 = h_i(s) \\ h_5 = h_{j+1}(s) = -1 \\ h_6 = h_j(s) = +1 \\ h_7 = h_{\bar{i}}(s) \end{cases}
 \end{aligned} \quad (5.31)$$

Portanto o termo chave que queremos calcular é dado pela soma dos termos (a, b, c, d), que com a notação acima podem ser escritos da seguinte forma geral

$$\frac{\gamma^{-1}}{4i} \int_0^t ds \langle e^{i(h_1+h_2)\cdot\phi} (h_3 \cdot \phi); (h_4 \cdot \phi) e^{i(h_5+h_6)\cdot\phi} (h_7 \cdot \phi) \rangle \quad (5.32)$$

onde $h \cdot \phi = h_k \phi_k$. Para cada um dos termos (a, b, c, d) temos de usar o conjunto de índices apropriados dados acima.

É fácil ver que a equação (5.32) pode ser escrita como a seguinte derivada

$$\frac{1}{i^3} \frac{\partial^3}{\partial h_7 \partial h_4 \partial h_3} \left(\int e^{i(h_1+h_2+\dots+h_6+h_7)\cdot\phi} d\mu_c - \int e^{i(h_1+\dots+h_3)\cdot\phi} d\mu_c \int e^{i(h_4+\dots+h_7)\cdot\phi} d\mu_c \right) \Big|_{h_3=h_4=h_7=0}. \quad (5.33)$$

Daqui para frente vamos omitir o fator $\gamma_i^{-1}/4$.

Sabemos que a medida $\mu_{\mathcal{C}}$ é uma medida Gaussiana de média zero e covariância \mathcal{C} dada por (2.12) portanto

$$E[e^{ih\phi}] = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j,k} h_j \mathcal{C}_{jk} h_k \right]$$

onde \mathcal{C}_{jk} é o elemento j, k da matriz covariância. A prova deste fato pode ser encontrada no apêndice B.

Portanto o termo chave que queremos calcular é o seguinte

$$\frac{\partial^3}{\partial h_7 \partial h_4 \partial h_3} \left\{ e^{-\frac{1}{2}(h_1+\dots+h_7)\mathcal{C}(h_1+\dots+h_7)} \right. \\ \left. - e^{\frac{1}{2}(h_1+\dots+h_3)\mathcal{C}(h_1+\dots+h_3)} e^{\frac{1}{2}(h_4+\dots+h_7)\mathcal{C}(h_4+\dots+h_7)} \right\}. \quad (5.34)$$

Efetuando as derivadas da primeira exponencial obtemos

$$\frac{\partial}{\partial h_3} \rightarrow -\frac{1}{2} (\mathcal{C}_{3\dots} h_{124567} + h_{124567} \mathcal{C}_{\dots 3}) e^{\frac{1}{2} h_{124567} \mathcal{C} h_{124567}}, \quad (5.35)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial h_4 \partial h_3} \rightarrow -\mathcal{C}_{34} e^{-\frac{1}{2}(h_{12567} \mathcal{C} h_{12567})} + \mathcal{C}_{3\dots} h_{12567} \mathcal{C}_{4\dots} h_{12567} e^{-\frac{1}{2} h_{12567} \mathcal{C} h_{12567}}. \quad (5.36)$$

Usando as simetrias da matriz de covariância $\mathcal{C}_{3.} = \mathcal{C}_{.3}$ obtemos para a terceira derivada

$$\frac{\partial^3}{\partial h_7 \partial h_4 \partial h_3} \rightarrow \{-\mathcal{C}_{34} \mathcal{C}_{7\dots} h_{1256} + \mathcal{C}_{37} \mathcal{C}_{4\dots} h_{1256} + \mathcal{C}_{3\dots} h_{1256} \mathcal{C}_{47} - \mathcal{C}_{3\dots} \mathcal{C}_{4\dots} h_{1256} \mathcal{C}_{7\dots} h_{1256}\} e^{-\frac{1}{2} h_{1256} \mathcal{C} h_{1256}}. \quad (5.37)$$

Estamos usando a seguinte notação $\mathcal{C}_{k\dots} h_{lmn} = \mathcal{C}_{kl} + \mathcal{C}_{km} + \mathcal{C}_{kn}$. Observamos que para a segunda exponencial da eq. (5.34) temos as seguintes derivadas

$$\frac{\partial}{\partial h_3} \rightarrow -\mathcal{C}_{3\dots} h_{12} e^{\frac{1}{2} h_{12} \mathcal{C} h_{12}} e^{-\frac{1}{2} h_{567} \mathcal{C} h_{567}} \quad (5.38)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial h_4 \partial h_3} \rightarrow \mathcal{C}_{3\dots} h_{12} \mathcal{C}_{4\dots} h_{567} e^{-\frac{1}{2} h_{12} \mathcal{C} h_{12}} e^{-\frac{1}{2} h_{567} \mathcal{C} h_{567}}, \quad (5.39)$$

$$\frac{\partial^3}{\partial h_7 \partial h_4 \partial h_3} \rightarrow [\mathcal{C}_{3\dots} h_{12} \mathcal{C}_{47} - \mathcal{C}_{3\dots} h_{12} \mathcal{C}_{4\dots} h_{56} \mathcal{C}_{7\dots} h_{56}] e^{-\frac{1}{2} h_{12} \mathcal{C} h_{12}} e^{-\frac{1}{2} h_{56} \mathcal{C} h_{56}}. \quad (5.40)$$

Nota-se que este termo é zero ao usarmos as simetrias da matriz covariância. Isto já era esperado pois $\langle \Omega \rangle = 0$, já que $\Omega = U'_{v,v+1}(\phi_u + \phi_{u+1})$, U' depende de ϕ_v e ϕ_{v+1} e a medida Gaussiana $\mathcal{C}(t, t)$ não conecta $i > N$ a $j \leq N$.

Esta é a forma geral do termo chave que devemos calcular. Para cada um do oito termos da equação (5.25) (*I* a *VIII*) devemos fazer a identificação correta dos índices $1, 2, \dots$, multiplicar pelo sinal apropriado e calcular os termos (a, b, c, d) .

Para o termo W_2 temos dois termos chave que são

$$-\frac{\gamma_i^{-1}}{2} M \langle U'_{v,v+1} \phi_{\tilde{u}}(t); U'_{j,j+1} \phi_j(s) \rangle, \quad (5.41)$$

e

$$-\frac{\gamma_i^{-1}}{2} \zeta_i \langle U'_{v,v+1} \phi_{\tilde{u}}(t); U'_{j,j+1} \phi_i(s) \rangle. \quad (5.42)$$

Usando as expressões (5.27) para U' temos

$$= -\frac{1}{4} \left\langle \left[e^{i\phi_{v+1}(t)} e^{-i\phi_v(t)} - e^{-i\phi_{v+1}(t)} e^{+i\phi_v(t)} \phi_u(t); e^{i\phi_{j+1}(s)} e^{-i\phi_j(s)} - e^{-i\phi_{j+1}(s)} e^{+i\phi_j(s)} \phi_j(s) \right] \right\rangle \quad (5.43)$$

onde substituimos os índices i e j por \tilde{j} para valores $\tilde{j} > N$ estamos no segundo caso para valores $\leq N$ estamos no primeiro caso. Novamente vamos separar esta expressão em quatro termos (a, b, c, d) e usaremos as seguinte notação

$$a = \begin{cases} h_1 = h_{v+1}(t) = +1 \\ h_2 = h_v(t) = -1 \\ h_3 = h_u(t) \\ h_4 = h_{j+1}(s) = +1 \\ h_5 = h_j(s) = -1 \\ h_6 = h_j(s) \end{cases} \quad b = \begin{cases} h_1 = h_{v+1}(t) = -1 \\ h_2 = h_v(t) = +1 \\ h_3 = h_u(t) \\ h_4 = h_{j+1}(s) = +1 \\ h_5 = h_j(s) = -1 \\ h_6 = h_j(s) \end{cases}$$

$$c = \begin{cases} h_1 = h_{v+1}(t) = +1 \\ h_2 = h_v(t) = -1 \\ h_3 = h_u(t) \\ h_4 = h_{j+1}(s) = -1 \\ h_5 = h_j(s) = +1 \\ h_6 = h_j(s) \end{cases} \quad d = \begin{cases} h_1 = h_{v+1}(t) = -1 \\ h_2 = h_v(t) = +1 \\ h_3 = h_u(t) \\ h_4 = h_j(s) = -1 \\ h_5 = h_{j+1}(s) = +1 \\ h_6 = h_j(s) \end{cases}$$

Observamos que os termos (a, b, c, d) são dados pela seguinte derivada

$$\frac{1}{i^2} \frac{\partial}{\partial h_6 \partial h_3} \left(\int e^{i(h_1 + \dots + h_6) \cdot \phi} d\mu_c - \int e^{i(h_1 + \dots + h_3) \cdot \phi} d\mu_c \int e^{i(h_4 + \dots + h_6) \cdot \phi} d\mu_c \right) \Big|_{h_3=h_6=0}.$$

Devido às propriedades das medidas Gaussianas temos

$$\int e^{ih_{12\dots 6}\cdot\phi} d\mu_{\mathcal{C}} - \int e^{h_{123}\cdot\phi} d\mu_{\mathcal{C}} \int e^{h_{456}\cdot\phi} d\mu_{\mathcal{C}} = e^{-\frac{1}{2}h_{12\dots 6}\mathcal{C}h_{12\dots 6}} - e^{-\frac{1}{2}h_{123}\mathcal{C}h_{123}} e^{-\frac{1}{2}h_{456}\mathcal{C}h_{456}},$$

ou seja, o termo chave que queremos calcular é o seguinte

$$-\frac{\partial^2}{\partial h_6 \partial h_3} \left(e^{-\frac{1}{2}h_{12\dots 6}\mathcal{C}h_{12\dots 6}} - e^{-\frac{1}{2}h_{123}\mathcal{C}h_{123}} e^{-\frac{1}{2}h_{456}\mathcal{C}h_{456}} \right) \Big|_{h_3=h_6=0}. \quad (5.44)$$

Efetuando as derivadas temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial h_6 \partial h_3} \Big|_{h_3=h_6=0} &\rightarrow (-\mathcal{C}_{36} + \mathcal{C}_{3\dots}h_{1245}\mathcal{C}_{6\dots}h_{1245})e^{-\frac{1}{2}h_{1245}\mathcal{C}h_{1245}} + \\ &\quad -(\mathcal{C}_{3\dots}h_{12})(\mathcal{C}_{6\dots}h_{45})e^{-\frac{1}{2}h_{12}\mathcal{C}_{12}}e^{-\frac{1}{2}h_{45}\mathcal{C}h_{45}} \end{aligned} \quad (5.45)$$

Agora vamos realizar a conta para os regimes de baixa e de alta temperatura.

5.1.1 Regime de baixa temperatura

Nesse regime vamos considerar T pequeno, podemos ver das expressões (2.12) para a covariância que $\mathcal{C} \propto T$, portanto vamos desprezar termos de $\mathcal{O}(\mathcal{C}^3)$. Vamos começar reescrevendo o termo chave para termo o W_1

$$\frac{\partial^3}{\partial h_7 \partial h_4 \partial h_3} \rightarrow \{-\mathcal{C}_{34}\mathcal{C}_{7\dots}h_{1256} + \mathcal{C}_{37}\mathcal{C}_{4\dots}h_{1256} + \mathcal{C}_{3\dots}h_{1256}\mathcal{C}_{47} - \mathcal{C}_{3\dots}\mathcal{C}_{4\dots}h_{1256}\mathcal{C}_{7\dots}h_{1256}\} e^{-\frac{1}{2}h_{1256}\mathcal{C}h_{1256}}.$$

Neste termo devemos desprezar os termo $\mathcal{O}(\mathcal{C}^3)$ e considerar $\exp(\mathcal{C}_{\alpha\beta}) \approx 1$. Portanto temos o seguinte termo chave

$$\frac{1}{4} \frac{\gamma_i^{-1}}{2} \int_0^t \mathcal{C}_{34}\mathcal{C}_{7\dots}h_{1256} + \mathcal{C}_{37}\mathcal{C}_{4\dots}h_{1256} + \mathcal{C}_{47}\mathcal{C}_{3\dots}h_{1256} \quad (5.46)$$

usando a eq. (2.12) para a covariância observamos que $\mathcal{C}_{31} = \mathcal{C}_{32} = 0$. Usando a convenção de sinais (5.31) podemos escrever cada um dos termos (a, b, c, d) levando em consideração o sinal de h

$$\begin{aligned} a) & \mathcal{C}_{34}[\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72} + \mathcal{C}_{75} - \mathcal{C}_{76}] & b) & \mathcal{C}_{34}[\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72} - \mathcal{C}_{75} + \mathcal{C}_{76}] \\ & \mathcal{C}_{37}[\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42} + \mathcal{C}_{45} - \mathcal{C}_{46}] & & \mathcal{C}_{37}[\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42} - \mathcal{C}_{45} + \mathcal{C}_{46}] \\ & \mathcal{C}_{47}[\mathcal{C}_{35} - \mathcal{C}_{36}] & & \mathcal{C}_{47}[-\mathcal{C}_{35} + \mathcal{C}_{36}] \\ c) & \mathcal{C}_{34}[\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72} - \mathcal{C}_{75} + \mathcal{C}_{76}] & d) & \mathcal{C}_{34}[\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72} + \mathcal{C}_{75} - \mathcal{C}_{76}] \\ & \mathcal{C}_{37}[\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42} - \mathcal{C}_{45} + \mathcal{C}_{46}] & & \mathcal{C}_{37}[\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42} + \mathcal{C}_{45} - \mathcal{C}_{46}] \\ & \mathcal{C}_{47}[-\mathcal{C}_{35} + \mathcal{C}_{36}] & & \mathcal{C}_{47}[\mathcal{C}_{35} - \mathcal{C}_{36}] \end{aligned}$$

somando $a + b + c + d$ obtemos

$$\frac{\gamma_i^{-1}}{2} (\mathcal{C}_{34}(\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72}) + \mathcal{C}_{37}(\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42})) \quad (5.47)$$

vemos que isto acontece para cada um dos oito termo ($I \cdots VIII$) da expressão (5.25), exceto por 4 deles que tem um sinal -1 multiplicando, obviamente com a identificação correta dos índices 3, 4, 5, 6, 7. Da equação (5.47) vemos que o termo típico que devemos calcular é o seguinte:

$$\begin{aligned} & \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \mathcal{C}_{ui}(t, s) \mathcal{C}_{v\tilde{i}}(t, s) ds \\ &= \int_0^t e^{-\frac{u}{2}(\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}})} \left[\cosh(u\rho_i) - \frac{\zeta_i}{2\rho_i} \sinh(u\rho_i) \right] \frac{\sinh(u\rho_{\tilde{i}})}{\rho_{\tilde{i}}} T_v T_u \delta_{u,i} \delta_{v+1,\tilde{i}} \end{aligned} \quad (5.48)$$

onde $\tilde{i} = i$ ou $i+1$ ou $i-1$ dependendo de qual dos oito termos esta sendo considerado. Calculando cada termo dessa integral obtemos

$$\begin{aligned} & \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{-\frac{(t-s)}{2}(\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}})} \cosh((t-s)\rho_i) \sinh((t-s)\rho_{\tilde{i}}) / \rho_{\tilde{i}} ds \\ &= \frac{1}{2\rho_{\tilde{i}}} \left(\frac{(\rho_i + \rho_{\tilde{i}})}{\left(\frac{\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}}}{2}\right)^2 - (\rho_i + \rho_{\tilde{i}})^2} - \frac{(\rho_i - \rho_{\tilde{i}})}{\left(\frac{\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}}}{2}\right)^2 - (\rho_i - \rho_{\tilde{i}})^2} \right) \end{aligned} \quad (5.49)$$

$$\begin{aligned} & \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \frac{\zeta_i}{2\rho_i \rho_{\tilde{i}}} e^{-\frac{(t-s)}{2}(\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}})} \sinh((t-s)\rho_i) \sinh((t-s)\rho_{\tilde{i}}) \\ &= \frac{\zeta_i}{8\rho_i \rho_{\tilde{i}}} \left(\frac{(\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}})}{\left(\frac{\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}}}{2}\right)^2 - (\rho_i + \rho_{\tilde{i}})^2} - \frac{(\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}})}{\left(\frac{\zeta_i + \zeta_{\tilde{i}}}{2}\right)^2 - (\rho_i - \rho_{\tilde{i}})^2} \right) \end{aligned} \quad (5.50)$$

portanto temos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \mathcal{C}_{ui}(t, s) \mathcal{C}_{v\tilde{i}}(t, s) ds = \frac{\rho_{\tilde{i}}}{M} (\zeta_i^2 - 4\rho_{\tilde{i}}^2 - \zeta_{\tilde{i}}^2 - 4\rho_i^2). \quad (5.51)$$

Usando o fato que $\zeta_i^2 - 4\rho_i^2 = 4M$, obtemos que essa integral é zero logo a contribuição do termo W_1 para o fluxo de calor é zero.

Vamos passar para a contribuição do termo W_2 , neste caso temos de considerar o seguinte termo chave

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial h_6 \partial h_3} \right|_{h_3=h_6=0} \rightarrow (-\mathcal{C}_{36} + \mathcal{C}_{3\dots} h_{1245} \mathcal{C}_{6\dots} h_{1245}) e^{-\frac{1}{2} h_{1245} \mathcal{C} h_{1245}}. \quad (5.52)$$

Observe que na expressão acima temos um termo de ordem \mathcal{C} . Neste caso devemos considerar $\exp[\mathcal{C}_{\alpha\beta}] \approx 1 + \mathcal{C}_{\alpha\beta}$, o que nos leva à seguinte expressão

$$[\mathcal{C}_{34} + \mathcal{C}_{35}][\mathcal{C}_{61} + \mathcal{C}_{62} + \mathcal{C}_{64} + \mathcal{C}_{65}] - \mathcal{C}_{36} \left[1 - \frac{1}{2}\mathcal{C}_{\alpha\beta} \right]. \quad (5.53)$$

Vamos escrever explicitamente cada um dos termos (a, b, c, d) usando os índices $1 \dots 6$ dados pelo termo I da eq. (5.26):

Termo I-a

$$\begin{aligned} & -\frac{\gamma_{\bar{j}}^{-1}}{8} M \left[\frac{1}{2} \mathcal{C}_{u\bar{j}} (\mathcal{C}_{v+1,v+1}(t, t) + \mathcal{C}_{v,v}(t, t) + \mathcal{C}_{j+1,j+1}(s, s) + \mathcal{C}_{jj}(s, s) + \right. \\ & \quad \left. 2\mathcal{C}_{v+1,j+1}(t, s) - 2\mathcal{C}_{v+1,\bar{j}}(t, s) - 2\mathcal{C}_{v,j+1}(t, s) + 2\mathcal{C}_{v,j}(t, s)) + \right. \\ & \left. + (\mathcal{C}_{u,j+1}(t, s) - \mathcal{C}_{u,j}(t, s)) (\mathcal{C}_{\bar{j},v+1}(s, t) - \mathcal{C}_{\bar{j}}(s, t) + \mathcal{C}_{\bar{j},j+1}(s, s) - \mathcal{C}_{\bar{j},j}(s, s)) \right] \quad (5.54) \end{aligned}$$

Termo I-b

$$\begin{aligned} & -\frac{\gamma_{\bar{j}}^{-1}}{8} M \left[-\frac{1}{2} \mathcal{C}_{u\bar{j}} (\mathcal{C}_{v+1,v+1}(t, t) + \mathcal{C}_{v,v}(t, t) + \mathcal{C}_{j+1,j+1}(s, s) + \mathcal{C}_{jj}(s, s) + \right. \\ & \quad \left. - 2\mathcal{C}_{v+1,j+1}(t, s) + 2\mathcal{C}_{v+1,\bar{j}}(t, s) + 2\mathcal{C}_{v,j+1}(t, s) - 2\mathcal{C}_{v,j}(t, s)) + \right. \\ & \left. - (\mathcal{C}_{u,j+1}(t, s) - \mathcal{C}_{u,j}(t, s)) (-\mathcal{C}_{\bar{j},v+1}(s, t) + \mathcal{C}_{\bar{j}}(s, t) + \mathcal{C}_{\bar{j},j+1}(s, s) - \mathcal{C}_{\bar{j},j}(s, s)) \right] \quad (5.55) \end{aligned}$$

Termo I-c

$$\begin{aligned} & -\frac{\gamma_{\bar{j}}^{-1}}{8} M \left[-\frac{1}{2} \mathcal{C}_{u\bar{j}} (\mathcal{C}_{v+1,v+1}(t, t) + \mathcal{C}_{v,v}(t, t) + \mathcal{C}_{j+1,j+1}(s, s) + \mathcal{C}_{jj}(s, s) + \right. \\ & \quad \left. - 2\mathcal{C}_{v+1,j+1}(t, s) + 2\mathcal{C}_{v+1,\bar{j}}(t, s) + 2\mathcal{C}_{v,j+1}(t, s) - 2\mathcal{C}_{v,j}(t, s)) + \right. \\ & \left. - (\mathcal{C}_{u,j+1}(t, s) - \mathcal{C}_{u,j}(t, s)) (\mathcal{C}_{\bar{j},v+1}(s, t) - \mathcal{C}_{\bar{j}}(s, t) - \mathcal{C}_{\bar{j},j+1}(s, s) + \mathcal{C}_{\bar{j},j}(s, s)) \right] \quad (5.56) \end{aligned}$$

Termo I-d

$$\begin{aligned} & -\frac{\gamma_{\bar{j}}^{-1}}{8} M \left[\frac{1}{2} \mathcal{C}_{u\bar{j}} (\mathcal{C}_{v+1,v+1}(t, t) + \mathcal{C}_{v,v}(t, t) + \mathcal{C}_{j+1,j+1}(s, s) + \mathcal{C}_{jj}(s, s) + \right. \\ & \quad \left. + 2\mathcal{C}_{v+1,j+1}(t, s) - 2\mathcal{C}_{v+1,\bar{j}}(t, s) - 2\mathcal{C}_{v,j+1}(t, s) + 2\mathcal{C}_{v,j}(t, s)) + \right. \\ & \left. (-\mathcal{C}_{u,j+1}(t, s) + \mathcal{C}_{u,j}(t, s)) (-\mathcal{C}_{\bar{j},v+1}(s, t) + \mathcal{C}_{\bar{j}}(s, t) - \mathcal{C}_{\bar{j},j+1}(s, s) + \mathcal{C}_{\bar{j},j}(s, s)) \right] \quad (5.57) \end{aligned}$$

somando $(a + b + c + d)$ temos

$$\begin{aligned} & \frac{\gamma_{\bar{j}}}{2} M \{ \mathcal{C}_{u\bar{j}}(t, s) (\mathcal{C}_{v+1,j+1}(t, s) - \mathcal{C}_{v+1,j}(t, s) - \mathcal{C}_{v,j+1}(t, s) + \mathcal{C}_{v,j}(t, s)) \\ & \quad + (\mathcal{C}_{u,j+1}(t, s) - \mathcal{C}_{u,j}(t, s)) (\mathcal{C}_{v+1\bar{j}} - \mathcal{C}_{v\bar{j}}(t, s)) \} \quad (5.58) \end{aligned}$$

portanto temos de calcular os seguintes termos chave

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \mathcal{C}_{u,\tilde{j}}(t,s) \mathcal{C}_{v,j}(t,s), \quad (5.59)$$

e

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \mathcal{C}_{u,j}(t,s) \mathcal{C}_{v,\tilde{j}}(t,s), \quad (5.60)$$

para os seguintes casos $\tilde{j} > N$ e $\tilde{j} \leq N$

Vamos começar calculando a o termo chave da eq. (5.59) para $\tilde{j} > N$. Nesse caso a integral que queremos calcular é a seguinte

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{-\frac{(t-s)}{2}(\zeta_i + \zeta_j)} \left(\cosh((t-s)\rho) - \frac{\zeta}{2\rho_{\tilde{j}}} \sinh((t-s)\rho) \right) \\ \times \left(\cosh((t-s)\rho) + \frac{\zeta}{2\rho_{\tilde{j}}} \sinh((t-s)\rho) \right) ds \end{aligned}$$

realizando essa conta obtemos

$$\frac{T_u T_v}{M(\zeta_u + \zeta_v)} \delta_{u\tilde{j}} \delta_{v,j}. \quad (5.61)$$

Para o caso de $\tilde{j} \leq N$ temos o seguinte resultado

$$\frac{-T_u T_v \zeta_v}{M^2(\zeta_u + \zeta_v)} \delta_{u,\tilde{j}} \delta_{v,j}. \quad (5.62)$$

Para a equação (5.60) no caso de $\tilde{j} > N$ temos o seguinte resultado

$$\frac{T_u T_v}{M(\zeta_u + \zeta_v)} \delta_{u,j} \delta_{v\tilde{j}}. \quad (5.63)$$

O resultado para caso no qual $\tilde{j} \leq N$ é dado por (5.62).

Usando estes resultado para calcular cada um dos 8 termos da equação (5.26) temos

$$\langle \Omega; W_2 \rangle = \frac{\lambda^2 T_{v+1}}{4M(\zeta_u + \zeta_{v+1})} \left(\frac{\zeta_{v+1}}{\zeta_v} - 1 \right) - \frac{\lambda^2 T_v}{4M(\zeta_{u+1} + \zeta_v)} \left(\frac{\zeta_v}{\zeta_{u+1}} - 1 \right) \quad (5.64)$$

Os termos de fronteira são iguais os termos com ζ do termo W_2 se fizermos $\zeta = 1$ e colocarmos $\mathcal{C}(t,t)$ no lugar de $\mathcal{C}(t,s)$. Teremos o seguinte resultado para

cada um dos termos (*I*, *II*, *III*, *IV*) da eq.(5.24)

$$\begin{aligned}
 I &= -\frac{\lambda^2}{4M\zeta_u}(T_{v+1} + T_v) \\
 II &= \frac{\lambda^2}{4M\zeta_{u+1}}T_{v+1} \\
 III &= -\frac{\lambda^2}{4M\zeta_u}T_v \\
 IV &= \frac{\lambda^2}{4M\zeta_{u+1}}(T_{v+1} + T_v)
 \end{aligned} \tag{5.65}$$

somando obtemos a seguinte contribuição para o termo de fronteira

$$\langle \Omega; F \rangle = \frac{\lambda^2}{4M}T_v \left(-\frac{1}{\zeta_u} + \frac{2}{\zeta_{u+1}} \right) + \frac{\lambda^2}{4M}T_v \left(-\frac{2}{\zeta_u} + \frac{1}{\zeta_{u+1}} \right) \tag{5.66}$$

Somando todas as contribuições temos

$$\mathcal{F}_{v \rightarrow v+1} = \frac{\lambda^2}{2M(\zeta_{v+1} + \zeta_v)} \left[\frac{\zeta_v}{\zeta_{v+1}}T_{v+1} - \frac{\zeta_{v+1}}{\zeta_v}T_v \right] \tag{5.67}$$

Voltaremos nesta expressão quando formos discutir a lei de Fourier.

5.1.2 Regime de Alta Temperatura

Para o regime de alta temperatura iremos usar o método de Laplace [67] para obtermos o comportamento assintótico de integrais da forma $\int_0^t f(s)e^{-g(s)}ds$. Uma pequena descrição do método de laplace pode ser encontrada no apêndice B.

Vamos começar escrevendo explicitamente as contribuições do termo W_1 . Cada um dos oito termos (*I*, \dots , *VIII*) da equação (5.26), se desdobra em quatro termos (*a*, *b*, *c*, *d*) como antes.

Os termo do tipo *a* tem a seguinte forma geral

$$\begin{aligned}
 &\frac{\gamma_i^{-1}}{8} \{ \mathcal{C}_{34}[\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72}] + \mathcal{C}_{37}[\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42}] + \mathcal{C}_{47}[\mathcal{C}_{35} - \mathcal{C}_{36}] + [\mathcal{C}_{35} - \mathcal{C}_{36}][\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42}][\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72}] \} \times \\
 &\times \exp \left(-\frac{1}{2}(\mathcal{C}_{11} + \mathcal{C}_{22} + \mathcal{C}_{55} + \mathcal{C}_{66} + 2\mathcal{C}_{15} - 2\mathcal{C}_{16} - 2\mathcal{C}_{25} + 2\mathcal{C}_{26}) \right),
 \end{aligned} \tag{5.68}$$

bastando fazer a identificação correta do indices 1, 2 \dots dependendo de qual termo está sendo considerado.

Já os termos do tipo b tem a seguinte forma geral

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_i^{-1}}{8} & \{ \mathcal{C}_{34}[\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72}] + \mathcal{C}_{37}[\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42}] + \mathcal{C}_{47}[\mathcal{C}_{36} - \mathcal{C}_{35}] + [\mathcal{C}_{36} - \mathcal{C}_{35}][\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42}][\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72}] \} \times \\ & \times \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathcal{C}_{11} + \mathcal{C}_{22} + \mathcal{C}_{55} + \mathcal{C}_{66} - 2\mathcal{C}_{15} + 2\mathcal{C}_{16} + 2\mathcal{C}_{25} - 2\mathcal{C}_{26})\right). \end{aligned} \quad (5.69)$$

Os termos d e c são iguais aos termos a e b , respectivamente.

Antes de calcularmos cada termo vamos fazer algumas observações sobre o método de Laplace. As integrais a serem calculadas são da forma $\int_0^t f(s)e^{-Tg(s)}$, estamos interessados no comportamento assintótico destas integrais no limite de $T \rightarrow \infty$. É importante observar que $g(s)$ possui em geral vários mínimos, portanto no limite de $T \rightarrow \infty$ a maior contribuição para esta integral vem de regiões na vizinhança destes mínimos. Mas como estamos interessado no estado estacionário do sistema iremos tomar um limite de $t \rightarrow \infty$ portanto os mínimos de $g(s)$ que não são em $s = t$ vão produzir termos que decaem exponencialmente no tempo portanto não contribuem para a integral. Logo apenas os mínimos em $s = t$ vão contribuir para o comportamento assintótico.

Para os termos a e d temos de procurar os mínimos em $s = t$. Estes mínimos ocorrem quando $j = v + 1$ ou $j = v - 1$, nessa situação temos que $g(s)$ tem o comportamento apresentado no gráfico (5.3), observe que em $u = t - s = 0$, $g(u)$ é diferente de zero portanto ao usarmos o método de Laplace vamos obter termos com um decaimento exponencial da forma $e^{-g(0)}$.

Vamos calcular a contribuição de cada um dos 32 termos do termo W_1 , para simplificar vamos nomear cada termo da seguinte forma a_I que quer dizer a contribuição a do termo I da eq. (5.25). Para facilitar o entendimento vamos começar calculando apenas a contribuição dos termos $\mathcal{O}(\mathcal{C}^2)$. A contribuição do primeiro termo do tipo a é dada por

$$\begin{aligned} a_I = \frac{\gamma^{-1}}{8} \int_0^t ds & \{ [\mathcal{C}_{34}(\mathcal{C}_{71} - \mathcal{C}_{72}) + \mathcal{C}_{37}(\mathcal{C}_{41} - \mathcal{C}_{42}) + \mathcal{C}_{47}(\mathcal{C}_{35} - \mathcal{C}_{36})] \\ & e^{-1/2M(T_{v+1}+T_v+T_{j+1}+T_j)+C_{v+1,j+1}-C_{v+1,j}-C_{v,j+1}+C_{v,j}} \}. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Os termos dominantes serão $j = v - 1$ ou $j = v + 1$ pois desta forma o argumento da exponencial terá um mínimo em $s = t$. Vemos que para o termo a_I apenas $j = v - 1$

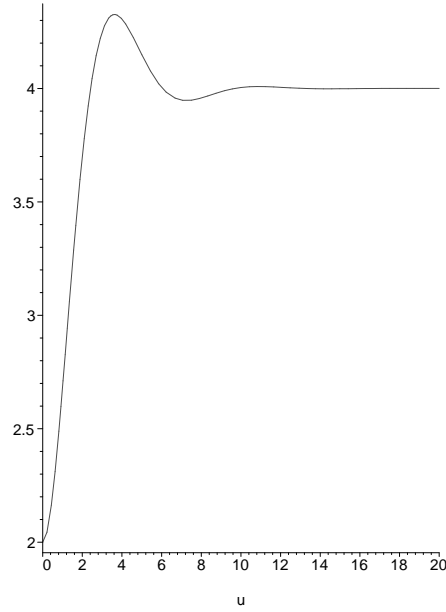


Figura 5.3: Comportamento da função $g(s)$ (argumento da exponencial) para termos do tipo a

contribui assim ficamos com a integral

$$\frac{\gamma_i^{-1}}{8} \int_0^t \mathcal{C}_{i,i}(s, s) \mathcal{C}_{u,j+1}(t, s) e^{1/2M(T_{v+1}+T_v+T_{j+1}+T_j)-\mathcal{C}_{v+1,v+1}}. \quad (5.71)$$

Usando o método de Laplace até o termo de segunda ordem pois a primeira ordem é zero temos

$$-\frac{\lambda^2}{16\zeta_{u-1}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+1}}{M} + \frac{T_{v-1}}{M} \right) \right]. \quad (5.72)$$

Na figura abaixo plotamos o comportamento do argumento dessa integral para dois perfis de temperatura linear $T_2 = 6T_1$. Nessa figura observamos que a medida que T fica grande apenas as regiões próximas do zero contribuem para a integral.

Para o termo a_{II} temos

$$\begin{aligned} & \frac{\gamma_i^{-1}}{8} \int_0^t [\mathcal{C}_{u+1,i}(\mathcal{C}_{i,v+1} - \mathcal{C}_{i,v}) + \mathcal{C}_{u+1,i}(\mathcal{C}_{i,v+1} - \mathcal{C}_{i,v}) + \mathcal{C}_{ii}(\mathcal{C}_{u+1,j+1} - \mathcal{C}_{u+1,j})] \\ & \times e^{(\frac{1}{2}(\frac{T_{v+1}}{M} + \frac{T_v}{M} + \frac{T_{j+1}}{M} + \frac{T_j}{M}) + 2\mathcal{C}_{v+1,j+1}(t,s) - 2\mathcal{C}_{v+1,j}(t,s) - \mathcal{C}_{v,j+1}(t,s) + 2\mathcal{C}_{v,j}(t,s))} ds \quad (5.73) \end{aligned}$$

podemos ver da expressão acima que só nos interessa o caso em $j = v + 1$. Portanto

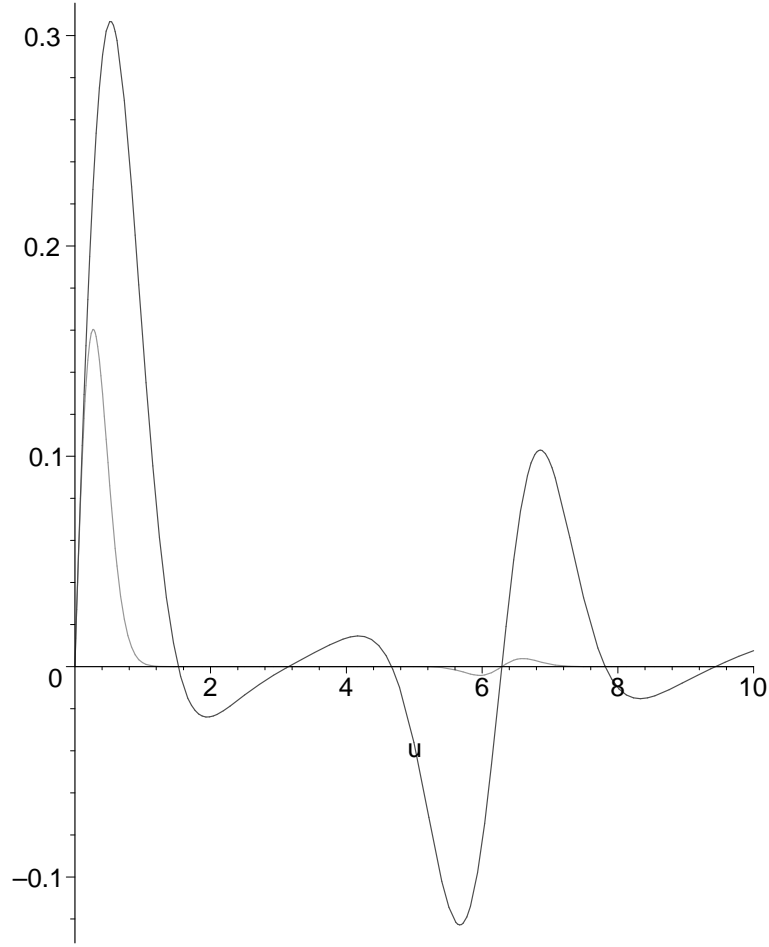


Figura 5.4: Argumento da integral (5.71) para dois perfis de temperatura T_1 e T_2 onde $T_1 = 6T_2$ observe que a medida que T cresce apenas as regiões próximas de 0 contribuem para a integral

ficamos com a seguinte integral

$$a_{II} = \frac{\gamma_i^{-1}}{8} \int_0^t ds \left\{ [2\mathcal{C}_{u+1,i}(t,s)\mathcal{C}_{v+1,i}(t,s) - \mathcal{C}_{i,i}(s,s)\mathcal{C}_{u+1,j}(t,s)] \times \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+2}}{M} + \frac{T_v}{M} + 2T_{v+1} - 2\mathcal{C}_{v+1,v+1}(t,s) \right) \right] \right\} \quad (5.74)$$

usando o método de Laplace para a integral acima obtemos

$$\frac{3\lambda^2}{16\zeta_{u+1}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+2}}{M} + \frac{T_v}{M} \right) \right]. \quad (5.75)$$

Para o termo a_{III} temos

$$\begin{aligned}
 a_{III} = & -\frac{\gamma_i^{-1}}{8} \int_0^t ds \{ [\mathcal{C}_{u,i}(t,s)(\mathcal{C}_{i+1,v+1}(t,s) - \mathcal{C}_{i+1,v}(s,t)) + \\
 & + \mathcal{C}_{u,i+1}(t,s)(\mathcal{C}_{i,v+1}(s,t) - \mathcal{C}_{i,v}(s,t)) \\
 & + \mathcal{C}_{i,i+1}(s,s)(\mathcal{C}_{u,j+1}(t,s) - \mathcal{C}_{u,j}(t,s))] \exp(A) \}, \quad (5.76)
 \end{aligned}$$

onde $\exp(A)$ é a mesma exponencial que aparece na eq. (5.73). Observe que este termo não contribui pois somente para $i = u$ este termo é diferente de zero. Nesse caso A não possui um mínimo em $s = t$ portanto a contribuição desse termo vai a zero no limite de $t \rightarrow \infty$. Os demais índices são zero usando que a matriz covariância é diagonal por blocos.

Os termos $a_{IV} \cdots a_{VI}$ não contribuem pela mesma razão, a contribuição do termo a_{VII} é dada por

$$\begin{aligned}
 a_{VII} = & \frac{\gamma_i^{-1}}{8} \int_0^t ds \{ [2\mathcal{C}_{u+1,i}(t,s)(\mathcal{C}_{v+1,i}(t,s) - \mathcal{C}_{i,v}) + \mathcal{C}_{u+1,i}(\mathcal{C}_{i,v+1} - \mathcal{C}_{i,v}) \\
 & + \mathcal{C}_{i,i}(s,s)(\mathcal{C}_{u+1,j+1}(t,s) - \mathcal{C}_{u+1,j})] \exp(A) \}, \quad (5.77)
 \end{aligned}$$

e ao aplicar o método de Laplace obtemos

$$a_{VII} = -\frac{3\lambda^2}{16\zeta_u} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+1}}{M} + \frac{T_{v-1}}{M} \right) \right]. \quad (5.78)$$

O termo a_{VIII} é dado por

$$\begin{aligned}
 a_{VIII} = & \frac{\gamma_i^{-1}}{8} \int_0^t ds \{ [2\mathcal{C}_{u+1,i}(t,s)(\mathcal{C}_{v+1,i}(t,s) - \mathcal{C}_{i,v}) + \mathcal{C}_{u+1,i}(\mathcal{C}_{i,v+1} - \mathcal{C}_{i,v}) \\
 & + \mathcal{C}_{i,i}(s,s)(\mathcal{C}_{u+1,j+1}(t,s) - \mathcal{C}_{u+1,j})] \exp(A) \}, \quad (5.79)
 \end{aligned}$$

e usando o método de Laplace obtemos

$$a_{VIII} = \frac{\lambda^2}{16\zeta_{u+2}} \exp \left[-\frac{1}{2M}(T_{v+2} + T_v) \right]. \quad (5.80)$$

Somando todos os termos temos obtemos

$$\begin{aligned}
 a_{W_1} = & \frac{\lambda^2}{16} \left[\frac{3}{\zeta_{u+1}} + \frac{1}{\zeta_{u+2}} \right] \exp \left[-\frac{1}{2M}(T_{v+2} + T_v) \right] \\
 = & -\frac{\lambda^2}{16} \left[\frac{3}{\zeta_u} + \frac{1}{\zeta_{u-1}} \right] \exp \left[-\frac{1}{2M}(T_{v+1} + T_{v-1}) \right] \quad (5.81)
 \end{aligned}$$

para a contribuição dos termos do tipo a de W_1 .

Ainda temos de calcular a contribuição dos termos de $\mathcal{O}(C^3)$ que não levamos em consideração nas expressões acima. O cálculo deste termo é bastante similar ao procedimento anterior, portanto não vamos executar as contas passo a passo. Para estes termos temos de calcular os termos 4ª ordem no método de Laplace pois todos os outros termos são zero já que $f(0) = f'(0) = f''(0) = 0$.

Para estes termos obtemos

$$-\frac{2\lambda^2}{16\zeta_{u+1}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+2}}{M} + \frac{T_v}{M} \right) \right] + \frac{2\lambda^2}{16\zeta_u} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+1}}{M} + \frac{T_{v-1}}{M} \right) \right]. \quad (5.82)$$

Vamos passar para a contribuição do tipo a para o termo W_2 . Lembrando que W_2 pode ser escrito da seguinte forma geral

$$-\frac{\gamma_j}{16} \left\{ \begin{array}{c} \pm M \\ \pm \zeta \end{array} \right\} (-C_{36} + C_{3\dots}h_{45}C_{6\dots}h_{1245}) \exp \left[-\frac{1}{2}h_{1245}Ch_{1245} \right] \quad (5.83)$$

novamente vamos aplicar o método de Laplace para cada um dos 8 termos da eq. (5.26), o procedimento é o mesmo do anterior e vamos obter a seguinte expressão

$$\left(\frac{\lambda^2}{16\zeta_{u+2}} - \frac{\lambda^2 M}{\zeta_{u+1}T_{u+1}} \right) \exp \left[-\frac{1}{2M}(T_{u+2} + T_u) \right] - \left(\frac{\lambda^2}{16\zeta_{u-1}} - \frac{\lambda^2 M}{\zeta_u T_u} \right) \exp \left[-\frac{1}{2M}(T_{u+1} + T_{u-1}) \right].$$

Note que na equação acima temos um termo da ordem $1/T$ portanto este termo será desprezado.

Os termos de fronteira são diretos pois neste caso não temos de usar o método de Laplace este termos são dados por

$$\frac{\lambda^2}{16\zeta_{u+1}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+2}}{M} + \frac{T_v}{M} \right) \right] - \frac{\lambda^2}{16\zeta_u} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+1}}{M} + \frac{T_{v-1}}{M} \right) \right]. \quad (5.84)$$

Somando todas estas contribuições obtemos que contribuição total dos termo do tipo a é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_a &= \frac{\lambda^2}{16} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+2}}{M} + \frac{T_v}{M} \right) \right] \left[\frac{2}{\zeta_{u+1}} + \frac{1}{\zeta_{u+2}} \right] + \\ &- \frac{\lambda^2}{16} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+1}}{M} + \frac{T_{v-1}}{M} \right) \right] \left[\frac{2}{\zeta_u} + \frac{1}{\zeta_{u-1}} \right]. \end{aligned} \quad (5.85)$$

Como vimos para os termos do tipo a nunca é possível cancelar o argumento da exponencial. Portanto ao usarmos o método de Laplace sempre obtemos termos

que possuem um decaimento exponencial em T . Como veremos estes termos são sub dominantes em relação aos termos b porém para ζ constante a contribuição dos termos b é zero.

Na figura (5.5) mostramos o argumento da integral para a contribuição do termo W_2 do tipo b observe que $g(0) = 0$, portanto ao usarmos o método de Laplace para os termo do tipo b não teremos o fator $e^{-g(0)}$.

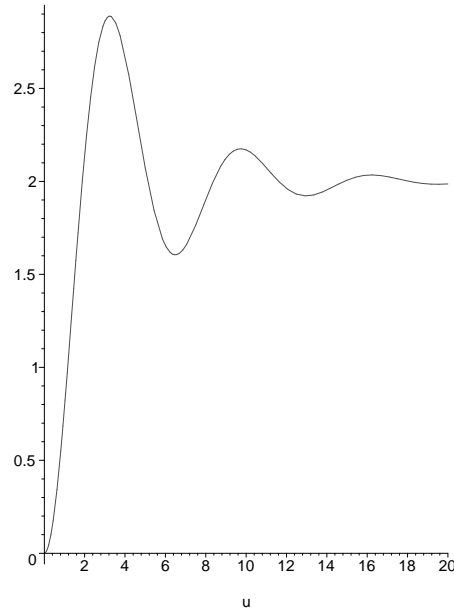


Figura 5.5: Comportamento da função $g(s)$ (argumento da exponencial) para termos do tipo b

Novamente o procedimento é o mesmo do anterior, primeiro localizamos quais termos possuem mínimos em $s = t$, no caso dos termos tipo b sempre vamos ter $g(0) = 0$, i.e., o argumento da exponencial é zero. Para os termos $\mathcal{O}(\mathcal{C}^2)$ do termo W_1 obtemos:

$$\frac{\lambda^2}{16(T_u + T_{u+1})} \left[T_{u+1} \left(\frac{3\zeta_u + \zeta_{u+1}}{\zeta_{u+1}\zeta_u} \right) - T_u \left(\frac{3\zeta_{u+1} + \zeta_u}{\zeta_{u+1}\zeta_u} \right) \right]. \quad (5.86)$$

Para o termos $\mathcal{O}(\mathcal{C}^3)$ obtemos

$$\frac{\lambda^2}{8} \frac{(T_u^2 - T_{u+1}^2)}{(T_u + T_{u+1})^2 \zeta_{u+1}} + \frac{\lambda^2}{8} \frac{(T_u^2 - T_{u+1}^2)}{(T_u + T_{u+1})^2 \zeta_u}. \quad (5.87)$$

Para o termo W_2 obtemos

$$\frac{\lambda^2 M}{16(T_u + T_{u+1})} \left(\frac{1}{\zeta_{u+1}} - \frac{1}{\zeta_u} \right). \quad (5.88)$$

Observe que este resultado é da ordem $\mathcal{O}(1/T)$ portanto ele é subdominante comparado aos outros e será desprezado.

Para o termo de fronteira obtemos

$$\frac{\lambda^2}{16} \left(\frac{1}{\zeta_{u+1}} - \frac{1}{\zeta_u} \right). \quad (5.89)$$

Somando todos os termos obtemos

$$\frac{\lambda^2}{8(T_u + T_{u+1})} \left(\left(\frac{T_{u+1}}{\zeta_{u+1}} - \frac{T_u}{\zeta_u} \right) - \left(\frac{T_{u+1}}{\zeta_u} - \frac{T_{u+1}}{\zeta_u} \right) \right). \quad (5.90)$$

Observe que ao fazermos $\zeta_i = \zeta, \forall i$ esse termo é zero.

Se colocarmos os ζ variando lentamente dentro do sistema e indo a zero para os sítios interiores como mostrado na figura (5.6). Esperamos que o sistema se comporte como um sistema com reservatórios apenas na extremidade.

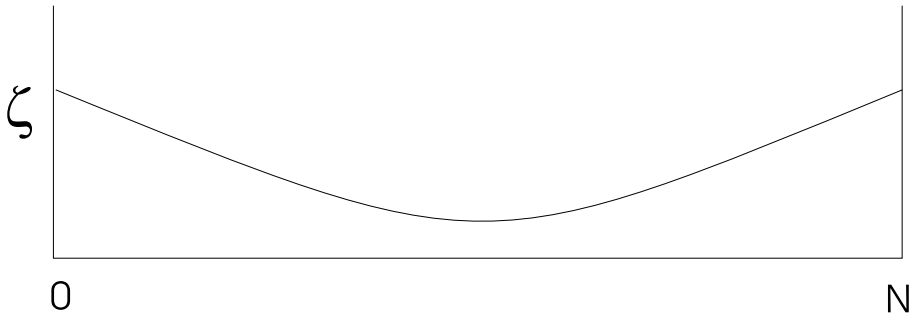


Figura 5.6: Perfil onde ζ_i varia lentamente e vai a zero no interior do sistema

Neste caso temos que o fluxo de energia é dado pela eq. (5.85) multiplicada por dois já que os termos d são iguais as termos a . Portanto para o sistema onde o

ζ varia lentamente indo a zero no interior do sistema o fluxo de energia é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{v \rightarrow v+1} &= \frac{\lambda^2}{8} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+2}}{M} + \frac{T_v}{M} \right) \right] \left[\frac{2}{\zeta_{v+1}} + \frac{1}{\zeta_{v+2}} \right] + \\ &- \frac{\lambda^2}{8} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{T_{v+1}}{M} + \frac{T_{v-1}}{M} \right) \right] \left[\frac{2}{\zeta_v} + \frac{1}{\zeta_{v-1}} \right]. \end{aligned} \quad (5.91)$$

Com pequenas modificações para os termo $v = 1$ e $v = N$.

5.2 A lei de Fourier

Vamos agora analisar o fluxo de energia para os dois regimes. O estado estacionário do sistema é caracterizado por $\langle dH_j/dt \rangle = 0$. Usando esta expressão juntamente com o fato de $\langle \phi_i^2 \rangle = T_{i-N}$, o que nos dá $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle R_j(t) \rangle = 0$, temos $\mathcal{F}_{1 \rightarrow 2} = \mathcal{F}_{2 \rightarrow 3} = \dots \mathcal{F}_{N-1 \rightarrow N}$.

Para o regime de baixa temperatura obtemos a seguinte expressão

$$\mathcal{F}_{v \rightarrow v+1} = \frac{\lambda^2}{2M(\zeta_{v+1} + \zeta_v)} \left[\frac{\zeta_v}{\zeta_{v+1}} T_{v+1} - \frac{\zeta_{v+1}}{\zeta_v} T_v \right]. \quad (5.92)$$

considerando $\zeta_{j+1} - \zeta_j$ pequeno obtemos

$$\mathcal{F}_{v \rightarrow v+1} = \frac{\lambda^2}{2M(\zeta_{v+1} + \zeta_v)} [T_{v+1} - T_v]. \quad (5.93)$$

Portanto

$$\mathcal{F} 2M (\zeta_1 + 2\zeta_2 + \dots + 2\zeta_{N-1} + \zeta_N) \approx \lambda^2 (T_1 - T_N) \quad (5.94)$$

que para o caso de ζ uniforme temos a lei de Fourier $\mathcal{F} = \chi(T_1 - T_N)/(N - 1)$, com $\chi = \lambda^2/4\zeta M$. Ao fazermos o acoplamento com os banhos térmicos cada vez menor, a expressão acima indica que perdemos o fator $N - 1$ portanto a lei de Fourier deixa de ser válida e o fluxo de calor passa ser proporcional a diferença de temperatura e não ao gradiente.

Para o regime de alta temperatura temos, para $\zeta_{i+1} - \zeta_i$ pequenos, e para $T_N - T_1$ pequenos, a seguinte expressão

$$\mathcal{F}(N - 1) \approx \frac{\lambda^2}{4} \left(\frac{e^{T_N/M}}{\zeta_N} - \frac{e^{-T_1/M}}{\zeta_1} \right) \quad (5.95)$$

que não depende dos acoplamentos com os banhos térmicos interiores, portanto, a lei de Fourier permanece válida ao consideramos estes acoplamentos cada vez menores.

Considerando $\zeta_N = \zeta_1 = \zeta$, e $T_N = T_1 + \delta$ (δ pequeno) a expressão acima pode ser escrita como

$$\mathcal{F} \approx \frac{\lambda^2}{4M\zeta} e^{-T/M} \left(\frac{T_1 - T_N}{N - 1} \right) \quad (5.96)$$

onde $e^{-T/M} = - [e^{-(T_1+\delta)/M} - e^{-(T_1)/M}] / ((T_1 + \delta)/M - T_1/M)$, portanto a condutividade térmica decai exponencialmente para altas temperaturas, como previsto por simulações numéricas para o modelo do rotor [22].

Acreditamos que este modelo passa de um regime de condutividade térmica anômala em baixas temperaturas para um modelo que obedece a lei de Fourier para altas temperaturas. O modelo do cristal harmônico auto consistente dá suporte a nossa abordagem, pois neste caso podemos inferir o comportamento do sistema com o acoplamento dos banhos térmicos interiores indo a zero, e recuperar o resultado do cristal harmônico com reservatórios apenas nas extremidades.

Capítulo 6

Conclusão

A abordagem que apresentamos estabelece uma representação integral para as funções de correlação (um formalismo estilo Feynman-Kac). No trabalho [62] foi estudada a relaxação para o equilíbrio de alguns sistemas estocástico de Langevin não conservativos. Nesse problema foi analisado o decaimento da função de dois pontos e de quatro pontos em detalhes. Um estudo perturbativo foi executado com o formalismo integral nos regimes de baixa e alta temperatura. No regime de baixa temperatura e para o termo de massa (coeficiente do termo quadrático) grande o suficiente, foi provado que esta análise perturbativa não é ingênua, i.e., o resultado rigoroso obtido em [63] mostra que o tratamento completo da função de quatro pontos adiciona apenas pequenas correções ao comportamento obtido através da conta perturbativa [62].

Enfatizamos que a abordagem que apresentamos serve para tratar problemas gerais. Esta abordagem foi aplicada para um sistema harmônico com massas variáveis e com o termo do potencial on-site variável em [50]. Esta abordagem também foi aplicada para um sistema com potencial local do tipo cosseno (modelo relacionado ao Frenkel-Kontorova) em [68].

Para o caso do sistema linear apresentamos uma prova rigorosa para a validade da teoria perturbativa. Esperemos que para o caso anarmônico seja possível desenvolver um teoria perturbativa usando algum tipo de expansão em “cluster”.

Estudamos um problema similar ao modelo do rotor, onde concluimos que para

o sistema com reservatórios apenas nas extremidades (no limite do acoplamento com os banhos térmicos interiores indo a zero) no limite de baixa temperatura a lei de Fourier não é válida e no regime de altas temperaturas a lei de Fourier é válida.

Apêndice A

O Método de Laplace

Nesse apêndice faremos uma breve descrição do método de Laplace, que foi usado na seção 5.1.2 para a obter o comportamento assintótico do fluxo de calor no regime de alta temperatura.

Queremos considerar integrais sobre intervalos reais, onde tanto o intervalo de integração quanto o integrando podem depender de um parâmetro T . Queremos estudar o comportamento assintótico da integral quando $T \rightarrow \infty$. Estamos tratando de integrais da seguinte forma

$$C(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(s, T) ds. \quad (\text{A.1})$$

Muitas vezes ocorre que o gráfico de $\phi(s, T)$ como função de s possui um máximo bastante pronunciado, e que para valores grandes de T a contribuição para integral da vizinhança deste máximo é quase igual à integral toda. Uma idéia devido a Laplace é aproximar ϕ na vizinhança do máximo por funções simples para as quais a integral pode ser calculada.

Antes de tratarmos deste problema vamos introduzir a notação que será usada neste apêndice.

Definição I f e g são ditas assintoticamente equivalentes no limite ($x \rightarrow \infty$) se

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{f(x)}{g(x)} = 1$$

Definição II $f(x) = \mathcal{O}(\phi(x))$ em $s \subseteq \mathbf{R}$ se $\exists A > 0$ tal que $|f(x)| \leq A|\phi(x)| \forall x \in S$

Definição III $f(x) = o(\phi(x))$ se $\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{f(x)}{\phi(x)} = 0$

Nas definições acima estamos considerando o comportamento assintótico para $(x \rightarrow \infty)$, mas podemos considerar o comportamento assintótico na vizinhança de outros pontos, como por exemplo na vizinhança de um ponto crítico

Sejam $f, \phi_n : \mathbf{R}^+ \rightarrow \mathbf{R}$. Então, $c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \dots$ é uma série assintótica para $f(x)$, $(f(x) \approx c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \dots (x \rightarrow \infty))$, se a seqüência de funções $\phi_0, \phi_1, \phi_2 \dots$ satisfaz

$$\phi_{k+1}(x) = o(\phi_k(x)) \tag{A.2}$$

e existe uma seqüência de constantes c_0, c_1, c_2, \dots , tal que exista a seguinte seqüência de formulas para a ordem de f :

$$\left\{ \begin{array}{l} f(x) = \mathcal{O}(\phi_0(x)) \\ f(x) = c_0\phi_0(x) + \mathcal{O}(\phi_1(x)) \\ f(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \mathcal{O}(\phi_2(x)) \\ \vdots \\ f(x) = c_0\phi_0 + c_1\phi_1 + \dots c_{n-1}\phi_{n-1} + \mathcal{O}(\phi_n(x)) \\ \vdots \end{array} \right. \tag{A.3}$$

Podemos ver que a segunda formula contém mais informação que a primeira. É possível mostrar que os coeficientes c_0, c_1, \dots são únicos. Também podemos mostrar que toda série convergente é assintótica. i.e $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(x - x_0)^k \Rightarrow f(x) \approx \sum_{k=0}^{\infty} c_k(x - x_0)^k$.

Algumas vezes é possível obter uma série assintótica para uma integral usando integração por partes. Por exemplo seja $f(x) = \int_1^x \frac{e^t}{t} dt$ vamos obter uma série assintótica para $e^{-x} f(x)$ usando integração por partes.

$$\int_1^x \frac{e^t}{t} dt = \frac{e^t}{t} \Big|_1^x + \frac{e^t}{t^2} \Big|_1^x + \dots + (n-2)! \frac{e^t}{t^{n-1}} \Big|_1^x + (n-1)! \int_1^x \frac{e^t}{t^n} dt$$

Multiplicando por e^{-x} e reordenando os termos da seguinte forma obtemos

$$e^{-x} f(x) = \frac{1}{x} + \frac{1}{x^2} + \dots + \frac{(n-2)!}{x^{n-1}} + e^{-x} \int_1^x \frac{(n-1)! e^t}{t^n} dt - e^{-x+1} (1 + 1 + \dots + (n-2)!)$$

é fácil verificar que as equações A.3 são válidas para esta série, portanto obtemos $e^{-x} f(x) \approx \frac{1}{x} + \frac{1}{x^2} + \frac{2!}{x^3} + \frac{3!}{x^4} + \dots$.

Observe que esta série não converge em nenhum ponto, mas é uma série assintótica, ou seja, a análise assintótica forneceu mais informações sobre o comportamento desta função do que as informações obtidas usando uma expansão em séries convergentes.

O seguinte resultado devido a Laplace, é bastante útil em problemas de mecânica estatística.

$$C(T) = \int_{\mathbf{R}} e^{-Tf(s)} ds \sim \sqrt{2\pi} \frac{e^{-Tf(s_0)}}{\sqrt{T f''(s_0)}} \quad (\text{A.4})$$

A função $f(s)$ deve obedecer os seguintes requisitos:

1. Contínua
2. $f(s) \geq f(s_0) \geq 0$
3. $f(s) > f(s_0) \forall s \neq s_0$
4. $\exists b$ e $c > 0$ tal que $f(s) \geq b$ para $|s| \geq c$
5. $\exists f'(s_0), f''(s_0), f'''(s_0) > 0$
6. Existe integral para todo $t \geq t_0$

isto é a função f tem ser semelhante a mostrada na figura (A.1).

Sem perda de generalidade iremos fazer as seguintes mudanças, $g(s) = f(s) - f(s_0)$ onde s_0 é o ponto de mínimo, e $s = s - s_0$ com essas mudanças o ponto de mínimo passa ser a origem. E estamos interessados em estudar a função

$$H(T) = \frac{F(T)}{e^{-Tf(s_0)}} = \int_{\mathbf{R}} e^{-Th(s)} ds. \quad (\text{A.5})$$

Não vamos provar este resultado mas vamos considerar dois casos simples que esclarecem o funcionamento do método. Primeiro vamos escolher $h(s) = \frac{s^2}{2}$ nesse caso

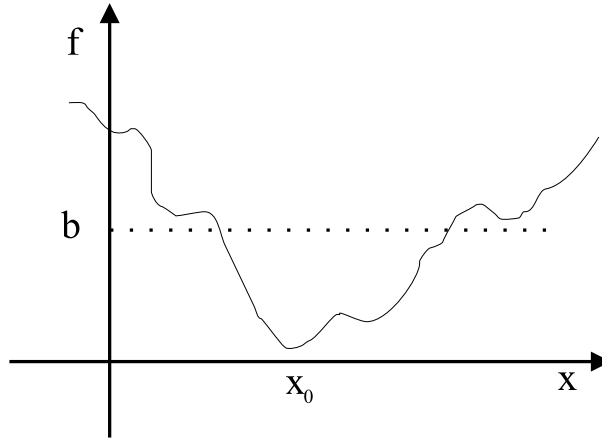


Figura A.1: Esboço da função $f(x)$

fazendo a mudança de coordenadas $y = \sqrt{T}s$ o problema se reduz a uma integral Gaussiana

$$H(T) = \int_{\mathbf{R}} \frac{1}{\sqrt{T}} e^{-\frac{y^2}{2}} dy = \sqrt{\frac{2\pi}{T}}.$$

Agora vamos considerar o caso $h(s) = \frac{s^2}{2} + s^4$, fazendo novamente a mudança de variável $y = \sqrt{T}s$ temos:

$$H(T) = \frac{1}{\sqrt{T}} \int_{\mathbf{R}} e^{-\frac{y^2}{2} - \frac{y^4}{T}} dy$$

Aqui observamos que esta integral é assintoticamente equivalente a

$$H(T) \approx \sqrt{\frac{2\pi}{T}}.$$

a prova do método de Laplace e algumas generalizações podem ser encontrada em [67].

Podemos generalizar o método de Laplace para considerar integrais mais gerais

$$f(T) = \int_{\alpha}^{\beta} g(t) e^{-Th(t)} dt \tag{A.6}$$

queremos o comportamento assintótico quando $T \rightarrow \infty$. A essência do método de Laplace é considerar que a maior contribuição para esta integral vem da vizinhança dos pontos de mínimos de h , se $h(t)$ possui mais de um mínimo então a aproximação

assintótica pode ter contribuição de cada um dos mínimos. Sem perda de generalidade vamos considerar a função possuindo apenas um mínimo pois caso a função possua mais de um mínimo basta dividir a integral em vários pedaços cada um contendo apenas um mínimo. Vamos ter em mente uma função que possui apenas um mínimo. Ainda sem perda de generalidade podemos fazer uma mudança de variável de forma a considerar este mínimo na origem ou seja integrais da forma

$$f(T) = \int_0^\tau g(t)e^{-Th(t)} dt \quad (\text{A.7})$$

Vamos encontrar a aproximação assintótica para $h(0) < h(t)$ para todo $0 < t \leq \tau$ onde $h'(0) = 0$ e $h''(0) > 0$. Como queremos a aproximação assintótica no limite de $T \rightarrow \infty$ vamos ter em mente que a parte dominante da integral vem de alguma região próxima o suficiente da origem digamos $0 \leq t \leq \delta \leq \tau$. Usando o teorema do valor médio nesse intervalo, $0 \leq t \leq \delta$ temos $h(t) - h(0) = \frac{1}{2}t^2h''(\xi)$, onde $h''(\xi) < 0$ e $0 < \xi < \delta$. Isso nos sugere a seguinte mudança de variável

$$h(t) - h(0) = s^2. \quad (\text{A.8})$$

Com isso a exponencial na eq. (A.7) vira

$$e^{-Th(t)} = e^{Th(0)}e^{-Ts^2} \quad (\text{A.9})$$

O próximo passo no procedimento é substituir $g(t)$ na eq. (A.7). Expandindo $g(t)$ em torno de $t = 0$ temos

$$g(t) = g(0) + tg'(0) + \frac{1}{2}t^2g''(0) + \dots \quad (\text{A.10})$$

a expressão acima é válida para algum raio de convergência finito. Como estamos em alguma vizinhança pequena de $t = 0$ podemos expandir o lado esquerdo da equação (A.8)

$$\frac{1}{2}t^2h''(0) + \dots = -s^2 \quad (\text{A.11})$$

assim podemos obter um expressão para t em termos de s

$$t = \left\{ \frac{2}{h''(0)} \right\}^{1/2} s + \mathcal{O}(s^2) \quad (\text{A.12})$$

portanto

$$g(t) = g(0) + g'(0) \left\{ \frac{2}{h''(0)} \right\}^{1/2} s + \mathcal{O}(s^2) \quad (\text{A.13})$$

mudando de variável de t para s em (A.7) juntamente com as equações acima obtemos

$$f(T) \sim e^{xh(0)} \left\{ \frac{2}{h''(0)} \right\}^{1/2} \int_0^\infty e^{-Ts^2} \left\{ g(0) + g'(0) \left\{ \frac{2}{h''(0)} \right\}^{1/2} s + \mathcal{O}(s^2) \right\} ds \quad (\text{A.14})$$

portanto para primeira ordem temos

$$f(T) \sim g(0) \left\{ \frac{\pi}{2Th''(0)} \right\}^{1/2} e^{Th(0)} + e^{Th(0)} \mathcal{O} \left(\frac{1}{T} \right) \quad (\text{A.15})$$

para calcularmos o termo de $\mathcal{O}(s)$ na eq. (A.15) só precisamos da expressão para o termo de $\mathcal{O}(s^2)$ em (A.12).

Existem varias generalizações deste método, um caso que vamos precisar e quando $g(0) = 0$ neste caso precisamos usar a expansão para $g(s)$ até primeira ordem em s , quando $g'(0)$ também é igual a zero temos de usar os termos de ordem superior e assim por diante.

Apêndice B

Integrais Gaussianas

Nesse apêndice estamos interessados em obter expressões para as funções de correlação de N -pontos $\langle \phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_n) \rangle$. Esse resultado é mais conhecido para os físicos como teorema de Wick. Seja uma distribuição de probabilidade Gaussiana para N variáveis

$$P(\phi_1, \cdots, \phi_n) = \exp\left(-\frac{1}{2}\phi^\top A^{-1}\phi\right), \quad \text{onde } \phi^\top A^{-1}\phi = \sum_{i,j} \phi_i A_{i,j}^{-1} \phi_j \quad (\text{B.1})$$

definindo a função geradora $Z(j)$ como

$$Z(j_1, \cdots, j_n) = \int \cdots \int \exp\left(-\frac{1}{2}\phi^\top A^{-1}\phi + j^\top \phi\right) d\phi_1 \cdots d\phi_n \quad (\text{B.2})$$

fazendo a seguinte mudança de variáveis

$$\phi = \phi' + Aj \quad (\text{B.3})$$

obtemos

$$-\frac{1}{2}\phi^\top A^{-1}\phi + j^\top \phi = -\frac{1}{2}\phi'^\top A^{-1}\phi' + \frac{1}{2}j^\top Aj \quad (\text{B.4})$$

portanto a função geradora pode ser escrita como

$$Z(j) = Z(0) \exp\left(\frac{1}{2}j^\top Aj\right) \quad (\text{B.5})$$

se derivarmos a expressão acima com relação a j e calcularmos em $j = 0$, obtemos os momentos da distribuição isto é

$$\langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_{2n}} \rangle = \frac{\partial^{2n}}{\partial j_{i_1} \cdots \partial j_{i_{2n}}} \frac{1}{2^n n!} \exp \left(\frac{1}{2} j^\top A j \right) \Big|_{j=0}. \quad (\text{B.6})$$

É possível mostrar da equação (B.6), que todos os momentos de uma distribuição Guassiana podem ser expressos como uma função apenas dos segundos momentos. A prova é direta, começando pelo segundo momento

$$\langle \phi_{i_1} \phi_{i_2} \rangle = \frac{\partial^2}{\partial j_{i_1} \partial j_{i_2}} \frac{1}{2} \sum_{k,l} j_k A_{kl} j_l = A_{i_1 i_2} = \overbrace{\phi_{i_1} \phi_{i_2}}. \quad (\text{B.7})$$

A quantidade $\overbrace{\phi_{i_1} \phi_{i_2}}$ é chamada de contração de ϕ_{i_1} e ϕ_{i_2} . As derivadas da equação (B.6) produzem $2n!$ termos depois de dividirmos por $2^n n!$ temos o número total de termos dado por $(2n - 1)!!$. Observe que essa quantidade é o número de maneiras de formar pares $\overbrace{\phi_{i_1} \phi_{i_2}} \overbrace{\phi_{i_3} \phi_{i_4}} \cdots \overbrace{\phi_{i_{2n-1}} \phi_{i_{2n}}}$ já que temos $(2n - 1)$ formas de escolher o primeiro par, para formar o segundo par temos $(2n - 3)$ maneiras e assim por diante de onde obtemos que

$$\langle \phi_{i_1} \cdots \phi_{i_{2n}} \rangle = \overbrace{\phi_{i_1} \phi_{i_2}} \overbrace{\phi_{i_3} \phi_{i_4}} \cdots \overbrace{\phi_{i_{2n-1}} \phi_{i_{2n}}} + \text{permutações} \quad (\text{B.8})$$

por exemplo se queremos calcular a função de 4 pontos

$$\langle \phi_{i_1} \phi_{i_2} \phi_{i_3} \phi_{i_4} \rangle = \overbrace{\phi_{i_1} \phi_{i_2}} \overbrace{\phi_{i_3} \phi_{i_4}} + \overbrace{\phi_{i_1} \phi_{i_3}} \overbrace{\phi_{i_2} \phi_{i_4}} + \overbrace{\phi_{i_1} \phi_{i_4}} \overbrace{\phi_{i_2} \phi_{i_3}} \quad (\text{B.9})$$

Apêndice C

Cálculo de $e^{-A^0 t}$

Queremos obter uma expressão para $\exp(-A_0 t)$ onde

$$A_0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ MI & \zeta I \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

e onde I é a matriz identidade $N \times N$. Para isso vamos calcular os autovalores desta matriz. Para $N = 1$ temos

$$\det(At - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & -t \\ Mt & \zeta t - \lambda \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{C.2})$$

de onde obtemos os seguintes autovalores

$$\lambda^\pm = \frac{\zeta t}{2} \pm \rho t \quad \text{onde } \rho = \sqrt{\frac{\zeta}{2} - M} \quad (\text{C.3})$$

para $N = 2$ temos

$$\det(A^1 - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 0 & -t & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & -t \\ Mt & 0 & \zeta t - \lambda & 0 \\ 0 & Mt & 0 & \zeta t - \lambda \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{C.4})$$

Calculando este determinante pelo método dos cofatores temos

$$\det A^1 = -(-1)^2 \lambda \det A_{11}^1 - (-1)^4 t \det A_{13}^1$$

onde A_{ij}^1 é a matriz A^1 acima sem a linha i e coluna j calculando o determinante das matrizes A_{11}^1 e A_{13}^1 temos que

$$\det A^0 = (-\lambda(\zeta t - \lambda) + Mt^2)^2 \quad (\text{C.5})$$

prossequindo por indução vemos que $\det(A_0 - \lambda I) = (-\lambda(\zeta t - \lambda) + Mt^2)^N$, portanto os autovalores são $\lambda^\pm = \frac{\zeta t}{2} \pm \rho$. Para calcularmos a exponencial desta matriz usaremos o teorema de Cayley-Hamilton que nos diz que uma matriz A satisfaz sua propria equação característica. Seja $d(\lambda) = \det(A_0 - \lambda I)$ e sua equação característica dada por $d(\lambda) = 0$. Seja $f(A)$ um polinômio de grau n arbitrário, $f(\lambda)$ é o polinômio em λ então $f(\lambda) = d(\lambda)q(\lambda) + r(\lambda)$ o grau de $r(\lambda)$ é menor que o grau de $d(\lambda)$ usando que $d(A) = 0$ temos que $f(A) = r(A)$. Seja $f(A) = \exp(-At)$ então

$$f(A) = \alpha_{2n-1} A^{2n-1} + \alpha_{2n-2} A^{2n-2} + \dots + \alpha_0 I \quad (\text{C.6})$$

$$f(\lambda) = \alpha_{2n-1} \lambda^{2n-1} + \alpha_{2n-2} \lambda^{2n-2} + \dots + \alpha_0 I. \quad (\text{C.7})$$

Para $N = 1$ temos dois autovalores λ^\pm e sabemos que

$$e^{-At} = r(-At) = -\alpha_1 At + \alpha_0 I \quad (\text{C.8})$$

Também sabemos que

$$e^{-\lambda^+} = -\alpha_1 \lambda^+ + \alpha_0 \quad (\text{C.9})$$

$$e^{-\lambda^-} = -\alpha_1 \lambda^- + \alpha_0. \quad (\text{C.10})$$

Resolvendo este sistema de equações obtemos que

$$e^{-At} = e^{-\frac{\zeta t}{2}} \cosh(\rho t) \left(I + \frac{\tanh(\rho t)}{\rho} \begin{pmatrix} \zeta/2 & 1 \\ -M & -\zeta/2 \end{pmatrix} \right). \quad (\text{C.11})$$

Agora se observarmos que $A_0 = A_0 \otimes I$ onde I é a identidade $N \times N$ obtemos a seguinte expressão para $e^{-A_0 t} = e^{-At} \otimes I$ de onde segue a expressão

$$e^{-A_0 t} = e^{-\frac{\zeta t}{2}} \cosh(\rho t) \left(\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} + \frac{\tanh(\rho t)}{\rho} \begin{pmatrix} \zeta/2 I & I \\ -M I & -\zeta/2 I \end{pmatrix} \right) \quad (\text{C.12})$$

onde I é a identidade $N \times N$

Apêndice D

Equações Diferenciais Estocásticas

Nesse apêndice iremos fazer um compêndio de resultados úteis e definições importantes sobre equações diferenciais estocásticas. Estas definições serão importantes para um melhor entendimento deste trabalho.

Em geral ao adicionarmos alguma incerteza nos coeficientes de uma equação diferencial obtemos modelos matemáticos mais realísticos. Por exemplo, vamos considerar um modelo para crescimento populacional descrito por

$$\frac{dN}{dt} = a(t)N(t), \quad N(0) = N_0, \quad (\text{D.1})$$

onde $N(t)$ é o tamanho da população no tempo t e $a(t)$ é a taxa de crescimento no tempo t . Sabemos que em situações reais $a(t)$ não é completamente conhecida: ela esta sujeita a efeitos aleatórios do ambiente. Portanto, uma descrição mais realista é dada por

$$a(t) = f(t) + \text{“ruído”}$$

Neste caso não conhecemos o comportamento do termo de ruído, apenas sua distribuição de probabilidade. O problema é como resolver a equação (D.1) com a presença deste termo. Equações deste tipo aparecem freqüentemente na física. Na maioria dos sistemas o termo de ruído é um fator indesejável que deve ser minimizado, como em sistemas de comunicação e de controle.

Porém, sobre certas circunstâncias, a presença do ruído pode ajudar a melhorar a eficiência de alguns sistemas: esse fenômeno é conhecido como ressonância

estocástica [69]. Outros efeitos inesperados também podem ser induzidos pelo ruído. O fenômeno conhecido como transição de fase induzida por ruído é um exemplo: neste caso o sistema passa de uma fase desordenada para um estado ordenado [70].

D.1 Construção da integral de Itô

Queremos dar uma interpretação matemática para tratarmos equações da forma

$$\frac{dX}{dt} = b(t, X_t) + \sigma(t, X_t)W_t$$

Em várias situações da física ou engenharia é útil assumir que W_t tem as seguintes propriedades

- $t_1 \neq t_2 \Rightarrow W_{t_1}$ e W_{t_2} são independentes
- $\{W_t\}$ é estacionário i.e., a distribuição conjunta de $\{W_{t_1+t} \dots W_{t_k+t}\}$ não depende de t
- $E[W_t] = 0$ para todo t

porém um processo estocástico com estas propriedades não pode possuir trajetórias contínuas. Para evitarmos problemas técnicos provenientes deste fato vamos reescrever a equação (D.1) da seguinte forma

$$X_{k+1} - X_k = b(t_k, X_k)\Delta t_k + \sigma(t_k, X_k)W_k\Delta t_k$$

onde $X_j = X(t_j)$, $W_k = W_{t_k}$, $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$. Vamos usar a seguinte notação $W_k\Delta t_k = \Delta V_k$. As condições *i*, *ii*, *iii* para W_t sugerem que V_t seja de incrementos estacionários com média 0. Porém o único processo contínuo com esta propriedade é o movimento Browniano B_t portanto obtemos a seguinte equação

$$X_k = X_0 + \sum_{j=0}^{k-1} b(t_j, X_j)\Delta t_j + \sum_{j=0}^{k-1} \sigma(t_j, X_j)\Delta B_j \quad (\text{D.2})$$

é possível mostrar a que no limite de $\Delta t_j \rightarrow 0$ o limite do lado direito da equação (D.2) existe em algum sentido. Portanto podemos usar a notação usual para integral

e escrevermos

$$X_t = X_0 + \int_0^t b(s, X_s)ds + \int_0^t \sigma(s, X_s)dB_s.$$

Não vamos provar a existência deste limite nem para qual classe de funções σ esta integral existe: estes passos podem ser encontrado em [46, 71]. Vamos nos limitar a apresentar aqui algumas propriedades da integral de Itô que são

$$(i) \quad \int_s^T f dB_t = \int_s^u f dB_t + \int_u^T f dB_t \quad (D.3)$$

$$(ii) \quad \int_s^T (cf + g)dB_t = c \int_s^T f dB_t + \int_s^T g dB_t \quad (D.4)$$

$$(iii) \quad E \left[\int_s^T f dB_t \right] = 0 \quad (D.5)$$

$$(iv) \quad \int_s^T f dB_t \text{ é } \mathcal{F}_T \text{ mensurável} \quad (D.6)$$

Como acontece no cálculo, quando estamos lidando com integrais de Riemann a definição de integral não é muito útil para o cálculo de integrais: o que usamos é o teorema fundamental do cálculo e a regra da cadeia. Aqui a situação é semelhante e a fórmula que nos permite achar uma “primitiva” é conhecida como fórmula de Itô.

Theorema D.1.1 *Seja X_t um processo de Itô dado por*

$$dX_t = udt + vdB_t,$$

e seja $g(t, x) \in C^2([0, \infty)) \times R$. Então

$$Y_t = g(t, X_t)$$

é novamente um processo de Itô e

$$dY_t = \frac{\partial g}{\partial t}(t, X_t)dt + \frac{\partial g}{\partial x}(t, X_t)dX_t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(t, X_t)(dX_t)^2, \quad (D.7)$$

onde $(dX_t)^2$ é calculado de acordo com as seguintes regras $dt dt = dt dB_t = dB_t dt = 0$, $dB_t dB_t = dt$.

A definição de processo de Itô e outros detalhes podem ser encontrados em [46]. A fórmula de Itô pode ser generalizada para processos de Itô n-dimensional. Neste caso temos o seguinte teorema:

Teorema D.1.1 *Seja*

$$dX = udt + vdB \quad (\text{D.8})$$

uma integral estocástica n -dimensional. Seja $g(t, x) = (g_1(t, x), \dots, g_p(t, x))$ um mapeamento C^2 de $[0, \infty) \times \mathbf{R}^n$ em \mathbf{R}^2 . Então o processo

$$Y(t, \omega) = g(t, X_t) \quad (\text{D.9})$$

é novamente uma integral estocástica, e sua componente número k é dada por

$$dY_k = \frac{\partial g_k}{\partial t}(t, X)dt + \sum_i \frac{\partial g_k}{\partial x_i}(t, X)dX_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 g_k}{\partial x_i \partial x_j}(t, X)dX_i dX_j, \quad (\text{D.10})$$

onde $dB_i dB_j = \delta_{ij} dt$, $dB_i dt = dt dB_i = 0$.

D.2 A Fórmula de Cameron-Girsanov-Martin

O seguinte resultado que nos diz como a medida de uma difusão muda quando adicionamos um termo de “drift” é bastante útil em várias aplicações. É esse o resultado que utilizamos para estudar uma dinâmica mais complicada em termos de um sistema mais simples onde nos conhecemos a solução. Podemos enunciar este teorema da seguinte forma.

Teorema D.2.1 *Seja $X(t) = X^{x_0}(t) \in \mathbf{R}^n$ e $Y(t) = Y^{x_0}(t) \in \mathbf{R}^n$ uma difusão de Itô e um processo de Itô, respectivamente, da seguinte forma*

$$dX(t) = b(X(t))dt + \sigma(X(t))dB(t); \quad t \leq T, \quad X(0) = x_0 \quad (\text{D.11})$$

$$dY(t) = [\gamma(t, \omega) + b(Y(t))] dt + \sigma(Y(t))dB(t); \quad t \leq T, \quad Y(0) = x_0 \quad (\text{D.12})$$

onde $\gamma(t, \omega) \in \mathcal{W}_{\mathcal{H}^n}$, $x_0 \in \mathbf{R}^n$ e as funções $b : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ e $\sigma : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^{n \times m}$ satisfazem as condições abaixo

$$\begin{aligned} |b(x)| + |\sigma(x)| &\leq C(1 + |x|); \quad x \in \mathbf{R}^n; \\ |b(x) - b(y)| + |\sigma(x) - \sigma(y)| &\leq D|x - y| \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

para constantes C e D . Suponha que existe um processo $u(t, \omega) \in \mathcal{W}_{\mathcal{H}^n}$ tal que

$$\sigma(Y(t))u(t, \omega) = \gamma(t, \omega).$$

Definindo M_t, Q e $\widehat{B}(t)$ como

$$M_t = \exp \left(- \int_0^t u(s, \omega) dB_s - \frac{1}{2} \int_0^t u^2(s, \omega) ds \right); \quad t \leq T \quad (\text{D.14})$$

$$dQ(\omega) = M_T(\omega) dP(\omega) \quad \text{em } \mathcal{F}_T^{(m)} \quad (\text{D.15})$$

$$\widehat{B}(t) = \int_0^t u(s, \omega) ds + B(t); \quad t \leq T \quad (\text{D.16})$$

Assuma que M_t é martingale com respeito $\mathcal{F}_t^{(m)}$ e P . Então Q é uma medida de probabilidade em $\mathcal{F}_T^{(m)}$ e

$$dY(t) = b(Y(t))dt + \sigma(Y(t))d\widehat{B}(t). \quad (\text{D.17})$$

E mais,

A lei Q de $Y^{x_0}(t)$ é a mesma da lei P de $X^{x_0}(t)$; $t \leq T$.

Todas as definições necessária para entender este teorema podem ser encontradas em [46].

Apêndice E

Números de Catalan

Os números de Catalan são definidos por

$$c_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n}.$$

Estes números aparecem em vários problemas de contagem [72], e neste apêndice queremos mostrar que

$$c_{n+1} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{\frac{|t-s_1|}{2}} e^{\frac{|s_1-s_2|}{2}} \cdots e^{\frac{|s_n-t|}{2}} ds_1 \cdots ds_n. \quad (\text{E.1})$$

o primeiro passo é mostrar que

$$\int \mathcal{C}(s_1 \cdots s_n) s_1^k ds_1 \cdots ds_n = \int \mathcal{C}(s_2 \cdots s_n) \left(\sum_{j=0}^{k+1} (-1)^{k+j} \frac{(k)!}{j!} s_2^j + \frac{t^{k+1}}{k+1} \right) ds_2 \cdots ds_n + R(t) \quad (\text{E.2})$$

essa fórmula pode ser verificada por indução, o termo $R(t)$ desaparece no limite de $t \rightarrow \infty$, onde estamos usando a notação

$$\mathcal{C}(s_1 \cdots s_n) = e^{|t-s_1|+|s_1-s_2|+\cdots+|s_n-t|}$$

outra integral que temos de calcular é a integral

$$\int_0^t \mathcal{C}(s_n) s_n^k ds_n = \sum_{j=0}^k \frac{k!}{j!} t^j \quad (\text{E.3})$$

como antes é fácil mostrar essa igualdade por indução. Para $n = 1$ a igualdade (E.1) é verificada facilmente bastando fazer a integral

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{-s_1} ds_1 = 1 = c_2$$

supondo que este fato seja verdade para todo $k \leq n$ vamos provar que isso vale para $n + 1$. Seja

$$C_{n+1} = \int C(s_1 \cdots, s_n) ds_1 \cdots ds_n \quad (\text{E.4})$$

usando a formula (E.2) obtemos

$$C_{n+1} = \int c(s_2, \cdots, s_n) \left(\sum_{j=0}^1 \frac{(-1)^j}{j!} k! s_2^j + t \right) \quad (\text{E.5})$$

o termo $C(s_2, \cdots, s_n) = c_n$ pela hipótese de indução para o outro termo substituímos novamente a integral pela equação E.2 obtendo

$$\int \sum_{j=0}^1 \frac{(-1)^j}{j!} \left(\sum_{j_1=0}^{j+1} \left((-1)^{J+J_1} \frac{J!}{J_1!} C(s_3, \cdots, s_n) s_3^{j_1} \right) + \frac{C(s_3, \cdots, s_n)}{J+1} t^{J+1} \right) \quad (\text{E.6})$$

iterando este procedimento e fazendo algumas simplificações obtemos

$$C_{n+1} = \sum_{j=0}^1 \sum_{j_1=0}^{j+1} \cdots \sum_{j_{n-1}=0}^{j_{n-1}+1} 1 + \mathcal{T}(t) \quad (\text{E.7})$$

essa soma é o número de Catalan de ordem $n + 1$ e os termos $\mathcal{T}(t)$ se cancelam usando algumas propriedades das chamadas pirâmides catalan [73].

Apêndice F

Solução do cristal harmônico

Vamos começar definindo

$$\begin{aligned}\tilde{U} &\equiv U_e + \frac{k_b(T_+ - T_-)}{2\omega}U \\ \tilde{V} &\equiv V_e + \frac{k_b(T_+ - T_-)}{2}U \\ \tilde{Z} &\equiv \frac{k_b(T_+ - T_-)}{2\lambda}Z\end{aligned}\tag{F.1}$$

Pela equação (2.21) temos

$$Z = -Z^\dagger,\tag{F.2}$$

$$V = UG + ZR\tag{F.3}$$

$$2S - VR - RV = \nu[GZ - ZG]\tag{F.4}$$

onde $\nu = \omega^2/\lambda^2$. Além destas equações temos que U e V são simétricas . Devido a estrutura das matrizes R e S , o lado esquerdo da equação (F.4), é uma matriz de bordas (i.e. apenas os elementos das colunas e linhas externas são não nulos). Portanto o lado direito desta equação ($GZ - ZG$) também tem de ser uma matriz de bordas. Usando a forma explicita da matriz G juntamente com a com a propriedade de anti-simetria (F.2), podemos ver que Z é necessariamente uma matriz de Toeplitz

quando $GZ - ZG$ é uma matriz de bordas, logo Z pode ser escrito na forma

$$Z = \begin{pmatrix} 0 & \phi_1 & \phi_2 & \phi_{N-2} & \phi_{N-1} \\ -\phi_1 & \ddots & \ddots & \ddots & \phi_{N-2} \\ -\phi_2 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \phi_2 \\ -\phi_{N-2} & & \ddots & \ddots & \phi_1 \\ -\phi_{N-1} & -\phi_{N-2} & & \ddots & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{F.5})$$

As quantidades ϕ_1, \dots, ϕ_N são relacionadas com as entradas da matriz de bordas do lado esquerdo da equação (F.4) e são

$$\nu\phi_j = \delta_{j1} - V_{1j} = \delta_{j1} + V_{N, N-j+1} \quad (\text{F.6})$$

onde $\phi_N \equiv 0$ por definição. A equação (F.3) juntamente com o fato de V ser simétrica implica que

$$GU - UG = -(RZ - ZR). \quad (\text{F.7})$$

Outra vez, o lado direito de (F.7) é uma matriz de bordas, e devido a propriedade de simetria de U (U é constante sobre a diagonal cruzada). É fácil verificar que

$$U_{ij} = \begin{cases} \phi(i-j-1) & \text{para } i+j \leq N \\ \phi(2N+1-i-j) & \text{para } i+j \geq N \end{cases} \quad (\text{F.8})$$

é uma solução da Eq. (F.7). Em princípio esta não é a única solução, já que podemos adicionar qualquer matriz simétrica que comuta com G , porém pode-se verificar a posteriori que a adição de qualquer uma destas matrices irá violar as propriedades de simetria de V .

Substituindo as expressões para U e Z na equação (F.3), obtemos uma expressão para V em termos dos ϕ 's. Essa equação combinada com (F.6) produz a seguinte equação para os ϕ 's

$$\sum_{j=1}^{N-1} K_{ij} \phi_j = \delta_{i1} \quad (\text{F.9})$$

onde $K = G + \nu I$, e temos a seguinte expressão para V

$$V = S - \nu U. \quad (\text{F.10})$$

O problema de encontrar uma solução para o transporte de calor foi reduzido em solucionar a equação (F.9). Para resolver esta equação usamos a regra de Cramer e obtemos

$$\phi_j = \frac{\sinh(N-j)\alpha}{\sinh(N\alpha)} \quad (\text{F.11})$$

onde α é definido por

$$\cosh(\alpha) = 1 + \frac{1}{2}\nu \quad (\text{F.12})$$

No limite de N grande e j fixo temos a seguinte formula assintótica

$$\phi_j = e^{j\alpha} \quad (\text{F.13})$$

onde

$$\phi_1 = e^\alpha = 1 + \frac{1}{2}\nu - \frac{1}{2}(4\nu + \nu^2)^{1/2}$$

que completa a solução de encontrar a distribuição de probabilidade no estado estacionário.

Referências Bibliográficas

- [1] Joel L. Lebowitz. Statistical mechanics: A selective review of two central-issues. *Rev. Mod. Phys.*, 71(2):346–357, 1999.
- [2] D. Ruelle. Gaps and new ideas in our understanding of nonequilibrium. *Physica A*, 263:540–544, 1999.
- [3] D. Ruelle. A departure from equilibrium. *Nature*, 414(6861), 2001.
- [4] G. Gallavotti, E. Cohen. Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics. *Phys. Rev. Lett.*, 74:2694–2697, 1995.
- [5] G. Gallavotti, E. Cohen. Dynamical esembles in stationary states. *J. Stat. Phys.*, 80:931–970, 1995.
- [6] S.R. Groot, P. Mansur. *Non-equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications, 1984.
- [7] J. Hone, M. Whitney, C. Piskot. Thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 59:R2514, 1999.
- [8] P. Kim, L. Shi, A. Majumdar, P.L. McEuen. Thermal transport measurement of individual multiwalled nanotubes. *Phys. Rev. Lett*, 87:215502, 2001.
- [9] N. E. Ashcroft, N. D. Mermin. *Solid State Physis*. Holt, Reinhart and Winston, 1976.
- [10] R. E. Peierls. *Quantum theory of solids*. Oxford: Clarendon, 1955.

- [11] O. Narayan, S. Ramaswamy. Anomalous heat conduction in one-dimensional momentum-conserving systems. *Phys. Rev. Lett.*, 89:20601–1–10601–4, 2002.
- [12] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, L. Rey-Bellet. Fourier’s law: a challenge to theorists. In A. Fokas, A. Grigoryan, T. Kibble, and B. Zegarlinski (eds.). *Mathematical Physics 2000*, pages 128–150, London, 2000. Imperial College Press.
- [13] Stefano Lepri, Roberto Livi, Antonio Politi. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Phys. Rep.*, 377:1–80, 2003.
- [14] M. Mareschal, A. Amellal. Discrete breathers in fermi-pasta-ulam lattices. *Phys. Rev. A*, 37:2189, 1988.
- [15] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam. Studies of the nonlinear problem i. *Los Alamos Report LA-1940*, 1955.
- [16] G. P. Berman, F. M. Izrailev. The fermi-pasta-ulam problem: Fifty years of progress. *Chaos*, 15:015104–1–015104–18, 2005.
- [17] D. K. Campbell, P. Rosenau, G. M. Zaslavsky. Introduction: The fermi-pasta-ulam problem-the first fifty years. *Chaos*, 15:015101–1–015101–4, 2005.
- [18] S. Flach, A. Gorbach. Discrete breathers in fermi-pasta-ulam lattices. *Chaos*, 15:015112–1–015112–10, 2005.
- [19] S. Lepri, R. Livi, A. Politi. *Phys. Rev. Lett.*, 78:1896, 1997.
- [20] S. Lepri, R. Livi, A. Politi. *Physica D*, 119:140, 1998.
- [21] A. V. Savin, O. V. Gendelman. On finite thermal conductivity of a one-dimensional rotator lattice. *Phys. Solid State*, 43(2):355–364, 2001.
- [22] A. V. Savin, O. V. Gendelman. Normal heat conduction of the one-dimensional lattice with periodic potential of nearest-neighbor interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 84(11):2381–2384, 2000.

- [23] C. Giardiná, R. Livi, A. Polit, M. Vassalli. Finite thermal conductivity in 1d lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 84(10):2144–2147, 2000.
- [24] G. Casati, J. Ford, F. Vivaldi, W.M. Visscher. One-dimensional classical many-body system having a normal thermal conductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 52:1861, 1984.
- [25] O. M. Braun, Y. S. Kivshar. Nonlinear dynamics of the frenkel-kontorova model. *Phys. Rep.*, 306:1–108, 1998.
- [26] Bambi Hu, Baowen Li, Hong Zhao. Heat conduction en one-dimensional chains. *Phys. Rev. E*, 57(3):2992–2995, 1998.
- [27] G. P. Tsironis, R. Bishop, A. V. Savin, A. V. Zolotaryuk. Dependence of thermal conductivity on discrete breather in lattices. *Phys. Rev. E*, 60(6), 1999.
- [28] A. V. Savin, O. V. Gendelman. Heat conduction in one-dimensional lattices with on-site potential. *Phys. Rev. E*, 67:041205, 2003.
- [29] Bambi Hu, Baowen Li, Hong Zhao. Heat conduction in one-dimensional nonintegrable system. *Phys. Rev. E*, 61(4):3828–3831, 2000.
- [30] R. Lefevre, A. Schenkel. Perturbative analysis of anharmonic chains of oscillators out of equilibrium. *J. Stat. Phys.*, 115(5-6):1389–1421, 2004.
- [31] H. Li. The temperature-dependent heat conduction in one-dimensional system subjected to on-site potential. *Phys. Lett. A*, 317:406–414, 2003.
- [32] T. Prosen, D. K. Campbell. Momentum conservation implies anomalous energy transport in 1d classical lattices. *Phys. Rev. Lett*, 84(13):2857–2860, 2000.
- [33] G. E. Uhlenbeck, L. S. Ornstein. On the theory of the brownian motion. *Phys. Rev.*, 36:823–841, 1930.
- [34] T. Prosen, M. Robnik. Energy transport and detailed verification of Fourier heat law in a chain of colliding harmonic oscillators. *J. Phys. A*, 25:3449, 1992.

- [35] Baowen Li, Lei Wang, Bambi Hu. Finite thermal conductivity in 1d models having zero Lyapunov exponents. *Phys. Rev. Lett.*, 88(22):2239011, 2002.
- [36] Bambi Hu, Jiao Wang. Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in one-dimensional systems. *Phys. Rev. Lett.*, 91(4):0443011, 2003.
- [37] D. Alonso, R. Artuso, G. Casati, I. Guarneri. Heat conductivity and dynamical instability. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1859, 1999.
- [38] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, E. Lieb. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state. *J. Math. Phys.*, 8(5):1073–1078, 1967.
- [39] P. G. Bergmann, J.L. Lebowitz. New approach to nonequilibrium process. *Phys. Rev.*, 99:578, 1955.
- [40] J.L. Lebowitz. Stationary nonequilibrium Gibbsian ensembles. *Phys. Rev.*, 114:1192, 1959.
- [41] A. Casher, J. L. Lebowitz. Heat flow in regular and disordered harmonic chains. *J. Math. Phys.*, 12(8):1701–1711, 1971.
- [42] R. J. Rubin, W. L. Greer. Abnormal lattice thermal conductivity of a one-dimensional harmonic, isotopically disordered crystal. *J. Math. Phys.*, 12(8):1686–1701, 1971.
- [43] T. Verheggen. Transmission coefficient and heat conduction of a harmonic chain with random masses: Asymptotic estimates on products of random matrices. *Comm. Math. Phys.*, 68:69–82, 1979.
- [44] M. Bolsterli, M. Rich, W. M. Visscher. Simulation of nonharmonic interactions in a crystal by self-consistent reservoirs. *Phys. Rev. A*, 1(4), 1970.
- [45] Federico Bonetto, Joel L. Lebowitz, Jani Lukkarinen. Fourier’s law for a harmonic crystal with self-consistent stochastic reservoirs. *J. Stat. Phys.*, 116(114):783–812, 2004.

- [46] B. Øksendal. *Stochastic Differential Equations: An introduction with Applications*. Springer-Verlag, sixth edition, 2003.
- [47] J. Snyders, M. Zakai. On nonnegative solutions of the equation $AD + DA^T = -C^*$. *J. Appl. Math.*, 18(3):704–714, 1970.
- [48] H. Risken. *The Fokker-Planck equation: methods of solution and applications*. Springer, 1989.
- [49] T. Tomé, M.J. de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e irreversibilidade*. Edusp, 2001.
- [50] F. Barros, H. F. Lemos, E. A. Pereira. Changing the heat conductivity: An analytical study. *Aceito para publicação. Phys. Rev. E*, 2006.
- [51] R. Falcao, A. Francisco Neto, E. Pereira. A perturbative approach for the crystal chains with self-consistent stochastic reservoirs. *Submetido para publicação*, 2006.
- [52] M. Le Bellac. *Quantum and Statistical Field Theory*. Oxford Science Publications, 1991.
- [53] B. Simon. *The Statistical Mechanics of Lattice Gases*. Princeton University Press, fifth edition, 1993.
- [54] J. P. Eckmann, C. A. Pillet, L. Rey-Bellet. Non-equilibrium statistical mechanics of anharmonic chains of oscillators coupled to two heat baths at different temperatures. *Comm. Math. Phys.*, 201(3):657–697, 1999.
- [55] J. P. Eckmann, M. Harier. Non-equilibrium statistical mechanics of strongly anharmonic chains of oscillators. *Comm. Math. Phys.*, 212(1):105–164, 2000.
- [56] J. Bricmont, A. Kupiainen. On the derivation of fourier’s law for copled anharmonic oscillators. *arXiv:math-ph/0605062*, 2006.

- [57] R. Lefevere, A. Schenkel. Normal heat conductivity in a strongly pinned chain of anharmonic oscillators. *J. Stat. Mech.*, (L02001), 2006.
- [58] Emmanuel Perreira, Ricardo Falcao. Nonequilibrium statistical mechanics of anharmonic crystals with self-consistent stochastic reservoirs. *Phys. Rev. E*, 70, 2004.
- [59] J. Dimock. A cluster expansion for stochastic lattice fields. *J. Stat. Phys.*, 58(5/6):1181–1207, 1990.
- [60] G. Jona-Lasinio, R. S en eor. Study of stochastic differential equations by constructive methods. *J. Stat. Phys.*, 83(5/6):1109–1148, 1996.
- [61] J. Glimm, A. Jaffe. *Quantum Physics: A functional integral point of view*. Springer Verlag, 1987.
- [62] Ricardo Schor, Jo ao C. A. Barata, Paulo A. Faria da Veiga, Emmanuel Pereira. Spectral properties of weakly coupled landau-ginzburg stochastic models. *Phys. Rev. E*, 59(3):2689, 1999.
- [63] Paulo A. Faria da Veiga, Michael O’Carroll, Emmanuel Pereira, Ricardo Schor. Spectral analysis of weakly coupled stochastic lattice ginzburg-landau models. *Commun. Math. Phys.*, 220:377, 2001.
- [64] L. Yang, B. Hu. Comment on “normal heat conduction of one-dimensional lattice with periodic potential of nearest neighbor interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 94:219404, 2005.
- [65] O. V. Gendelman, A. V. Savin. Gendelman and Savin reply. *Phys. Rev. Lett.*, 94:219405, 2005.
- [66] E. Pereira, R. Falcao. Normal heat conduction in a chain with a weak interparticle anharmonic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 96:100601–1–100601–4, 2006.
- [67] J.D. Murray. *Asymptotic Analysis*. Springer-Verlag, 1984.

- [68] A. Francisco Neto, H. C. F. Lemos, E. Pereira. Heat conduction in a weakly anharmonic chain: an analytical approach. *J. Phys. A Mathematical General*, 39:9399–9410, 2006.
- [69] L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, F. Marchesoni. Stochastic resonance. *Rev. Mod. Phys.*, 70(1), 1998.
- [70] W. Horsthenk, R. Lefever. *Noise-induced Transitions*. Springer Verlag, 1984.
- [71] I. Karatzas, E. S. Shreve. *Brownian Motion and Stochastic Calculus*. Springer Verlag, 1991.
- [72] J. H. Conway, R. K. Guy. *The book of numbers*. Copernicus, Springer-Verlag, 1998.
- [73] The on-line Encyclopedia of Integer Sequences. <http://www.research.att.com>.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)