



Carlos Enrique Olivares Rodríguez

**Efeitos do alcance das interações no transporte
de calor**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: Profa. Celia Beatriz Anteneodo de Porto

Rio de Janeiro
Junho de 2017



Carlos Enrique Olivares Rodríguez

**Efeitos do alcance das interações
no transporte de calor**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Profa. Celia Beatriz Anteneodo de Porto
Orientadora
Departamento de Física – PUC-Rio

Prof. Welles Antonio Martinez Morgado
Departamento de Física – PUC-Rio

Prof. Nuno Miguel Melo Crokidakis Peregrino
UFF

Prof. Raul Oscar Vallejos
CBPF

Prof. Marlon Ferreira Ramos
UNICAMP

Prof. Márcio da Silveira Carvalho
Coordenador Setorial do Centro
Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 30 de junho de 2017.

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Carlos Enrique Olivares Rodríguez

Graduou-se em Física na Universidade Nacional de Ingeniería (Lima, Perú). Fez mestrado na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Ficha Catalográfica

Olivares Rodríguez, Carlos Enrique

Efeitos do alcance das interações no transporte de calor / Carlos Enrique Olivares Rodríguez; orientador: Celia Beatriz Anteneodo de Porto. – 2017.

v., 90 f: il. color. ; 30 cm

Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física.

Inclui bibliografia

1. Física – Teses. 2. Física estatística;. 3. Não equilíbrio;. 4. Transporte térmico;. 5. Termalização;. 6. Interações de longo alcance;. I. Anteneodo de Porto, Celia Beatriz. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Física. III. Título.

CDD: 620.11

Agradecimentos

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer a minha orientadora, Celia Anteneodo, pelo apoio constante e extrema paciência durante estes anos de trabalho juntos. Uma ajuda inestimável que me influenciou além do mundo acadêmico.

Agradeço também ao Departamento de Física da PUC-Rio, ao pessoal administrativo e aos professores. Em particular ao Prof. Welles Morgado cujas aulas e conversações sempre me ajudaram na compreensão de muitas sutilezas acadêmicas e sobretudo estimularam minha curiosidade.

Agradeço ao CNPq, CAPES e FAPERJ apoio financeiro durante o doutorado.

Quero agradecer também a todas aquelas pessoas que me ajudaram e acompanharam durante estes anos:

A Eduardo, Lucianno, Michael, Marlon, Juan Carlos, Sabrina, Max, Vivian e Antonio que também dedicam suas vidas ao estudo da física estatística e com os quais passamos muitos momentos de discussão, e claro, de diversão.

Aos meus queridos amigos Richard, Vanessa, Raquel, Dalber e Mariela por serem as grandes pessoas que são e estar sempre perto de minha família em todo momento importante.

A Enrique, Giovana, Evelyn pelo carinho e apoio nos momentos difíceis e pelas alegrias compartilhadas em todos estes anos que guardo em minha memória. A Benjamin por chegar a este mundo e nós trazer muita alegria e amor.

A meus padrinhos Benito e Domitila que apesar da distância sempre os tenho sempre presentes no meu coração.

A meus pais Rolando Olivares, que descansa em paz, e Rosa Rodriguez pelo apoio constante e me apoiar nas etapas mais importantes de minha vida e por me dar muito amor.

A minha irmã Ligia Eduarda pelo amor, apoio e inspiração constante que ela representa na minha vida.

A meu grande amor Cynthia Contreras por me ajudar a concretizar meus sonhos, me acompanhar e se sacrificar todos estes anos ao meu lado, com seu sorriso encantador. Porém o maior agradecimento que tenho a lhe fazer é por ser a mãe de Rosa Sofia.

E finalmente quero agradecer a Rosa Sofia por ser minha maior fonte de inspiração sem a qual agora não poderia mais viver.

Resumo

Olivares Rodríguez, Carlos Enrique; Anteneodo de Porto, Celia Beatriz. **Efeitos do alcance das interações no transporte de calor**. Rio de Janeiro, 2017. 90p. Tese de Doutorado – Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Em contraste com os sistemas em equilíbrio termodinâmico para os quais existem teorias bem desenvolvidas, para os fenômenos de não equilíbrio, os resultados analíticos são limitados. Assim, é importante complementar a abordagem teórica com o uso de simulações computacionais. Com efeito, a integração numérica das equações de movimento de modelos microscópicos simples, permite elucidar propriedades relevantes de fenômenos de não equilíbrio, a exemplo do transporte de calor, que é o objeto de estudo desta tese. A condução de calor é usualmente descrita pela lei de Fourier, entretanto esta lei falha em alguns sistemas unidimensionais, o que não é ainda bem compreendido. Por outro lado, uma das características de um sistema que pode influenciar fortemente as suas propriedades dinâmicas e termodinâmicas é o alcance das interações. Com efeito, quando o alcance é suficientemente longo, os tempos de relaxação podem crescer com o tamanho do sistema, podem surgir estados quase estacionários, ocorrer inequivalência de *ensembles* estatísticos e o calor específico pode ser negativo. Nesse cenário, estudamos o transporte de calor em diferentes sistemas unidimensionais variando o alcance das interações para analisar seus efeitos sobre o sistema. Primeiramente, consideramos um sistema unidimensional constituído de partículas que interagem mediante potenciais harmônicos da mesma intensidade, sem importar a distância entre partículas (campo médio). A este sistema são acoplados dois banhos térmicos a diferentes temperaturas. Como resultado, obtemos que a condutividade térmica, κ , diminui inversamente proporcional ao tamanho do sistema N , diferentemente do caso de curto alcance (primeiros vizinhos) conhecido na literatura por crescer proporcionalmente a N . Isto mostra que mesmo na ausência de não linearidade, o alcance das interações muda o comportamento do transporte e portanto poderia existir uma faixa de alcance intermediário que cumpra a lei de Fourier em uma dimensão. Para Hamiltonianos que conservam o momento, no caso de curto alcance, tipicamente a condutividade κ cresce com o tamanho do sistema como uma lei de potência com expoente γ que depende do potencial de interação, que no caso harmônico $\gamma = 1$. Como consequência, a condutividade diverge no limite termodinâmico. Entretanto, para o modelo de rotores (modelo XY), a condutividade é finita ($\gamma = 0$) independentemente

do tamanho do sistema. Portanto, vale a lei de Fourier. Assim, nesta tese, estudamos o transporte térmico usando uma generalização do modelo de rotores, na versão conhecida na literatura como modelo α -XY. Neste sistema todas as partículas estão acopladas com uma intensidade que decai algebricamente com a distância r entre pares de partículas, com expoente α , que regula o alcance das interações, varrendo desde primeiros vizinhos até campo médio. Mediante simulações numéricas, observamos o transporte de calor e perfil térmico quando é aplicada uma diferença de temperaturas, com média T , entre pontos extremos da cadeia. Os resultados são sintetizados em um diagrama de fases no plano α - T , onde são mostrados os diferentes regimes possíveis: (i) validade da lei de Fourier, (ii) condutividade crescente ou (iii) decrescente com o tamanho do sistema N . Em particular, neste último caso, observado para alcance suficientemente longo, o sistema se comporta como um isolante. Finalmente, estudamos a relaxação ao equilíbrio depois de aplicar perturbações cinéticas tanto localizadas como não localizadas. Comparamos os resultados para os sistemas de rotores, osciladores lineares e não lineares. Com a finalidade de relacionar as leis de escala de tamanho finito do tempo de relaxação τ e a condutividade térmica κ . Encontramos que para sistemas de curto alcance, vale que $\tau\kappa \sim N^2$, independentemente da difusão de calor ser normal ou não.

Palavras-chave

Física estatística; Não equilíbrio; Transporte térmico; Termalização; Interações de longo alcance;

Abstract

Olivares Rodríguez, Carlos Enrique; Anteneodo de Porto, Celia Beatriz (Advisor). **Effects of the range of the interactions on heat transport**. Rio de Janeiro, 2017. 90p. Tese de Doutorado – Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In contrast to systems in thermodynamic equilibrium, for which well-developed theories exist, for non-equilibrium phenomena, analytical results are limited. Thus, it is important to complement the theoretical approach with the use of computer simulations. In fact, the numerical integration of the equations of motion of simple microscopic models may allow the elucidation of relevant properties of non-equilibrium phenomena, such as heat transfer, which is the object of this thesis. The heat conduction is usually described by the Fourier law, however this law fails in some one-dimensional systems, which is not yet well understood. On the other hand, one of the characteristics of a system that can strongly influence its dynamic and thermodynamic properties is the range of interactions. Indeed, when the range is sufficiently long, relaxation times increase with the systems size, quasi-stationary states develop, occurring inequivalence of statistical *ensembles*, and negative specific heat. Within this scenario, in this thesis we study heat conduction in different one-dimensional systems varying the range of the interactions, to analyze its effects on the system. Firstly, we consider a one-dimensional system consisting of particles that interact through harmonic potentials of the same intensity, regardless of the distance between particles (mean field). To this system two thermal baths at different temperatures are coupled. We obtain that the thermal conductivity decreases inversely proportional to the size of the system N , unlike the case of short range (first neighbors) known in the literature to grow proportionally to N . This shows that even in the absence of nonlinearity, the range of the interactions changes the behavior of transport and therefore there could be an interval of intermediate ranges that fulfills the Fourier law in one dimension. For momentum-conserving Hamiltonians, in the case of short range interactions, typically the conductivity κ increases with the system size as a power law with γ exponent that depends on the interaction potential, which in the harmonic case is $\gamma = 1$. As a consequence, the conductivity diverges at the thermodynamic limit. However, for the rotor model (XY), the conductivity is finite ($\gamma = 0$) regardless of system size. In this thesis, we study thermal transport in a generalization of the chain of rotors, in the version known in the literature as the α -XY model. In this system, all particles are coupled with an

intensity that decays algebraically with the distance r among pairs of particles, with α exponent, which rules the range of interactions, scanning from first neighbors to mean-field. By means of numerical simulations, we observe heat transport and the thermal profile when a temperature difference, with mean T , is applied between chain endpoints. The results are summarized in a phase diagram in the α - T plane, where the different possible regimes are shown: (i) Fourier law is valid, (ii) increasing or (iii) decreasing conductivity with system size N . Particularly, the latter case, observed for a sufficiently long range, corresponds to insulator behavior. Finally, we study relaxation to equilibrium after applying both localized and non-localized kinetic perturbations. We compare the results for rotor systems, linear and non-linear oscillators. In order to relate the finite-size scale laws of the relaxation time τ to the thermal conductivity κ . We find that for short-range systems the product $\tau\kappa$ scales as N^2 , regardless of the heat diffusion be normal or not.

Keywords

Statistical physics; Non-equilibrium; Thermal transport; Thermalization; Long-range interactions;

Sumário

1	Introdução	15
1.1	Motivação	15
1.2	Transporte térmico	16
1.3	Modelos na literatura	19
1.4	Sistemas de longo alcance	24
1.4.1	Hamiltoniano de campo médio (HMF)	25
1.4.2	Equação de Vlasov	28
1.4.3	Modelo de rotores com alcance variável	30
2	Condução de calor em sistemas harmônicos de alcance variável	32
2.1	Resultados dentro do formalismo LEGF	32
2.1.1	Modelo	32
2.1.2	Fluxo de calor	35
2.1.3	Fluxo no sistema de campo médio	35
2.2	Comentários finais	39
3	Transporte de calor em sistemas de rotores com alcance variável	41
3.1	Modelo e métodos	41
3.2	Resultados	43
3.2.1	Perfis de temperatura	44
3.2.2	Fluxo de calor	46
3.2.3	Condutividade térmica	47
3.2.4	Diagrama de comportamentos da condutividade versus α e T	51
3.3	Comentários finais	52
4	Relaxação ao equilíbrio	54
4.1	Modelos e métodos	55
4.2	Relaxação depois de uma perturbação não localizada	57
4.2.1	Rotores XY de curto alcance	57
4.2.2	Rotores HMF de alcance infinito	59
4.2.3	Osciladores lineares e não lineares	61
4.3	Relaxação depois de uma perturbação localizada	63
4.4	Comentários finais	65
5	Conclusões e perspectivas	69
A	Hamiltoniano de campo médio	70
A.1	Dedução da curva calórica	71
B	Integração numérica	76
B.1	Algoritmo de Verlet	76
B.2	Integração numérica de equações diferenciais estocásticas	77
B.3	Dinâmica browniana	78
B.4	Algoritmo simplético	79

C	Tempo de relaxação para a difusão normal	81
	Referências bibliográficas	82

Lista de figuras

1.1	Figura extraída de [55] . (a) Perfil de temperatura e (b) condutividade $\kappa \sim J \times N$ para os modelos Harmônico, FPUT (FPU- β), e ϕ^4 descritos no texto.	23
1.2	A curva solida (azul) é descrita por $I_1(y)/I_0(y)$ e as pontilhadas mostram as retas do tipo $y/(\beta\epsilon)$, para $\epsilon = 1$. A interseção destas curvas define o valor de y_{max} que determina o mínimo valor da energia livre e portanto a magnetização $M = I_0(y_{max})/I_1(y_{max})$.	27
1.3	Curva calórica (esquerda) e magnetização (direita) para o HMF, linha tracejada é a curva teórica e os pontos azuis são simulações numéricas no <i>ensemble</i> microcanônico para $N = 2000$.	28
1.4	Comportamento do fator de Kac ($\tilde{N}^\alpha$) com o tamanho do sistema N , para diferentes valores de α .	31
1.5	Curva calórica. Temperatura T vs energia por partícula u para os casos $\alpha = 0$ (HMF) e $\alpha \rightarrow \infty$ (XY) do modelo α -XY.	31
2.1	Coeficiente de transmissão para $\alpha = 0$ (campo médio) e diferentes valores de N , baseado na Eq. (2-31)	38
2.2	Fluxo de calor para $\alpha \rightarrow \infty$ (primeiros vizinhos) e $\alpha = 0$ (campo médio) e diferentes valores de N .	39
2.3	Coeficiente de transmissão versus ω , para diferentes valores de α e N .	40
3.1	Esquema visual do sistema α -XY acoplados a banhos térmicos T_L e T_R .	42
3.2	Perfis de temperatura (a)-(b) e de fluxo (c)-(d) para diferentes realizações. Para $\alpha = 0.00$ (painéis da esquerda) e $\alpha = 3.00$ (painéis da direita). Em ambos os casos $T_L = 0.90$, $T_R = 0.70$ para $N = 100$.	43
3.3	Perfis de temperatura para diferentes valores de α . Para cada valor de α , foram computadas 50 realizações. $T \equiv (T_L + T_R)/2 = 0.8$, $\Delta T \equiv T_L - T_R = 0.2$, e $N = 100$.	44
3.4	Perfis de temperatura para $\alpha = 0.50$, e diferentes tamanhos N do sistema.	45
3.5	Diferença de temperatura entre cada reservatório e as partícula acoplada a ele, em função de α , para diferentes valores da temperatura média T , e $N = 100$.	45
3.6	Fluxo escalado $N \mathcal{J}^\alpha$ vs N , para diferentes valores de α indicados na figura. As linhas tracejadas são guias para os olhos. O erro padrão relativo associado a cada símbolo é de 100 %, 10 % e 1 % para $\alpha \in (0, 1)$, $(1, 2)$ e $(2, \infty)$, respectivamente. A linha contínua, com inclinação -1, foi desenhada para comparação. $T \equiv (T_L + T_R)/2 = 0.8$ e $\Delta T \equiv T_L - T_R = 0.2$.	46
3.7	Fluxo de energia por partícula, em função de α , para as posições indicadas na figura, de uma cadeia com $N = 100$, $T = 0.8$ e $\Delta T = 0.2$	48

- 3.8 Condutividade κ vs temperatura T , para diferentes tamanhos do sistema e α fixo, indicados nos painéis. No caso $\alpha = 3$, mostramos um ajuste de lei de potência para as curvas de $\kappa(T)$ no intervalo de alta temperatura. No gráfico inserido, mostramos a dependência de κ com N a baixas temperaturas ($T = 0.08$), para diferentes valores de α . Em todos os casos, $\Delta T/T = 0.25$. As linhas pontilhadas são guias para os olhos. 49
- 3.9 Diagrama no plano $T - \alpha$ dos diferentes regimes térmicos da condutividade κ : a condutividade atinge um valor finito (F), é decrescente (D) ou crescente (I) com N , para os tamanhos N investigados. Das curvas de $\kappa \sim N^{\mathcal{J}}$ vs N , como na Fig. 3.6, obtivemos a classificação indicada pelos caracteres para cada par (T, α) , com $\Delta T/T = 0.25$. A seta destaca os resultados para $T = 0.8$, de acordo com o mostrado na Fig. 3.6. A linha sólida preta representa o valor crítico $\alpha_c(T)$. 52
- 4.1 Rotores XY, primeiros vizinhos: relaxação ao equilíbrio, para $u = 0.4$. Temperaturas dos subsistemas quente (vermelho), frio (azul), e de todo o sistema (verde) versus tempo t , média sobre $2^{13}/N$ realizações. Para $N = 2^k$, onde $k = 5, \dots, 12$. A linha horizontal preta representa o valor teórico de equilíbrio. Inserção: temperatura versus tempo escalado t/N^δ , onde foi usado $\delta = 1.9$. 57
- 4.2 Rotores XY, primeiros vizinhos: (a) Tempo de relaxação τ versus o tamanho do sistema N para diferentes valores de energia u . As linhas sólidas correspondem ao ajuste de lei de potência com os expoentes mostrados na inserção. (b) Tempo de relaxação τ versus u para diferentes valores de N . Resultados para os subsistemas quentes e frios são mostrados por símbolos vermelhos e azuis respectivamente. 58
- 4.3 Rotores XY, campo médio: relaxação ao equilíbrio para $u = 0.4$ (a) e $u = 0.6$ (b). Temperatura dos subsistemas quentes (vermelhos), frios (azuis) e de todo o sistema (verde) versus tempo, média sobre $2^{18}/N$, com tamanhos dos sistemas $N = 2^k$, $k = 5, \dots, 12$. A linha horizontal preta representa o valor de equilíbrio teórico. 60
- 4.4 Evolução temporal da curtose da distribuição de velocidades dos rotores de campo médio XY, para $N = 256$ e $u = 0.4$. A linha preta horizontal corresponde ao valor da curtose da gaussiana $k_4 = 3$, desenhada para comparação. O valor médio de T da Fig. 4.3 é também reproduzido. 61

- 4.5 Rotores XY, campo médio: Tempo de relaxação τ como função do tamanho do sistema N (quadrados abertos) para dois valores diferentes de energia $u = 0.4$ (a) e 0.6 (b). Os resultados correspondentes para os rotores de curto alcance (círculos cheios) também são mostrados. As linhas contínuas pretas com inclinações $\tau \sim N$ e $\tau \sim N^2$ são desenhadas para comparação. Tempo de relaxação em função de u , para dois tamanhos diferentes de sistema (c). Os resultados para os subsistemas quente e frio são mostrados por símbolos vermelhos e azuis, respectivamente. Em todos os casos, foram feitas médias sobre $2^{18}/N$ realizações. Inserções: temperatura versus tempo escalado t/N^δ , onde foi usado $\delta = 1.09$ (a), 1.11 (b). 62
- 4.6 Cadeia harmônica: relaxação ao equilíbrio, como em figuras anteriores, com $u = 0.4$, para tamanhos $N = 2^k$ onde $k = 7 \dots, 14$. A inserção mostra os dados dimensionados, com $\delta = 1$. 63
- 4.7 Osciladores FPUT- β com $\beta = 1/6$: relaxação para o equilíbrio, para $u = 0.4$ e tamanhos $N = 2^k$ com $k = 6, \dots, 16$. As curvas colapsadas são mostradas na inserção, com $\delta \simeq 1.68$, para $N > 2^{13}$. 64
- 4.8 Osciladores: tempo de relaxação τ versus N , para diferentes valores de u . Os pequenos círculos cheios correspondem à cadeia de osciladores harmônicos ($u = 0.4$), a linha preta completa tem uma inclinação de $\delta = 1$. Enquanto os símbolos abertos correspondem à cadeia FPUT- β nas energias indicadas nas figuras. A inserção mostra o expoente de escala para os sistemas FPUT- β como função de u . 65
- 4.9 Evolução escalada do perfil de energia total sob a perturbação localizada, com $u = 0.4$, para (a) XY com $N = 128$ (a), (b) potencial harmônico (HC), e (c) FPUT- β , em ambos os casos $N = 1024$. A linha preta é um ajuste gaussiano e m é a energia média de 10 partículas em cada extremidade. 66

Lista de tabelas

- 4.1 Expoentes de escala da condutividade $\kappa \sim N^\gamma$ e o tempo de relaxação $\tau \sim N^\delta$, com tamanho do sistema N . 67

1

Introdução

1.1

Motivação

O universo é um grande sistema fora de equilíbrio termodinâmico. No entanto, dependendo das escalas de tempo e energia envolvidas podemos aproximar o estado de alguns subsistemas ao de equilíbrio termodinâmico. Nesse sentido, desenvolveram-se teorias fenomenológicas para descrever as transformações entre tipos de energias ordenadas (trabalho) e desordenadas (calor). Estas relações tiveram um papel fundamental no desenvolvimento das máquinas térmicas e posteriormente no estabelecimento das leis da termodinâmica [1]. Porém, estas leis macroscópicas resultam do comportamento microscópico do sistema.

Esta relação entre o mundo microscópico e o macroscópico iniciou-se com os trabalhos de Maxwell com a distribuição das velocidades dos gases ideais. Posteriormente, com os trabalhos de Boltzmann para a dedução de uma equação da evolução temporal da distribuição das velocidades e para a formulação do teorema H. Com isso, se abriu o caminho de uma descrição de não equilíbrio, usando um enfoque probabilístico das propriedades microscópicas [2]. Mais adiante, Gibbs formulou a *hipótese ergódica*, baseado na noção de *ensembles*, uma coleção de cópias do sistema, contemplando todos os diferentes estados microscópicos possíveis, mas todos com o mesmo estado macroscópico. Esta hipótese considera que a evolução temporal de um sistema visita todos os estados no *ensemble*.

Estas considerações levaram a um grande e bem sucedido desenvolvimento da física estatística de equilíbrio, como uma teoria microscópica para entender fenômenos termodinâmicos. Porém, quase todos os fenômenos reais, físicos e não físicos encontram-se fora do equilíbrio termodinâmico. Um dos fenômenos mais interessantes de não equilíbrio é a matéria viva, que é composta de pequenas máquinas inseridas em sistemas complexos responsáveis por nos manter longe do equilíbrio termodinâmico. Assim é interessante manter “uma postura de físico ingênuo” para tentar entender o funcionamento destes organismos com o uso das ferramentas que a física estatística pode nos fornecer [3].

Como os processos fora do equilíbrio são variados e geralmente complexos, e apesar de todos os esforços para investigar estes fenômenos, ainda temos um longo caminho a percorrer.

Nesta tese, pretendemos estudar os modelos mais simples possível para tratar o problema de transporte de calor unidimensional, que apesar de ser um assunto aparentemente simples, é um dos problemas ainda em aberto na física estatística [4].

1.2

Transporte térmico

Existem três formas diferentes de transportar energia; via condução, convecção e radiação. Para estudar a condução de calor, em situação estacionária, uma configuração simples consiste em colocar um sistema em contato com dois reservatórios térmicos a diferentes temperaturas, gerando um fluxo de energia através do sistema, do lado quente para o frio.

Produz-se então um fenômeno de transporte de energia devido a essa força termodinâmica. No início do século XIX, Joseph Fourier, procurando explicar o gradiente de temperatura existente na terra (do centro à superfície) [5], enunciou a seguinte lei fenomenológica para o fluxo local de energia

$$\vec{J}(\mathbf{x}, t) = -\kappa \nabla T(\mathbf{x}, t), \quad (1-1)$$

onde κ é a condutividade térmica e $T(\mathbf{x}, t)$ a temperatura local na posição $\mathbf{x}$ e no instante t . Agora, se consideramos $u(\mathbf{x}, t)$ como a densidade local de energia e usando a equação de continuidade

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1-2)$$

temos uma equação de difusão para a temperatura

$$\frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{1}{c} \nabla \cdot [\kappa \nabla T(\mathbf{x}, t)], \quad (1-3)$$

onde $c = \partial u / \partial T$ é o calor específico por unidade de volume. Ou seja, a lei de Fourier implica um transporte de energia difusivo normal.

Desde a época em que foi enunciada a lei de Fourier, se procura uma explicação para esta lei fenomenológica, partindo-se de primeiros princípios [6], como foi no caso das propriedades termodinâmicas do gás ideal [7, 8]. Em geral, o estudo da física de não equilíbrio tem como objetivo desenvolver

teorias das quais possa-se derivar, por exemplo, a Eq. (1-1) a partir de cálculos estatísticos [9].

Nesse sentido é importante usar modelos simplificados para poder analisar e capturar a física por trás do transporte térmico. Assim o estudo de sistemas unidimensionais (ou bidimensionais) foi o primeiro passo na tentativa de compreender os fenômenos observados na natureza. Entretanto, nos primeiros modelos estudados, que serão revisados a seguir, foram observados comportamentos anômalos, que interessantemente também são observados nos sistemas unidimensionais reais. Portanto, o interesse em sistemas unidimensionais não é somente acadêmico como também fundamental para o entendimento de resultados experimentais. Por exemplo, é observada uma dependência da condutividade térmica com o tamanho do sistema para nanotubos de carbono [10] ou cadeias moleculares [11, 12]. Estas análises e experimentos podem levar ao desenvolvimento de tecnologias baseadas no transporte de fônons, em contrapartida (ou conjunção) do transporte de elétrons [13, 14], por exemplo, o caso do diodo térmico [15, 16] no qual o alcance das interações tem um efeito positivo no incremento da retificação deste [17, 18].

Para o caso de cristais, eletricamente isolantes, o transporte de calor é devido às vibrações na rede. Portanto, os primeiros estudos probabilísticos do transporte térmico foram realizados considerando o cristal como um gás de fônons. Usando a equação de Boltzmann-Peierls, se mostra que é necessária a inclusão de não linearidades (para que haja interação entre os fônons) para ter um transporte normal (difusivo) de energia [19, 20].

Para estudar a condução de calor em sistemas unidimensionais precisamos de algumas definições padrão.

Por simplicidade, consideremos um sistema unidimensional, com interações entre primeiros vizinhos, dado por um Hamiltoniano clássico, da forma

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m_i} + U(x_i) + V(x_{i+1} - x_i) \right], \quad (1-4)$$

onde p_i e x_i são o momento e a posição da partícula i , $U(x_i)$ é um potencial que não conserva o momento total, V é o potencial de interações entre as partículas, e N o número total de partículas.

Para cada partícula na cadeia, usaremos a definição cinética de temperatura, dada por [9]

$$T_i = \left\langle \frac{p_i^2}{m_i} \right\rangle. \quad (1-5)$$

Neste caso só temos interações entre os primeiros vizinhos. A energia para uma posição x pode ser definida como

$$h(x, t) = \sum_n h_n \delta(x - x_n), \quad (1-6)$$

onde

$$h_n = \frac{p_n^2}{2m_n} + U(x_n) + \frac{1}{2} [V(x_{n+1} - x_n) + V(x_n - x_{n-1})]. \quad (1-7)$$

Definindo o fluxo de energia microscópica $j(x, t)$ como

$$j(x, t) = \sum_n j_n \delta(x - x_n), \quad (1-8)$$

e usando a equação de continuidade

$$\frac{dh(x, t)}{dt} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0, \quad (1-9)$$

obtemos [9]

$$j_n = \frac{1}{2} (x_{n+1} - x_n) (\dot{x}_{n+1} + \dot{x}_n) F(x_{n+1} - x_n) + \dot{x}_n h_n, \quad (1-10)$$

onde F é a derivada do potencial V . Cabe notar que em fluidos unidimensionais (assim como em sólidos), em que não existe movimento macroscópico, os fluxos de energia e de calor são equivalentes. O fluxo total sobre o sistema é

$$J = \sum_n j_n / N. \quad (1-11)$$

A condutividade κ deveria ser uma característica do material, independente do tamanho do sistema. Entretanto, da lei de Fourier (1-1) temos que

$$\kappa = \frac{J(L) L}{\Delta T}, \quad (1-12)$$

onde, em princípio, poderia surgir uma dependência com o tamanho L , a menos que o fluxo seja inversamente proporcional ao comprimento do sistema (ou N). Entretanto, estudos analíticos e computacionais da condução de calor em diferentes sistemas unidimensionais mostram um comportamento anômalo para a condutividade κ , que depende do tamanho do sistema da forma

$$\kappa \sim L^\gamma, \quad (1-13)$$

com $\gamma \neq 0$, onde o valor de γ depende do modelo ou teoria. Será que o comportamento anômalo pode ser descrito por uma lei de escala universal? E qual é a dependência deste expoente com a natureza das interações microscópicas? É isto que faz deste um problema polêmico, e de carácter fundamental na compreensão da física de não equilíbrio [20].

1.3

Modelos na literatura

Para estudar a transporte de calor estacionário de um ponto de vista microscópico, precisamos de dois componentes fundamentais: um meio responsável pelo transporte de energia (que vamos descrever por um hamiltoniano do tipo (1-4)) e as fontes de energia (reservatórios) que geram o gradiente de temperatura. Estes reservatórios idealmente devem consistir de um grande número de graus de liberdade para que as mudanças de energia neles sejam desprezíveis. Porém, o tratamento analítico é difícil e as simulações numéricas muito custosas. Mas estes problemas podem ser evadidos usando alguns modelos de reservatórios térmicos como: (i) banhos baseados em demônios tipo Maxwell, (ii) banhos estocásticos baseados em equações do tipo Langevin, ou (iii) banhos determinísticos tipo Nosé-Hoover.

(i) Os reservatórios tipo Maxwell têm um efeito instantâneo e atuam somente quando uma partícula atinge uma das paredes em contato com o reservatório. Ou seja, neste sistema as partículas continuam governadas pelo Hamiltoniano do sistema. Mas quando uma partícula colide com uma parede do reservatório, esta partícula sai no seguinte passo de tempo com uma velocidade dada pela distribuição de Maxwell-Boltzmann, correspondente à dimensionalidade do sistema. Por exemplo, no caso unidimensional, a probabilidade de uma partícula sair após a colisão [21] com velocidade v_x é dada pela distribuição

$$\phi_1(v_x) = \frac{m}{k_B T} |v_x| \theta(v_x) \exp \left[-\frac{mv_x^2}{2k_B T} \right], \quad (1-14)$$

onde T é a temperatura do reservatório e θ é a função de Heaviside e k_B a constante de Boltzmann.

(ii) Os banhos baseados na equação de Langevin [22, 23, 24, 25, 26, 27] são banhos que atuam constantemente sobre as partículas em contato com os reservatórios. O acoplamento é feito mediante forças estocásticas nas equações de movimento de forma que para um sistema unidimensional, com dois

reservatórios, um do lado direito e outro de lado esquerdo, temos que

$$\begin{aligned}\dot{p}_1 &= f_1 - \gamma_L p_1 + \eta_L(t), \\ \dot{p}_l &= f_l, \quad \text{para } l = 2, 3, \dots, N-1, \\ \dot{p}_N &= f_N - \gamma_R p_N + \eta_R(t),\end{aligned}\tag{1-15}$$

onde $f_l = -\partial\mathcal{H}/\partial x_l$, $\eta_{L,R}$ são os ruídos gerados por uma distribuição gaussiana e os $\gamma_{l,r}$ são os coeficientes de dissipação que satisfazem

$$\begin{aligned}\langle \eta_L(t) \eta_L(t') \rangle &= 2k_B T_L \gamma_L \delta(t - t'), \\ \langle \eta_R(t) \eta_R(t') \rangle &= 2k_B T_R \gamma_R \delta(t - t'), \\ \langle \eta_L(t) \eta_R(t') \rangle &= 0,\end{aligned}\tag{1-16}$$

onde $T_{l,r}$ são as temperaturas dos respectivos reservatórios. Estas são as relações de flutuação-dissipação ¹.

(iii) Os banhos térmicos tipo Nosé-Hoover [29, 30] são banhos determinísticos e com uma dinâmica de tempo reversível, que também são acoplados às partículas dos extremos.

Para os diferentes banhos térmicos, são observadas descontinuidades no perfil de temperatura: entre cada reservatório e a partícula mais próxima a este [31]. A diferença de temperaturas entre os reservatórios, $\Delta T = T_R - T_L = T_+ - T_-$, pode ser expressa como

$$\Delta T = \delta T_+ + \delta T_- + \int_0^L dx \nabla T,\tag{1-17}$$

sendo

$$\delta T_{\pm} = \epsilon l_{\pm} \nabla T_{\pm},\tag{1-18}$$

onde ϵ é um parâmetro adimensional que mede a eficiência do acoplamento da parede do termostato ao sistema e $l_{\pm}$ é o caminho livre médio. Aoki e Kuznezov [31] calcularam os valores de ϵ para os três tipos de reservatórios, obtendo $\epsilon_D = 0.8$ (Maxwell), $\epsilon_{NH} = 2.0$ (Nosé-Hoover), e $\epsilon_S = 40.0$ (Langevin).

Nesta tese, usamos principalmente banhos térmicos estocásticos tipo Langevin. Porém, os resultados dos modelos resumidos a seguir usam algum dos tipos de banhos mostrados acima. É importante ressaltar que as propriedades espectrais dos banhos têm uma influência importante no transporte de calor

¹A generalização da equação de Langevin permite construir diferentes tipos de banhos térmicos sempre que cumpram suas correspondentes relações de flutuação-dissipação [28].

[32, 33] e podem levar a resultados bem interessantes como é o caso da inversão do fluxo na presença de banhos atômicos [34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42].

O transporte térmico também pode ser estudado usando teoria da resposta linear, com a qual podem ser calculados os coeficientes de transporte via as relações de Green-Kubo,

$$\kappa_{GK} = \frac{1}{k_B T^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau \lim_{V \rightarrow \infty} \langle J(\tau) J(0) \rangle \quad (1-19)$$

a partir das correlações temporais do fluxo no equilíbrio, ou seja, podem-se obter relações de não equilíbrio usando um sistema no equilíbrio. Porém, por se tratar de uma expansão perturbativa, ela é válida somente quando são aplicados pequenos gradientes de temperatura. Estas relações estão baseadas na hipótese do *equilíbrio local* o que representa uma suposição forte [28].

Na literatura da condução de calor, ao longo dos anos, tem sido definidos muitos modelos microscópicos, com diferentes características e com diferentes resultados. Por isso, nesta seção pretendemos resumir alguns deles.

Baseados no Hamiltoniano (1-4), podemos, em particular, reescrevê-lo como:

$$\mathcal{H} = \sum_{l=1}^N \left[\frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{\lambda_{2,l} q_l^2}{2} + \frac{\lambda_{4,l} q_l^4}{4} \right] + \sum_{l=1}^{N+1} \left[\frac{k_{2,l}(q_l - q_{l-1})^2}{2} + \frac{k_{3,l}(q_l - q_{l-1})^3}{3} + \frac{k_{4,l}(q_l - q_{l-1})^4}{4} \right], \quad (1-20)$$

onde p_l é momento conjugado da coordenada q_l , valores não nulos de $\lambda_{2,l}$, $\lambda_{4,l}$ confinam a dinâmica das partículas a flutuar ao redor de sua posição de equilíbrio e os $k_{n,l}$ representam as intensidades das interações entre as partículas vizinhas.

No caso dos osciladores harmônicos, em que $\forall l = 1, \dots, N$, $k_{2,l} = k_2$, $k_{3,l} = k_3 = 0$, $k_{4,l} = k_4 = 0$, se $\lambda_{2,l} = 0$, $\lambda_{4,l} = 0$, com condições de contorno livres, se recupera o modelo de Nakazawa [43]. Entretanto, se $\lambda_{2,1} \neq 0$, $\lambda_{4,l} = 0$, com bordas fixas, temos o modelo de Rieder et. al. [44]. Nestes casos, o comportamento do fluxo é independente do tamanho do sistema e portanto a condutividade diverge como $\kappa \sim N$ ($\gamma = 1$) [45, 46, 47, 42]. Essa lei está associada ao transporte balístico, devido à falta de acoplamento entre os modos normais (fônons).

O modelo de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT), $\lambda_{2,l} = 0$, $\lambda_{4,l} = 0$, $\forall l \in 1 \dots N$, $k_{2,l} = k_2$, $k_{3,l} = k_3$, $k_{4,l} = k_4$, é composto por um conjunto de osciladores, com anarmônica, acoplados com os primeiros vizinhos. Se

$k_4 = 0$, o modelo é conhecido como FPU- α^2 e se $k_3 = 0$ como FPU- β . Este modelo foi proposto para estudar como os sistemas anarmônicos chegam ao equilíbrio [48, 49, 50]. Surpreendentemente, apesar do sistema ser não linear, ele não atinge a equipartição de energia esperada. O entendimento destes sistemas levou ao surgimento de novas áreas e conceitos na física [51], como a descoberta dos sólitons. Mas apesar do problema de termalização no caso isolado, o FPUT é melhor comportado quando acoplado a reservatórios térmicos [20].

Os primeiros estudos de condução de calor considerando o FPU- β , realizados por Lepri et. al. [52, 53], mostraram que a condutividade diverge com o tamanho, seguindo a forma N^γ , com $\gamma \approx 0.45$, para $N < 400$ [52] e $\gamma \approx 0.38$ [53], para $N > 2048$ em sistemas com $\Delta T = 128$ e $T_l = 80$. Mostraram também que o perfil de temperatura é não linear e independente da temperatura média do sistema, já que se obtém o mesmo perfil para $\Delta T = 4$ e $\Delta T = 128$, portanto o comportamento não linear é atribuído por eles às condições de contorno.

Resultados posteriores de Lepri et al. mostraram que para FPU- β vale $\gamma \approx 0.37$ e para FPU- α é $\gamma \lesssim 0.44$ [9]. Isto mostra duas classes de universalidade para o FPUT que dependem do potencial de interação, de acordo com a teoria de modos acoplados (MCT, de “Mode-coupling theory”, em inglês) [9], que prediz $\gamma = 1/3$ para $k_3 \neq 0$, e $\gamma = 1/2$ para $k_3 = 0, k_4 \neq 0$. Por outro lado, Narayan e Ramaswamy, usando grupo de renormalização para equações de transporte com flutuações térmicas, estabeleceram uma única classe de universalidade $\gamma = 1/3$ para sistemas unidimensionais com conservação de momento. As simulações de Mai et. al. [54] para FPU- β , com condições de contorno fixas, confirmam $\gamma = 1/3$.

Nesse mesmo trabalho, realizaram simulações de massas alternadas para estudar a temperatura local no sistema. Como resultado dessas simulações, encontraram oscilações no perfil de temperatura. Essas oscilações são invariantes frente a mudanças no ΔT e aumentam em amplitude com o tamanho do sistema N . As oscilações aparecem independentemente do modelo do reservatório (Langevin ou Nosé-Hoover). Em contraste, também acharam que o modelo FPU- β de massas iguais gera uma temperatura local bem comportada e gaussiana, o que levanta a questão sobre quais são as condições necessárias e suficientes para ter temperatura local.

Para o caso do modelo ϕ^4 , $\lambda_{2,l} = 0, \lambda_{4,l} \neq 1, \forall l \in 1 \dots N, k_{2,l} = k_2 \neq 0, k_{3,l} = k_3 = 0, k_{4,l} = k_4 = 0$, a lei de Fourier é satisfeita [55]. Para resumir estes resultados, pode-se observar na Fig. 1.1 o comportamento do

²Este α é somente uma notação do modelo e não está relacionado com o alcance da interação que será usado nas próximas seções desta tese.

perfil de temperatura e da condutividade (J versus N , a ΔT fixo). Estes

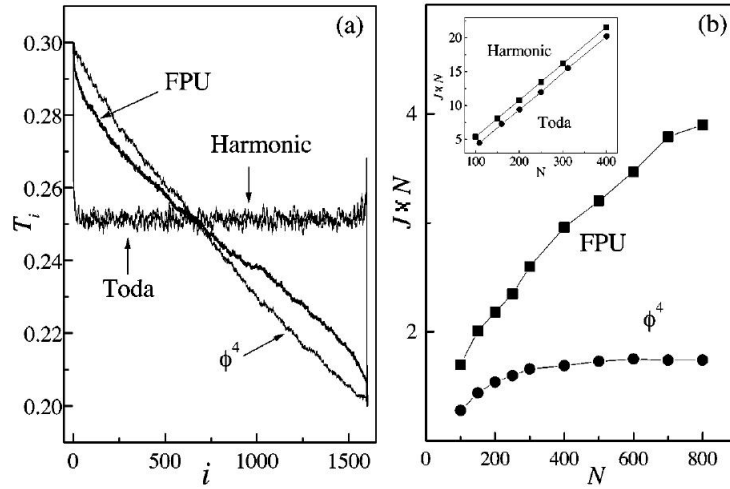


Figura 1.1: Figura extraída de [55] . (a) Perfil de temperatura e (b) condutividade $\kappa \sim J \times N$ para os modelos Harmônico, FPUT (FPU- β), e ϕ^4 descritos no texto.

resultados levaram à conclusão de que o potencial externo é importante para a condução normal de calor [55]. Paralelamente a estes trabalhos numéricos, foi publicado um resultado analítico de Prosen e Campbell onde mostraram que a conservação do momento implica condutividade anômala [56].

Porém, como veremos mais adiante, um sistema de rotores [57, 58] (modelo XY de primeiros vizinhos), que é um modelo que conserva o momento angular, tem condutividade finita a altas temperaturas, independente de N [59, 60, 61, 62, 63, 64]. Este modelo tem um potencial de interação entre as partículas sendo $V(x) = 1 - \cos(x)$ e $U(x) = 0$ no Hamiltoniano da Eq. (1-4). A atual conjectura sobre o motivo pelo qual este modelo tem condutividade finita é a natureza limitada e periódica do potencial de interação, provocando assim uma não conservação do *stretch* r que é definido como $r_l = q_l - q_{l-1}$ [65, 66]. A versão de campo médio do modelo dos rotores é um modelo paradigmático para analisar a natureza das interações de longo alcance, além de permitir uma generalização em que pode-se mudar o alcance das interações [67, 68]. Na seguinte seção veremos as características fundamentais das interações de longo alcance para logo investigar o transporte térmico nesse tipo de sistema.

1.4

Sistemas de longo alcance

Nesta seção introduzimos os conceitos básicos dos sistemas com interações de longo alcance.

A mecânica estatística do equilíbrio, formulada por Gibbs, não pode ser aplicada em sistemas onde a entropia total do sistema não é soma das partes deste, estes sistemas são chamados de *não aditivos*. Um exemplo claro desse tipo de sistema, é quando a energia de interação devido ao contato dos subsistemas (energia da superfície de contato) não pode ser desprezível, frente à das partes, no limite termodinâmico [1, 69].

Os sistemas com interações de longo alcance são não aditivos por natureza, quer dizer se temos dois sistemas isolados com energias E_1 e E_2 , ao juntar estes sistemas a energia total será $E \neq E_1 + E_2$. É importante salientar a diferença entre extensividade e aditividade. Uma quantidade termodinâmica, por exemplo a energia E , é dita *aditiva* se ao separar o sistema em duas partes isoladas, E_1 e E_2 , a soma destas partes recupera a quantidade calculada para o sistema completo, é dizer $E = E_1 + E_2$. Entretanto, é dita *extensiva* quando a grandeza escala com o tamanho do sistema, por exemplo, $E(\lambda N) = \lambda E(N)$ [7]. Se um sistema físico é aditivo este é extensivo, porém se é extensivo não necessariamente é aditivo [70, 71]. Para clarificar estes conceitos consideremos o Hamiltoniano de Curie-Weiss

$$\mathcal{H}_{CW} = -\frac{\epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N S_i S_j = -\frac{\epsilon}{2N} \left(\sum_i S_i \right)^2 = -\frac{\epsilon}{2} N M^2 \quad (1-21)$$

onde $S_j = \pm 1$ e $M = \sum_i S_i / N$. Note-se que este sistema é pseudo-extensivo dado que os coeficientes de acoplamento foram reescalados por N , já que sem a presença deste fator, chamado fator de Kac [72], a energia do sistema crescería como N^2 e portanto a energia por partícula divergiría no limite termodinâmico. Porém, mesmo que o sistema definido pela Eq. (1-21) seja extensivo, este não é aditivo já que se consideramos que uma metade do sistema tem $S_i = 1$, para $i = 1, \dots, N/2$, e a outra tem $S_i = -1$, para $i = N/2 + 1, \dots, N$, a energia total seria $E = 0 \neq E_1 + E_2$ [71].

Agora, com a finalidade de definir sistemas de longo alcance, avaliemos o crescimento da energia ε de uma partícula num sistema onde as interações decaem com a distância segundo uma lei de potência da forma $1/r^\alpha$, com $\alpha > 0$. Num espaço d -dimensional a energia associada a esta partícula será

$$\varepsilon = \int_{\delta}^R d^d r \rho \frac{\epsilon}{r^\alpha} = \rho \epsilon \Omega_d \int_{\delta}^R d^d r r^{d-1-\alpha} = \frac{\rho \epsilon \Omega_d}{d-\alpha} \left[R^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha} \right], \quad (1-22)$$

onde ρ é a densidade (e.g., de massa ou carga), ϵ é a constante de acoplamento, Ω_d o volume angular na dimensão d , e δ é um raio de corte para excluir as contribuições das auto-energias. Então, à medida que o raio R vai aumentando, a energia só vai permanecer finita se e somente se $\alpha > d$, neste caso o sistema é de alcance finito. No caso contrário, $\alpha \leq d$, a energia cresce super-linearmente com o tamanho do sistema e é nesse caso que o sistema é considerado de *longo alcance* [71, 73, 74]. Em geral, podemos distinguir duas classes de sistemas de longo alcance, se $\alpha = \sigma + d$, então para $-d \leq \sigma \leq 0$, a interação de longo alcance é chamada *forte*, para $0 < \sigma \leq \sigma_c(d)$ a interação de longo alcance é chamada *fraca*, onde $\sigma_c(d) = 2$ para $d \geq 4$ e $\sigma_c(d) = d/2$ para $d < 4$ [75].

Uma propriedade importante dos sistemas de curto alcance é a equivalência de *ensembles*, o que permite calcular as propriedades termodinâmicas em qualquer *ensemble* segundo a conveniência do problema, já que no limite termodinâmico as flutuações vão para zero. Porém, nos sistemas não aditivos esta equivalência dos *ensembles* pode não ser válida. Isto é porque na construção do *ensemble* canônico se parte de um sistema isolado composto de dois subsistemas, reservatório R (grande) e outro S (pequeno), e é assumida aditividade nas energias entre o subsistemas R e S [73]. Nesse sentido, devemos ser cautelosos ao usar o *ensemble* canônico para calcular as propriedades termodinâmicas do sistema.

O alcance das interações traz consigo o surgimento de alguns fenômenos interessantes, além da inequivalência de *ensembles* [76], tais como a existência de estados quase estacionários (QSS) [77, 71, 78], difusão anômala [79, 80], quebra de ergodicidade [81] e calor específico negativo [82].

Alguns exemplos de sistemas de longo alcance reais são os sistemas auto-gravitantes $\sigma = -2$, dipolos magnéticos ($V(r) \sim 1/r^3$), plasmas, vórtices em duas dimensões ($V(r) \sim \ln r$). Na próxima subseção estudaremos o Hamiltoniano de campo médio que é o modelo mais frequentemente utilizado como paradigma para estudar as característica dos sistemas de longo alcance.

1.4.1

Hamiltoniano de campo médio (HMF)

O Hamiltoniano de campo médio (HMF) é o primeiro termo de uma expansão em série de Fourier de um potencial periódico, $V(q) = V(q + 2\pi)$, onde $q \in [-\pi, \pi]$, $V(q) = v_0 + \sum_{k=1}^{\infty} v_k \cos(kq)$. Esta é a versão unidimensional de campo médio do modelo inercial XY clássico e seu Hamiltoniano é dado por [83]:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{\epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(q_i - q_j)] \quad (1-23)$$

onde q_i e p_i são os pares conjugados canônicos, que podem ser interpretados de duas formas: como spins clássicos que interagem com alcance infinito ou como partículas que se movem em um círculo de raio unitário. As equações de movimento correspondentes ao HMF são:

$$\ddot{q}_i = F_i = -\frac{\epsilon}{N} \sum_{j=1}^N \sin(q_i - q_j), \quad (1-24)$$

onde F_i é a força resultante sobre a partícula i . Agora se definimos $m_i = (\cos(q_i), \sin(q_i))$ como o vetor de spin de cada partícula temos que

$$\vec{M} = (M_x, M_y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{m}_i, \quad (1-25)$$

assim podemos reescrever as equações de movimento como

$$\ddot{q}_i = -\epsilon M \sin(q_i - \phi), \quad (1-26)$$

onde, $\tan \phi = (M_x/M_y)$. Estas equações mostram que cada partícula tem o comportamento de um pêndulo de comprimento ϵM com uma fase ϕ . Tanto a magnetização M como a fase ϕ mudam autoconsistentemente no tempo dependendo de todas as coordenadas q_i do sistema, $M(t) = M(q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t))$. Note-se também que, no caso $M = 0$, as partículas comportam-se como partículas livres, e portanto rotam sem interação com as demais (fase de rotores livres).

Para o caso ferromagnético $\epsilon > 0$, este modelo apresenta uma transição de fase contínua, ferromagnética-paramagnética, o que ocorre à energia crítica por partícula $u_c = 3\epsilon/4$ e $T_c = 0.5\epsilon$.

Este modelo simples permite o estudo das propriedades dos sistemas de longo alcance e ainda assim mantém a equivalência de *ensembles* canônicos e micro-canônicos [71]. As propriedades termodinâmicas de equilíbrio são calculadas a partir da energia livre por partícula (apêndice A)

$$-\beta F = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\pi}{\beta} \right) - \frac{\beta\epsilon}{2} - \max_y \left(-\frac{y^2}{2\beta\epsilon} + \ln(2\pi I_0(y)) \right), \quad (1-27)$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel de ordem zero. Então para minimizar a energia livre tem que ser satisfeita a condição

$$\left(\frac{y}{\beta\epsilon} - \frac{I_1(y)}{I_0(y)} \right) \Big|_{y=y_{max}} = 0. \quad (1-28)$$

Uma vez calculado y_{max} , podemos obter as propriedades macroscópicas do sistema, como a energia interna por partícula

$$u = \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta} = \frac{1}{2\beta} + \frac{\epsilon}{2} (1 - M^2) \quad (1-29)$$

onde $M = I_1(y_{max})/I_0(y_{max})$. Portanto, a magnetização é calculada a partir da interseção das curvas da condição (1-28). Na Fig. 1.2 mostra-se o comportamento das magnetização para dois valores diferentes de temperatura, β_1 e β_2 , onde o corte das linhas pontilhadas fornece os valores da magnetização para a temperatura correspondente.

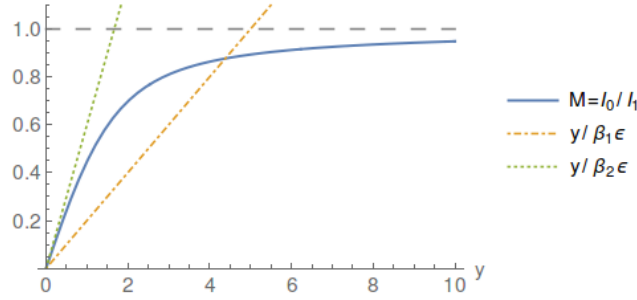


Figura 1.2: A curva sólida (azul) é descrita por $I_1(y)/I_0(y)$ e as pontilhadas mostram as retas do tipo $y/(\beta\epsilon)$, para $\epsilon = 1$. A interseção destas curvas define o valor de y_{max} que determina o mínimo valor da energia livre e portanto a magnetização $M = I_0(y_{max})/I_1(y_{max})$.

Note-se que, para temperaturas $T > T_c$ ($T_c = 1/\beta_c = 0.5\epsilon$), as curvas se cortam somente na origem, portanto a magnetização é zero. Para temperaturas menores, existe uma segunda interseção, dando magnetização não nula. No ponto $T = T_c$, o sistema sofre uma transição de fase contínua. Podemos achar T_c para cada valor de u numericamente e assim construir as curvas calóricas e de magnetização, como mostrado na Fig. 1.3.

1.4.2

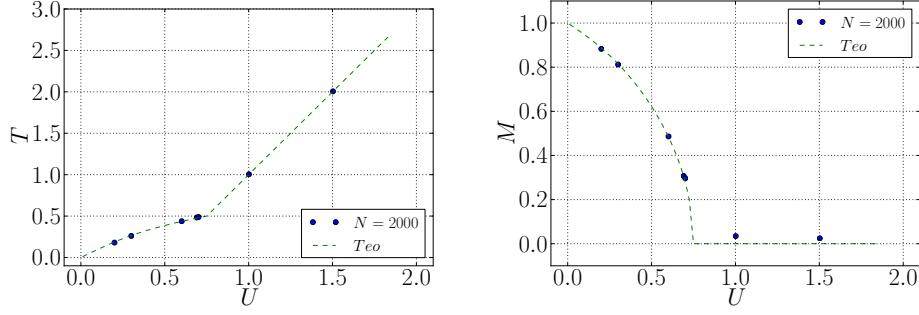


Figura 1.3: Curva calórica (esquerda) e magnetização (direita) para o HMF, linha tracejada é a curva teórica e os pontos azuis são simulações numéricas no *ensemble* microcanônico para $N = 2000$.

Equação de Vlasov

Consideremos a função densidade discreta de uma partícula dependente do tempo como

$$f_d(q, p, t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \delta(q - Q_j(t)) \delta(p - P_j(t)), \quad (1-30)$$

onde δ é a função de Dirac, (q, p) as coordenadas do espaço de fase e (Q_i, P_i) as coordenadas das partículas. Pode-se deduzir a chamada equação de Klimontovich

$$\frac{\partial f_d}{\partial t} + p \frac{\partial f_d}{\partial q} - \frac{\partial \Phi}{\partial q} \frac{\partial f_d}{\partial p} = 0, \quad (1-31)$$

onde

$$\Phi(q, t) = \int dq' dp' V(q - q') f_d(q', p', t), \quad (1-32)$$

V é o potencial de interação entre pares de partículas e Φ é o potencial de campo médio.

Esta equação descreve a evolução temporal exata da f_d no espaço de fases, mas solucioná-la significaria solucionar as equações de movimento de todas as partículas que compõem o sistema, o que representa uma tarefa muito complicada. Porém, podemos considerar uma densidade de estados macroscópicos iniciais como $f_{in}(\{Q_i(0), P_i(0)\})$ e definir a função densidade média de uma partícula f_0 como

$$f_0(q, p, t) \equiv \langle f_d(q, p, t) \rangle = \int \prod_i dQ_i(0) dP_i(0) f_{in}(\{Q_i(0), P_i(0)\}) f_d(q, p, t), \quad (1-33)$$

com isso temos uma equação para f_0 dependente da distribuição das condições iniciais e obtemos uma equação

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + p \frac{\partial f_0}{\partial q} - \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial q} \frac{\partial f_0}{\partial p} = \frac{1}{N} \left\langle \frac{\partial \delta \Phi}{\partial q} \frac{\partial \delta f}{\partial p} \right\rangle, \quad (1-34)$$

onde

$$\begin{aligned} f_d(q, p, t) &= f_0(q, p, t) + \frac{1}{\sqrt{N}} \delta f(q, p, t), \\ \Phi &= \langle \Phi \rangle(q, p, t) + \frac{1}{\sqrt{N}} \delta \Phi(q, p, t). \end{aligned} \quad (1-35)$$

No limite termodinâmico o termo do lado direito vai para zero e temos a chamada equação de Vlasov ou equação de Boltzmann sem colisões

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + p \frac{\partial f_0}{\partial q} - \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial q} \frac{\partial f_0}{\partial p} = 0, \quad (1-36)$$

em que, para o caso do HMF, o campo médio Φ vale

$$\Phi[f](q, t) = - \int_{-\pi}^{\pi} dq \int_{-\infty}^{\infty} dp \cos(q - q') f(q', p', t). \quad (1-37)$$

Da Eq. (1-36) podemos observar que, se inicialmente temos uma distribuição uniforme nas coordenadas q , ou seja, $f_0 = f_0(p, t)$, então $\langle \Phi \rangle = \text{const}$ e portanto a equação de Vlasov é reduzida como

$$\frac{\partial f_0}{\partial t}(p, t) = 0. \quad (1-38)$$

Isto significa que qualquer distribuição inicial em p será estacionária no tempo, se a distribuição inicial em q é uniforme e portanto não atinge o equilíbrio de Boltzmann. Entretanto, para um tamanho finito N existem termos (lado direito 1-34) semelhantes aos de colisão da equação de Boltzmann, que desestabilizam as distribuições nas velocidades. Portanto existem condições iniciais no sistema que levam à formação de estados *quase estacionários* [77, 78, 84] com tempos de vida dependentes do tamanho do sistema ($\tau \sim N^\gamma$) e que eventualmente possam chegar ao equilíbrio de Boltzmann [71].

1.4.3

Modelo de rotores com alcance variável

O modelo α -XY originalmente proposto em [67] é uma generalização do modelo HMF no qual podemos ajustar o alcance das interações desde o campo médio (HMF) para o caso de primeiros vizinhos (XY) mediante um parâmetro α .

O Hamiltoniano do modelo α -HMF (XY) é

$$\mathcal{H}^\alpha = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2\widetilde{N}^\alpha} \sum_{i \neq j}^N \frac{1 - \cos(q_i - q_j)}{r_{ij}^\alpha}, \quad (1-39)$$

onde $r_{i,j}$ é a distância mínima entre as partículas i e j , α é o expoente que permite ponderar a intensidade do alcance das interações, e $\widetilde{N}^\alpha$ é o fator de Kac [72], definido para condições de fronteira periódicas como

$$\widetilde{N}^\alpha = 2 \sum_{r=1}^{N/2} r^{-\alpha}. \quad (1-40)$$

O comportamento do $\widetilde{N}^\alpha$ no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ (ver Fig. 1.4), é

$$\widetilde{N}^\alpha = 2 \int_{1/2}^{N/2} dr r^{-\alpha} \sim \begin{cases} 2^\alpha \frac{1}{1-\alpha} N^{1-\alpha} & \text{para } 0 \leq \alpha < 1 \\ 2 \ln N & \text{para } \alpha = 1 \\ \Theta(\alpha) \frac{1}{\alpha-1} & \text{para } \alpha > 1 \end{cases} \quad (1-41)$$

onde $\Theta(\alpha)$ é uma função de α que vai para $2(\alpha - 1)$ quando $\alpha \rightarrow \infty$.

Para o caso $0 \leq \alpha < 1$, se tem uma transição de fase no mesmo valor crítico u_c (T_c) que no modelo HMF como mostrado na Fig. 1 da referência [68], onde se observa um colapso das curvas de magnetização com $\alpha < 1$. Para $1 < \alpha < 2$ ainda temos transição de fase, porém o valor crítico u_c depende do α (diminui). E para $\alpha > 2$, não existe transição de fase no sistema como é no caso do modelo XY para primeiros vizinhos. Estes resultados numéricos foram depois complementados com os analíticos de Campa et. al. [85], que generalizaram o estudo para d dimensões da rede e para n dimensões nos graus de liberdade do spin [86]. Na Fig. 1.5 são apresentadas as curvas calóricas para os casos extremos do modelo α -XY, para comparação.

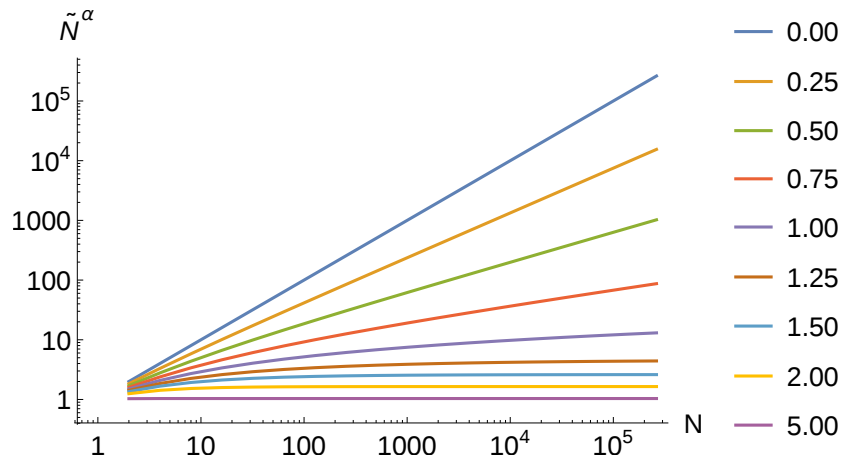


Figura 1.4: Comportamento do fator de Kac ($\tilde{N}^\alpha$) com o tamanho do sistema N , para diferentes valores de α .

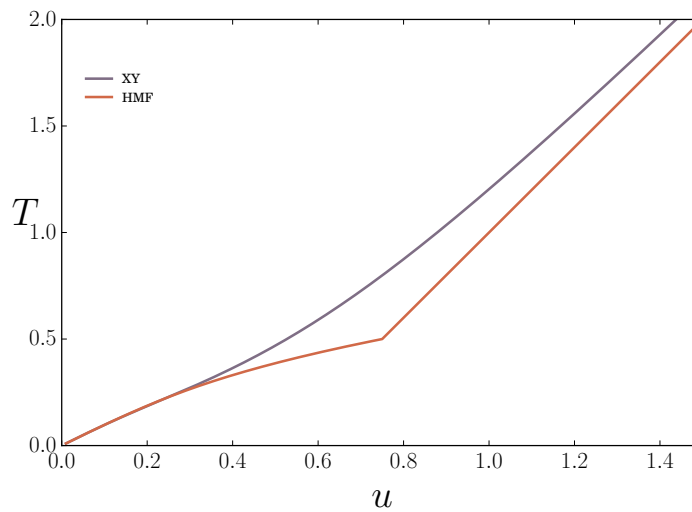


Figura 1.5: Curva calórica. Temperatura T vs energia por partícula u para os casos $\alpha = 0$ (HMF) e $\alpha \rightarrow \infty$ (XY) do modelo α -XY.

2

Condução de calor em sistemas harmônicos de alcance variável

O modelo microscópico mais simples e direto para estudar o transporte de energia consiste de uma cadeia unidimensional de osciladores harmônicos, com dois banhos térmicos acoplados nos extremos. Neste capítulo usamos o formalismo LEGF (do inglês *Langevin Equations and Green Functions*, equações de Langevin e funções de Green) para calcular as propriedades de transporte em uma cadeia harmônica com interações de alcance variável, complementando o resultado conhecido para primeiros vizinhos, ou seja, $\kappa \sim N$ [45, 46, 47, 42]. Mostraremos que para o caso de alcance infinito, a condutividade decai com o tamanho do sistema, seguindo a lei $\kappa \sim 1/N$.

2.1

Resultados dentro do formalismo LEGF

2.1.1

Modelo

O Hamiltoniano de um sistema com interações harmônicas em que a intensidade do acoplamento decai como lei de potência com a distância entre osciladores é dado por:

$$\mathcal{H}^\alpha = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \frac{k}{\widetilde{N}^\alpha} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \left[\frac{1}{2} \frac{(q_i - q_j)^2}{r_{i,j}^\alpha} \right], \quad (2-1)$$

onde p_i e q_i são, respectivamente, o momento e o deslocamento com relação à posição de equilíbrio da partícula i , N o número de partículas do sistema, α o expoente característico do alcance da interação, e

$$\widetilde{N}^\alpha = \frac{1}{N-1} \sum_i^N \widetilde{N}_i^\alpha, \quad \text{com} \quad \widetilde{N}_i^\alpha = \sum_{j \neq i}^N r_{i,j}^{-\alpha}, \quad \text{sendo} \quad r_{i,j} = |i - j|, \quad (2-2)$$

é o factor de Kac [72] para garantir a extensividade do sistema, quer dizer, para a energia não divergir no limite termodinâmico. Logo, para os casos extremos do alcance das interações, obtemos os seguintes valores de $\widetilde{N}^\alpha$: Para primeiros

vizinhos ($\alpha \rightarrow \infty$), temos $\widetilde{N}_i^\alpha = 2$ para $1 < i < N$ e $\widetilde{N}_1^\alpha = \widetilde{N}_N^\alpha = 1$, então $\widetilde{N}^\alpha = 2$. Para o campo médio ($\alpha = 0$), temos $\widetilde{N}_i^\alpha = N - 1$, para todo i , então $\widetilde{N}^\alpha = N$.

Do Hamiltoniano acima, resultam as equações de movimento

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{q}_1 &= F_1^\alpha + \int_{-\infty}^t dt' \Sigma_L^+(t-t') q(t') + \eta_L, \\ m_n \ddot{q}_n &= F_n^\alpha, \quad \text{para } n = 2, 3, \dots, N-1, \\ m_N \ddot{q}_N &= F_N^\alpha + \int_{-\infty}^t dt' \Sigma_R^+(t-t') q(t') + \eta_R, \end{aligned} \quad (2-3)$$

onde $\Sigma_{L/R}$ é o kernel de dissipação, $\eta_{L/R}$ é o ruído na equação generalizada de Langevin [28], e

$$\begin{aligned} F_l^\alpha &= \sum_{n \neq l}^N \frac{k}{\widetilde{N}^\alpha} \frac{(q_n - q_l)}{r_{n,l}^\alpha}, \\ &= \frac{k}{\widetilde{N}^\alpha} \left(\widetilde{N}_l^\alpha q_l - \sum_{n \neq l}^N \frac{q_n}{r_{n,l}^\alpha} \right) \end{aligned} \quad (2-4)$$

é a força resultante sobre a partícula l .

Para obter a solução particular das equações de movimento (2-3), aplicamos a transformada de Fourier em cada membro das equações, obtendo

$$\begin{aligned} -m_1 \omega^2 q_1(\omega) &= F_1^\alpha(\omega) + \Sigma_L^+(\omega) q_1(\omega) + \eta(\omega), \\ -m_n \omega^2 q_n(\omega) &= F_n^\alpha(\omega), \quad \text{para } 1 < n < N \\ -m_N \omega^2 q_N(\omega) &= F_N^\alpha(\omega) + \Sigma_R^+(\omega) q_N(\omega) + \eta(\omega), \end{aligned} \quad (2-5)$$

onde

$$\begin{aligned} q_n(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} q_n(t) e^{-i\omega t} dt, \\ \eta_{L/R}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \eta_{L/R}(t) e^{-i\omega t} dt, \\ \Sigma_{L/R}^+(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \Sigma_{L/R}^+(t) e^{-i\omega t} dt. \end{aligned} \quad (2-6)$$

O sistema de equações no espaço de Fourier pode ser reescrito matricialmente como

$$\left[-\hat{M}\omega^2 + \hat{\Phi}^\alpha - \hat{\Sigma}_L^+(\omega) - \hat{\Sigma}_R^+(\omega) \right] \hat{X}(\omega) = \hat{\eta}_L(\omega) + \hat{\eta}_R(\omega) \quad (2-7)$$

ou

$$\hat{X}(\omega) = G^+(\omega) [\hat{\eta}_L(\omega) + \hat{\eta}_R(\omega)] , \quad (2-8)$$

onde

$$G^+ = \frac{1}{[-\hat{M}\omega^2 + \hat{\Phi}^\alpha - \hat{\Sigma}_L^+(\omega) - \hat{\Sigma}_R^+(\omega)]} \quad (2-9)$$

é a função de Green para o sistema de equações (2-3), onde $\hat{X}(\omega)$ é o vetor de posições $q_n(\omega)$, $\hat{M}_{ij} = m_i \delta_{i,j}$ é a matriz de massa, $\hat{\Sigma}_{i,j}^+ = \Sigma^+(\omega) \delta_{i,1} \delta_{i,j}$ é a matriz de dissipação, $\hat{\eta}_{L/R} = \eta_{L/R} \delta_{i,1/N}$ são os vetores coluna do ruído, e

$$\hat{\Phi}^\alpha = \frac{k}{\widetilde{N}^\alpha} \begin{pmatrix} \widetilde{N}_1^\alpha & -1 & -2^{-\alpha} & & & -(N-1)^{-\alpha} \\ -1 & \widetilde{N}_2^\alpha & -1 & \ddots & \ddots & \\ -2^{-\alpha} & -1 & \widetilde{N}_3^\alpha & \ddots & \ddots & -3^{-\alpha} \\ -3^{-\alpha} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & -2^{-\alpha} \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & -1 \\ -(N-1)^{-\alpha} & -3^{-\alpha} & -2^{-\alpha} & -1 & & \widetilde{N}_N^\alpha \end{pmatrix}, \quad (2-10)$$

é a matriz de força.

As correlações do ruído

$$\langle \eta(\omega) \eta(\omega') \rangle = 2\pi T I(\omega) \delta(\omega + \omega') \quad (2-11)$$

e o kernel de dissipação

$$\Sigma^+ = a(\omega) - ib(\omega) \quad (2-12)$$

devem satisfazer a expressão do teorema de flutuação-dissipação

$$I(\omega) = 2b(\omega)/\omega, \quad (2-13)$$

para cada reservatório na temperatura correspondente.

Agora se consideramos que o espectro do ruído é branco temos que $b(\omega) = \Gamma(\omega)$, chamado banho ohmico.

2.1.2

Fluxo de calor

Com esta estrutura de equações podem ser calculadas as grandezas de interesse do sistema, tais como o perfil de temperatura

$$T_i = \frac{1}{\pi} m_i \left[\gamma_L T_L \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 |G_{i1}^+(\omega)|^2 + \gamma_R T_R \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 |G_{iN}^+(\omega)|^2 \right] \quad (2-14)$$

e o fluxo no sistema

$$J = \left\langle \left[\int_{-\infty}^t dt' \Sigma_L^+ q_1(t') \eta_L(t) \right] \dot{q}_1(t) \right\rangle, \quad (2-15)$$

o qual, depois de substituir a Eq. (2-9) na (2-15), e com um pouco de álgebra, pode ser reescrito como

$$J = k_B \frac{T_L - T_R}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{T}(\omega) d\omega, \quad (2-16)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\omega) &= 4\Gamma_L(\omega)\Gamma_R(\omega)|G_{1,N}(\omega)|^2, \\ G_{1,N}(\omega) &= \frac{\widetilde{N}^\alpha}{k} [Z^{-1}]_{1,N}, \\ Z &= \frac{\widetilde{N}^\alpha}{k} [-m\omega^2 \hat{I} + \hat{\Phi}^\alpha - \hat{\Sigma}(\omega)]. \end{aligned} \quad (2-17)$$

A expressão para J , dada pela Eq. (2-16) tem a forma da equação de Landauer, onde $\mathcal{T}(\omega)$ é o coeficiente de transmissão, o qual depende das propriedades do banho, via $\Gamma(\omega)$, e do sistema, via $G_{1,N}(\omega)$.

Como dito acima, o problema para primeiros vizinhos ($\alpha \rightarrow \infty$) é conhecido na literatura [45] e um dos resultados mais importantes é que fluxo de uma cadeia harmônica é independente do tamanho do sistema e, portanto, a condutividade κ diverge no limite termodinâmico. Dentro de nossa generalização, consideraremos primeiro o caso extremo $\alpha = 0$ no qual todas as interações entre as partículas tem a mesma intensidade independentemente da posição na cadeia (campo médio).

2.1.3

Fluxo no sistema de campo médio

Para calcular o fluxo neste caso de campo médio, consideramos ruídos delta correlacionados

$$\begin{aligned}\langle \eta_{L/R}(t) \eta_{L/R}(t + \tau) \rangle &= 2\gamma_{L/R} T_{L/R} \delta(\tau), \\ \langle \eta_L(t) \eta_R(t + \tau) \rangle &= 0,\end{aligned}\tag{2-18}$$

com o qual, da Eq. (2-17), temos

$$Z = \frac{N}{k} [-m\omega^2 \hat{I} + \hat{\Phi}^{\alpha=0} - \hat{\Sigma}(\omega)]\tag{2-19}$$

onde $\hat{I}$ é a matriz identidade,

$$\hat{\Phi}^{\alpha=0} = \frac{k}{N} \begin{pmatrix} N-1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ -1 & N-1 & \dots & -1 & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & -1 & \dots & N-1 & -1 \\ -1 & -1 & \dots & -1 & N-1 \end{pmatrix},\tag{2-20}$$

portanto, a matriz Z tem a seguinte forma:

$$Z = \begin{pmatrix} a - \Sigma & b & \dots & b & b \\ b & a & \dots & b & b \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ b & b & \dots & a & b \\ b & b & \dots & b & a - \Sigma \end{pmatrix}_N,\tag{2-21}$$

onde

$$a = N - 1 - \frac{N}{k}(m\omega^2), \quad b = -1.\tag{2-22}$$

Agora, pode-se representar o determinante de Z como:

$$|Z| = D_N - 2\Sigma(D_{N-1}) + \Sigma^2 D_{N-2},\tag{2-23}$$

onde,

$$|D_N| = \begin{vmatrix} a & b & \dots & b & b \\ b & a & \dots & b & b \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ b & b & \dots & a & b \\ b & b & \dots & b & a \end{vmatrix}_N \quad (2-24)$$

e cujo valor é

$$D_N = (a - b)^{N-1} [(a - b) + Nb]. \quad (2-25)$$

Logo,

$$\begin{aligned} |Z| &= (a - b)^{N-3} (a - b - \Sigma) \\ &\times \{(a - b + Nb)(a - b - \Sigma) + 2\Sigma b\} \end{aligned} \quad (2-26)$$

e o menor é

$$|M_{1,N}| = \begin{vmatrix} b & a & b & & b \\ b & b & a & & b \\ & & & \ddots & a \\ b & b & b & & b \end{vmatrix}_{N-1} = \begin{vmatrix} 0 & a - b & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a - b \\ b & b & \dots & b & b \end{vmatrix}_{N-1} \quad (2-27)$$

ou seja,

$$|M_{1,N}| = b(b - a)^{N-2}, \quad (2-28)$$

onde

$$\begin{aligned} a &= N - 1 - \frac{N}{k}(m\omega^2), \quad b = -1, \\ a - b &= N(1 - \frac{k}{m}\omega^2). \end{aligned} \quad (2-29)$$

Logo,

$$[Z^{-1}]_{1,N} = \frac{b(-1)^N(a - b)}{(a - b - \Sigma) \{(a - b + Nb)(a - b - \Sigma) + 2\Sigma b\}}. \quad (2-30)$$

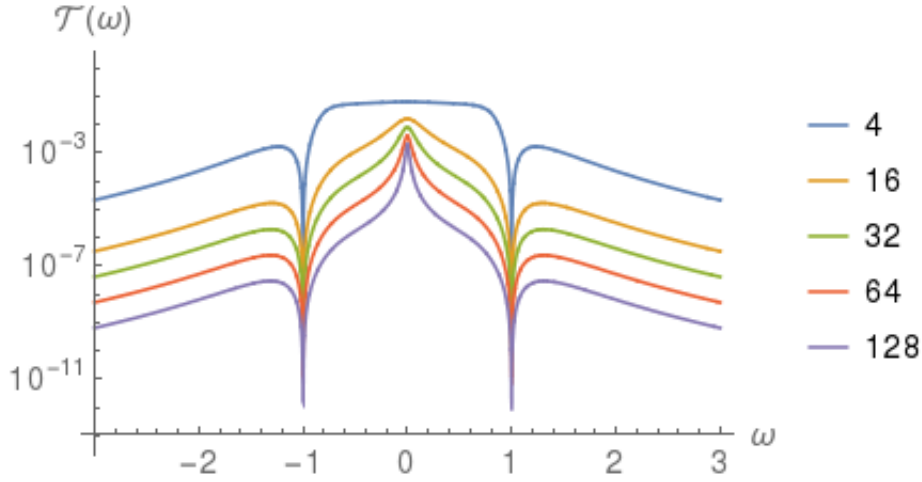


Figura 2.1: Coeficiente de transmissão para $\alpha = 0$ (campo médio) e diferentes valores de N , baseado na Eq. (2-31)

Finalmente, o coeficiente de transmissão é

$$\mathcal{T}(\omega) = 4 \left(\frac{\gamma\omega}{k/\tilde{N}^\alpha} \right)^2 \left(\frac{\tilde{N}^\alpha}{k} \right)^2 [Z^{-1}]_{1,N} [Z^{-1}]_{1,N}^*, \quad (2-31)$$

onde

$$|[Z^{-1}]_{1,N}|^2 = \frac{(a-b)^2}{[(a-b)^2 + \Gamma^2] [(a-b)^2 + Nb(a-b) + i\Gamma(a-b + b(N-2))]} \quad (2-32)$$

Na Fig. 2.1 mostramos a dependência do coeficiente de transmissão $\mathcal{T}$ com ω , para diferentes tamanhos do sistema.

Para o caso particular em que todas as constantes têm valor unitário, temos

$$\begin{aligned} J^{\alpha=0} &= \frac{k_B(T_L - T_R)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{T}^{\alpha=0}(\omega) d\omega \\ &= k_B(T_L - T_R) \frac{(N-1)}{2N[N^2 - (N-1)]}. \end{aligned} \quad (2-33)$$

Logo, no limite termodinâmico, obtemos

$$\lim_{N \rightarrow \infty} J^{\alpha=0} = k_B(T_L - T_R) N^{-2}/2. \quad (2-34)$$

2.2

Comentários finais

Podemos concluir que, no limite termodinâmico, o fluxo $J^{\alpha=0} \sim N^{-2}$ e $\kappa^{\alpha=0} \sim N^{-1}$. Isto significa que o sistema deve ter um comportamento isolante no limite termodinâmico. Entretanto, para primeiros vizinhos, sabemos que $J^{\alpha=\infty} \sim N^0$ e $\kappa^{\alpha=\infty} \sim N^1$. Com o qual concluímos que o alcance das interações muda o comportamento da condutividade (ver Fig. 2.2).

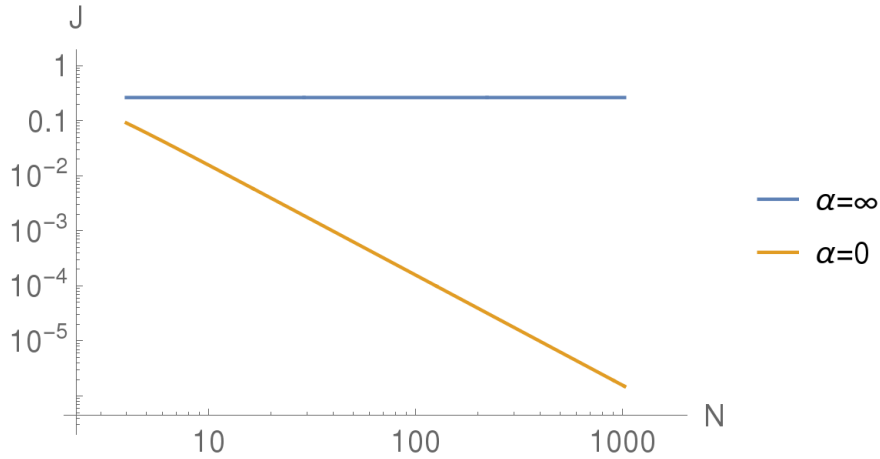


Figura 2.2: Fluxo de calor para $\alpha \rightarrow \infty$ (primeiros vizinhos) e $\alpha = 0$ (campo médio) e diferentes valores de N .

Logo, surge a pergunta de se existe algum valor intermediário de α para o qual a condutividade é independente do tamanho do sistema. Nesse caso valeria a lei de Fourier num sistema no qual não se tem desordem nem acoplamento entre os fônons.

Para ter uma ideia do que acontece, na Fig. 2.3, mostramos o coeficiente de transmissão versus ω , para diferentes valores de α e diferentes tamanhos do sistema N .

Para α grande ($\alpha = 20$), observamos que apesar de que a frequência das oscilações aumenta, as envolturas (e portanto a integral que fornece o fluxo) não mudam com o tamanho, consistentemente com o resultado de primeiros vizinhos. No limite oposto ($\alpha = 0$), vemos que tanto a altura como a largura do perfil diminuem com tamanho (portanto também a integral), de acordo com o comportamento isolante de campo médio. Nos casos intermediários é observado um comportamento misto, cujo estudo deve ainda ser aprofundado.

No próximo capítulo, estudaremos o comportamento de um sistema unidimensional, porém não linear (cadeia de rotores), e com alcance variável

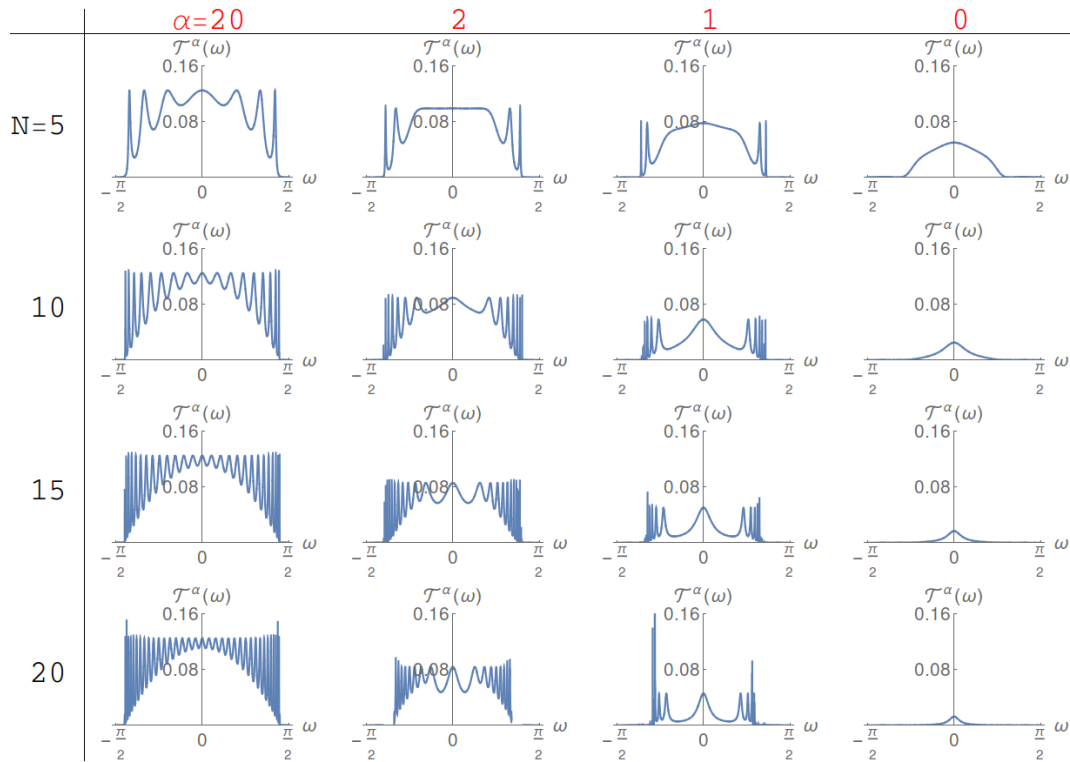


Figura 2.3: Coeficiente de transmissão versus ω , para diferentes valores de α e N .

das interações. Veremos a validade da lei de Fourier como função do alcance das interações e da temperatura.

3

Transporte de calor em sistemas de rotores com alcance variável

Neste capítulo descrevemos os efeitos do alcance das interações, usando um modelo de rotores conhecido na literatura como α -XY [67, 68]. Este modelo permite variar o alcance das interações, indo do caso de primeiros vizinhos até o caso de acoplamento global, ou alcance infinito. O interesse neste modelo, surge porque, no caso de primeiros vizinhos, o modelo satisfaz a lei de Fourier em uma dimensão, a altas temperaturas (Sec. 1.3). Além disso, no caso de alcance máximo, este modelo é paradigmático para os estudo das propriedades termodinâmicas de sistemas de longo alcance, sendo conhecido na literatura como o Hamiltoniano de campo médio (Sec. 1.4).

3.1

Modelo e métodos

Segundo descrito, na seção 1.4.3, o modelo α -XY consiste de uma cadeia de rotores clássicos, localizados nos sítios $i = 1, \dots, N$ de uma rede unidimensional, cuja dinâmica é governada pelo Hamiltoniano

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^\alpha &= \sum_{i=1}^N \frac{I_i \omega_i^2}{2} + \frac{\epsilon}{2} \frac{1}{\widetilde{N}^\alpha} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \left[\frac{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)}{r_{i,j}^\alpha} \right] \\ &\equiv \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i^\alpha \equiv \sum_{i=1}^N [\mathcal{T}_i + \mathcal{U}_i^\alpha],\end{aligned}\tag{3-1}$$

onde ω_i é o velocidade angular, I_i a inercia rotacional, θ_i a posição angular do rotor clássico, $\mathcal{T}_i$ a energia cinética e potencial $\mathcal{U}_i$ por partícula, e onde definimos

$$\widetilde{N}^\alpha = \frac{1}{N} \sum_i^N \widetilde{N}_i^\alpha, \quad \widetilde{N}_i^\alpha = \sum_{j \neq i}^N r_{i,j}^{-\alpha}, \quad r_{i,j} = |i - j|,\tag{3-2}$$

para cumprir com a prescrição de Kac [72] (ver Fig. 1.4), que garante energias extensivas no limite termodinâmico (TL), quando $\alpha \leq 1$, e tem uma forma adequada às nossas condições de contorno livres. No caso $\alpha = 0$, obtemos *alcance infinito*, ou campo médio (m-f) e no limite $\alpha \rightarrow \infty$ recuperamos o caso de *primeiros vizinhos* (n-n).

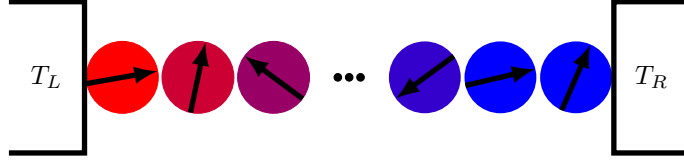


Figura 3.1: Esquema visual do sistema α -XY acoplados a banhos térmicos T_L e T_R .

Nos extremos da cadeia aplicamos banhos térmicos, de curto alcance, com temperaturas T_L, T_R , onde $T_L > T_R$ (ver Fig. 3.1).

Para modelar cada reservatório, usamos banhos térmicos de Langevin. E portanto as equações de movimento são

$$\begin{aligned}\dot{\theta}_k &= \omega_k, & \text{para } k = 1, 2, \dots, N, \\ I_k \dot{\omega}_k &= F_k^\alpha, & \text{para } k = 2, 3, \dots, N-1, \\ I_1 \dot{\omega}_1 &= F_1^\alpha - \gamma_L \omega_1 + \eta_L, \\ I_N \dot{\omega}_N &= F_N^\alpha - \gamma_R \omega_N + \eta_R,\end{aligned}\tag{3-3}$$

onde

$$F_l^\alpha = -\frac{\partial \mathcal{H}^\alpha}{\partial \theta_l} = \sum_{k \neq l}^N f_{l,k}^\alpha, \quad f_{l,k}^\alpha = \frac{\epsilon}{\widetilde{N}^\alpha} \frac{\sin(\theta_k - \theta_l)}{r_{k,l}^\alpha},\tag{3-4}$$

$\gamma_{L/R}$ são os coeficientes de amortecimento e $\eta_{L/R}$ os ruídos brancos com correlações

$$\begin{aligned}\langle \eta_{L/R}(t) \eta_{L/R}(t + \tau) \rangle &= 2\gamma_{L/R} T_{L/R} \delta(\tau), \\ \langle \eta_L(t) \eta_R(t + \tau) \rangle &= 0,\end{aligned}\tag{3-5}$$

para satisfazer a relação de flutuação-dissipação.

Usando a equação de continuidade da energia para cada partícula, $\frac{d}{dt} \mathcal{H}_i^\alpha = \sum_{k \neq i}^N J_{i,k}^\alpha$, podemos definir o fluxo, considerando que é estacionário localmente. Assim, a transferência de energia para a partícula l devida à partícula k é

$$J_{l,k}^\alpha = \frac{1}{2} f_{l,k}^\alpha (\omega_k + \omega_l).\tag{3-6}$$

Então, definimos o fluxo desde as partículas da esquerda (direita) para a partícula l como

$$\mathcal{J}_l^{L,\alpha} \equiv \left\langle \sum_{k<l}^N J_{l,k}^\alpha \right\rangle, \quad \mathcal{J}_l^{R,\alpha} \equiv \left\langle \sum_{k>l}^N J_{l,k}^\alpha \right\rangle. \quad (3-7)$$

No estado estacionário $\mathcal{J}_l^{L,\alpha} = -\mathcal{J}_l^{R,\alpha}$, para todo l . Além disso, a “temperatura” em cada partícula é definida como $T_i = \langle I_i \omega_i^2 \rangle$. Isto permite obter um perfil de temperatura ao longo do sistema.

3.2 Resultados

As equações de movimento (3-3) foram integradas por meio de um protocolo de dinâmica Browniana [87, 88] que se reduz a um algoritmo de Verlet na ausência de interações com os reservatórios de calor, como no caso das partículas que não estão diretamente acopladas aos reservatórios (partículas do *bulk*).

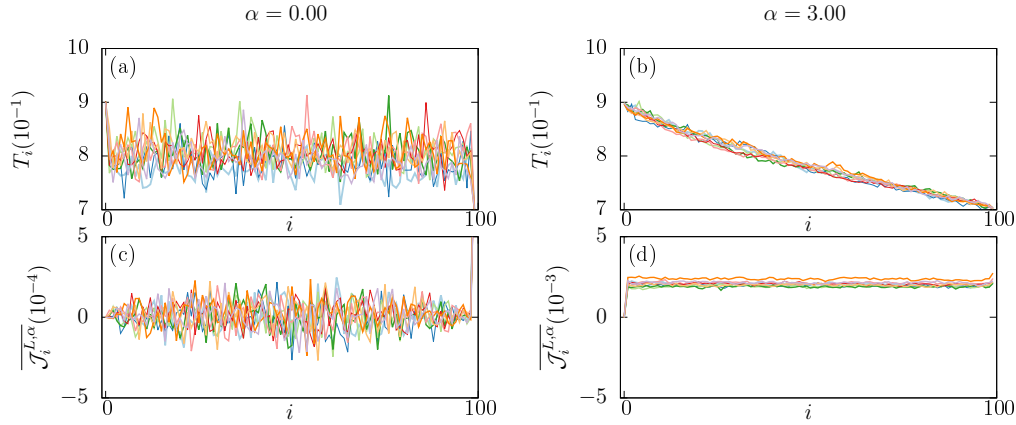


Figura 3.2: Perfis de temperatura (a)-(b) e de fluxo (c)-(d) para diferentes realizações. Para $\alpha = 0.00$ (painéis da esquerda) e $\alpha = 3.00$ (painéis da direita). Em ambos os casos $T_L = 0.90$, $T_R = 0.70$ para $N = 100$.

O passo de tempo dt fixado para a integração numérica foi selecionado de modo a manter constante a energia do sistema isolado, dentro de um erro relativo $\Delta E/E$ da ordem 10^{-4} .

Como condição inicial ($t = 0$), todos os ângulos e velocidades foram sorteados usando distribuições de probabilidades centradas em torno de zero, dentro de intervalos adequados para produzir a temperatura de equilíbrio $T \equiv (T_L + T_R)/2$, para o sistema isolado, antes de “ligar” os reservatórios.

Os banhos térmicos foram ligados e, depois de um tempo transiente, as quantidades de interesse foram calculadas, fazendo a média sobre pelo menos 30 condições iniciais diferentes e sobre um intervalo de tempo $t = 10^6$.

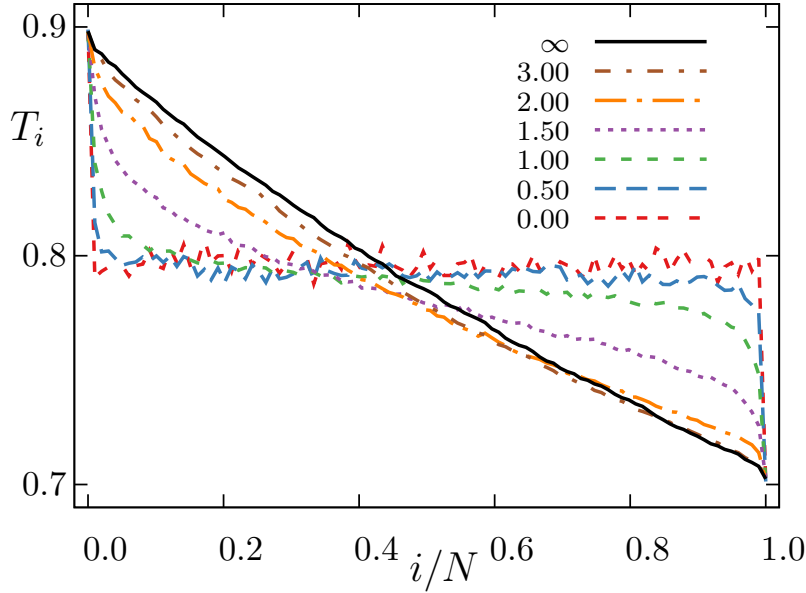


Figura 3.3: Perfis de temperatura para diferentes valores de α . Para cada valor de α , foram computadas 50 realizações. $T \equiv (T_L + T_R)/2 = 0.8$, $\Delta T \equiv T_L - T_R = 0.2$, e $N = 100$.

Sem perda de generalidade, nas simulações numéricas reportadas aqui, fixamos os seguintes valores dos parâmetros do Hamiltoniano: $\epsilon = 2$, $I_i = 1$ para todo i , e $\gamma_L = \gamma_R = 1.0$. Na Fig. 3.2 mostramos perfis típicos de temperatura e fluxo, de realizações individuais, no estado estacionário, para dois valores diferentes do alcance das interações.

3.2.1 Perfis de temperatura

Na Fig. 3.3 mostramos os perfis de temperatura típicos de diferentes valores de α , sendo $T = 0.8$ e $\Delta T = 0.2$. Estes perfis não mudam substancialmente para valores de N maiores, como é mostrado na Fig. 3.4. Observamos que, na região do *bulk*, os perfis são quase lineares. O valor absoluto da inclinação é muito próximo do valor máximo ΔT para interações n-n ($\alpha \rightarrow \infty$), mas as curvas tornam-se menos íngremes quando α diminui.

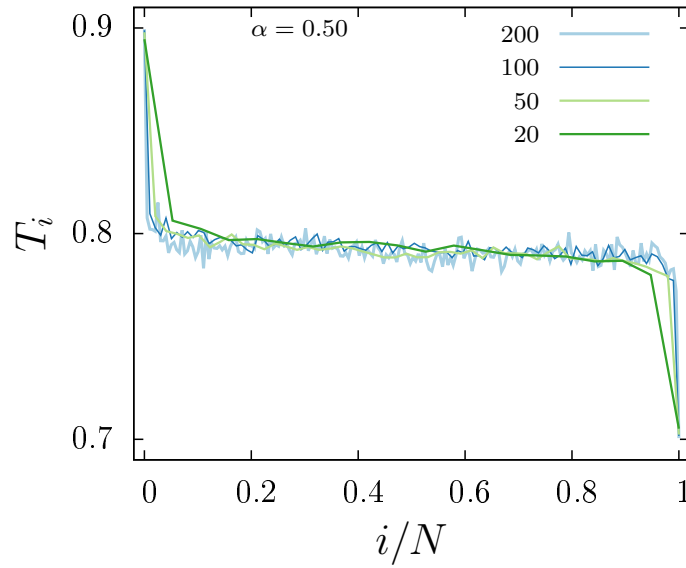


Figura 3.4: Perfis de temperatura para $\alpha = 0.50$, e diferentes tamanhos N do sistema.

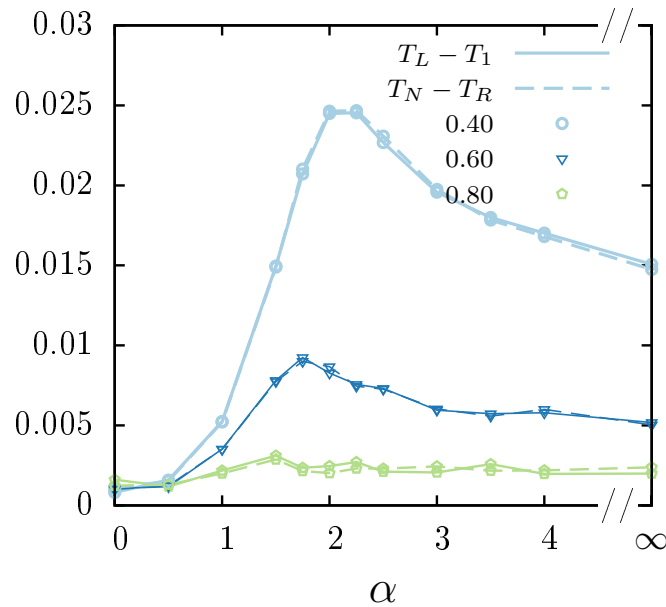


Figura 3.5: Diferença de temperatura entre cada reservatório e as partícula acoplada a ele, em função de α , para diferentes valores da temperatura média T , e $N = 100$.

Para interações suficientemente longas, ou seja, para α menor que um certo valor crítico, $\alpha < \alpha_c \simeq 1$, o perfil vira um platô, e é mais ruidoso. Mostramos ainda na Fig. 3.5 as diferenças de temperatura entre cada reser-

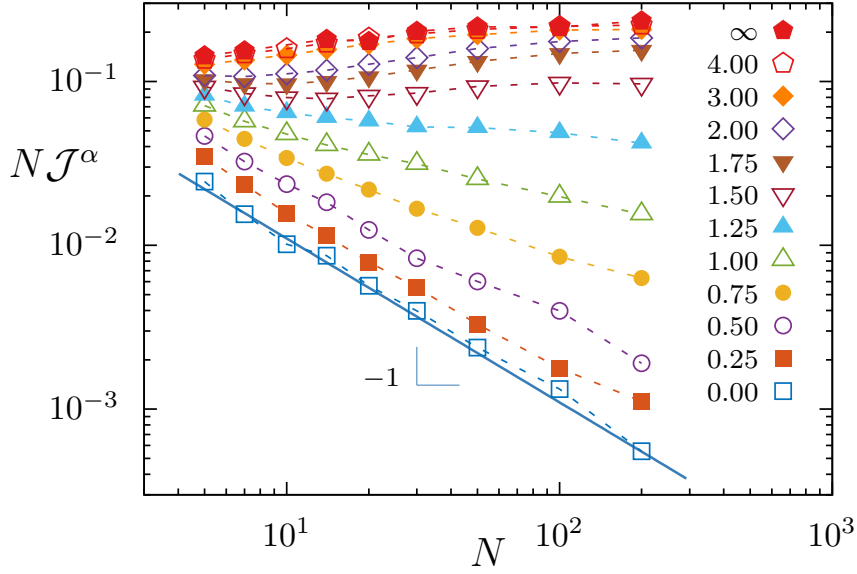


Figura 3.6: Fluxo escalado $N \mathcal{J}^\alpha$ vs N , para diferentes valores de α indicados na figura. As linhas tracejadas são guias para os olhos. O erro padrão relativo associado a cada símbolo é de 100 %, 10 % e 1 % para $\alpha \in (0,1)$, $(1,2)$ e $(2,\infty)$, respectivamente. A linha contínua, com inclinação -1, foi desenhada para comparação. $T \equiv (T_L + T_R)/2 = 0.8$ e $\Delta T \equiv T_L - T_R = 0.2$.

vatório e a partícula acoplada. Isto mostra que o alcance das interações modifica a resistência de borda [31].

3.2.2 Fluxo de calor

O fluxo estacionário $\mathcal{J}^\alpha$ através da cadeia foi calculado mediante a Eq. (3-7), sobre as partículas do *bulk*, $\mathcal{J}^\alpha \equiv \langle \mathcal{J}_l^\alpha \rangle_{bulk}$. O fluxo escalado $N \mathcal{J}^\alpha$, para α fixo, é representado como função do tamanho N , na Fig. 3.6, para os mesmos valores de temperaturas considerados na Fig. 3.3. Para α maior que α_c , o fluxo escalado cresce com N alcançando um valor finito, como no caso extremo de n-n [59, 60, 63]. Diferentemente, para qualquer valor de α menor que α_c , o fluxo escalado decai monotonicamente com N . Portanto, para interações de curto e longo alcance, $N \mathcal{J}^\alpha$ vs N apresenta diferentes tipos de comportamento. No caso $\alpha = 0$, o fluxo escalado apresenta um decaimento com $1/N$, indicando que o fluxo se anula no limite termodinâmico. Esta lei de decaimento coincide com a que observamos no caso de osciladores harmônicos acoplados globalmente, segundo vimos no Cap. 2.

Aparentemente, o decaimento do fluxo para zero acontece para qualquer

$\alpha < \alpha_c$. Notamos que os perfis de temperatura para valores pequenos de α tem uma forma semelhante à dos observados para cadeias de massas iguais com interações harmônicas de primeiros vizinhos (n-n). Diferentemente, do caso harmônico, o fluxo é não nulo e é independente do tamanho do sistema [44].

Analise agora o caso m-f ($\alpha = 0$). No limite termodinâmico, espera-se uma corrente nula ao longo da cadeia porque, por um lado, cada rotor interage com cada outro rotor com a mesma intensidade, por outro, a contribuição dos rotores finais (únicos responsáveis de quebrar a simetria m-f) torna-se insignificante em comparação com a interação com o *bulk*. Portanto, a estrutura da rede onde os rotores estão localizados é supérflua e não há uma direção preferencial para o fluxo. De outro ponto de vista, é como se os dois reservatórios fossem colocados em qualquer lugar. Mesmo que a corrente através da cadeia decaia no limite termodinâmico, há um fluxo de energia do reservatório quente para o frio. De fato, os rotores dos extremos da cadeia estão diretamente acoplados aos reservatórios de calor e, como consequência, há uma corrente do banho quente para o primeiro rotor, que é a mesma corrente do último rotor para o reservatório frio. Esta corrente é dividida em vários canais: um é o curto circuito dado pelo acoplamento de longo alcance entre as duas partículas das extremidades e os outros caminhos passam por cada rotor i , isto é, passando da primeira partícula (acoplada ao banho quente) através da partícula i do *bulk* para a última partícula (acoplada ao banho frio). Mas, notavelmente, uma corrente líquida não passa “através” da cadeia, então $N\mathcal{J}^\alpha = 0$.

Para um sistema finito, mesmo se os rotores do *bulk* continuam interagindo globalmente, existe uma pequena corrente, porque nesse caso o efeito sobre cada rotor do *bulk* devido aos rotores dos extremos não é desprezível. Consistentemente com esta visão, a corrente $N\mathcal{J}^\alpha$ decai com N . Este cenário, que é claro para o caso m-f ($\alpha = 0$), aparentemente também emerge para qualquer α menor que α_c . Porém, deixa de ser válida para interações de curto alcance.

3.2.3 Condutividade térmica

Uma vez que é calculado o fluxo do *bulk* devido à diferença de temperatura aplicada no extremos, podemos estimar a condutividade térmica κ através de

$$\mathcal{J} \simeq \kappa \Delta T / N, \quad (3-8)$$

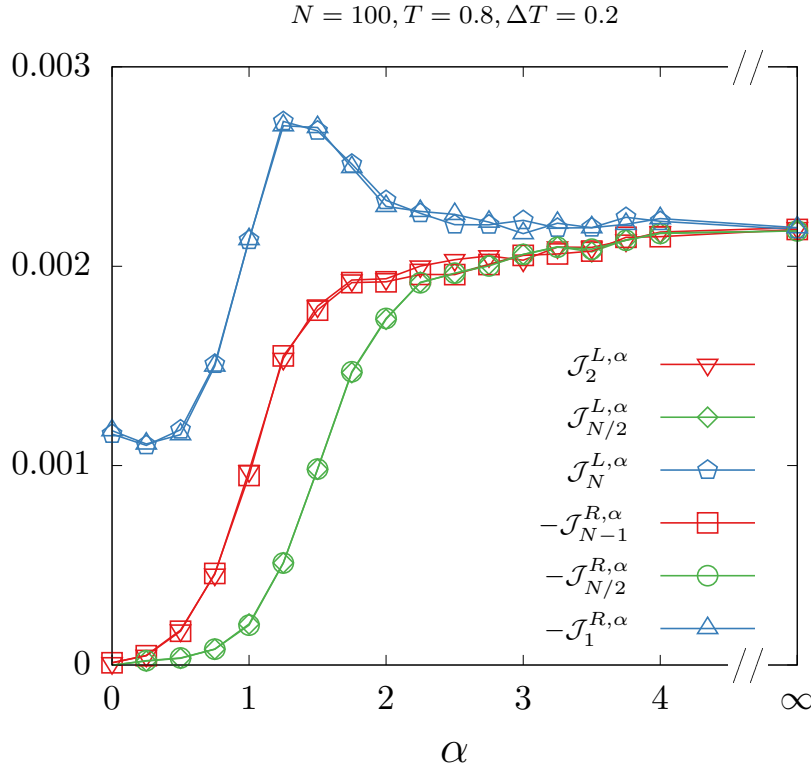


Figura 3.7: Fluxo de energia por partícula, em função de α , para as posições indicadas na figura, de uma cadeia com $N = 100$, $T = 0.8$ e $\Delta T = 0.2$

válida para pequenas diferenças de temperatura aplicadas entre as extremidades, ΔT . Portanto, as curvas da Fig. 3.6 para $N\mathcal{J}^\alpha$ vs N (que foram calculadas para T_L e T_R fixos), refletem diretamente o comportamento da condutividade térmica κ com N e com α .

Podemos observar na Fig. 3.6 que, para um tamanho fixo N , o fluxo escalado (κ) aumenta continuamente com α . Portanto, as interações de curto alcance favorecem o transporte térmico. Acima do $\alpha \simeq 3$, κ praticamente atinge o nível da dinâmica n-n para todo N .

Para α fixo, percebemos que, quando o alcance é suficientemente curto ($\alpha > \alpha_c$), κ tende a um valor finito no limite de tamanho grande, indicando a validade da lei de Fourier.

Em contraste, abaixo de α_c , κ diminui com N , aparentemente seguindo um decaimento de lei de potência $N^{-\beta}$, onde $\beta \simeq 1$ para $\alpha = 0$ e o expoente β diminui com α , tornando-se nulo acima de α_c . Isso sugere que κ se torna nulo no limite termodinâmico para sistemas com $\alpha < \alpha_c$. No entanto, tamanhos

muito maiores, que são computacionalmente inviáveis, seriam necessários para determinar a lei precisa do decaimento.

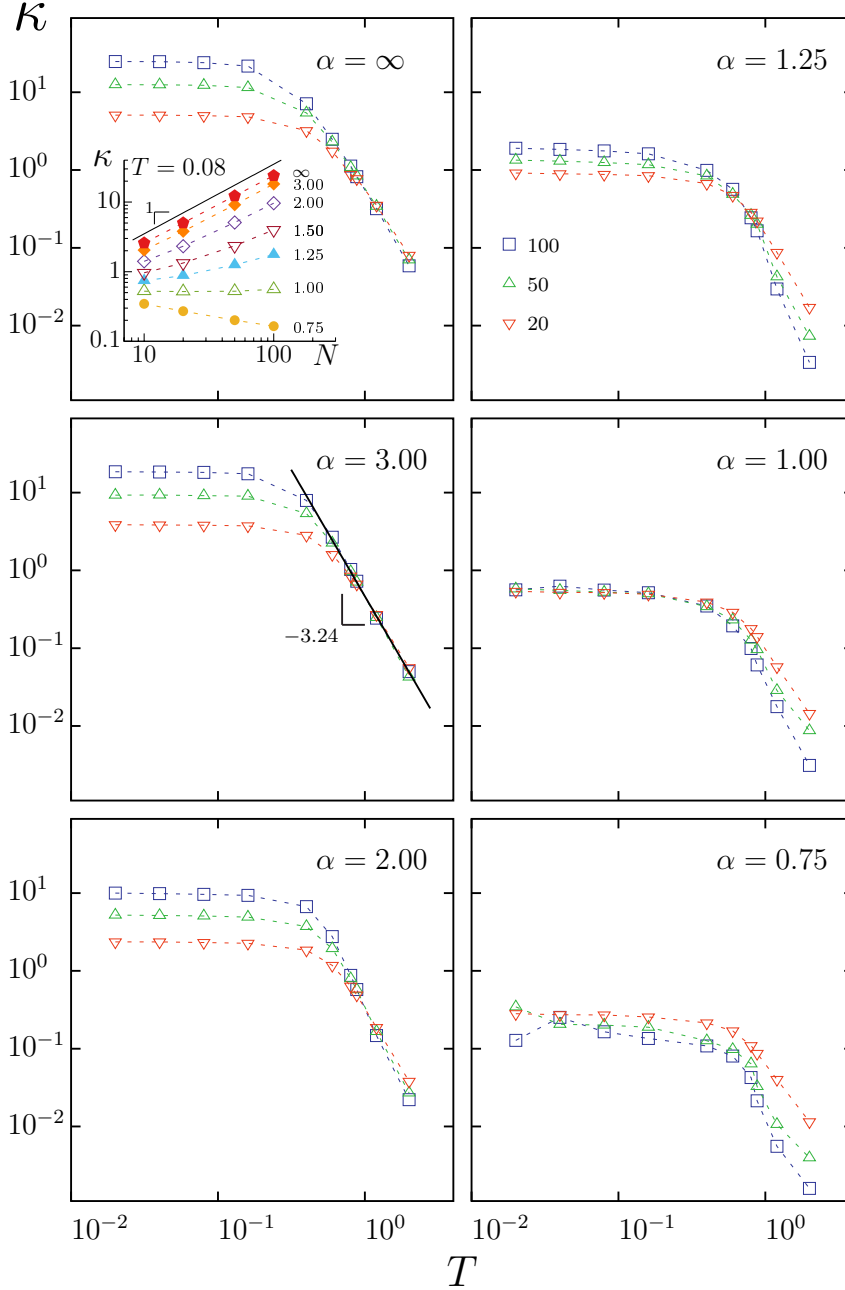


Figura 3.8: Condutividade κ vs temperatura T , para diferentes tamanhos do sistema e α fixo, indicados nos painéis. No caso $\alpha = 3$, mostramos um ajuste de lei de potência para as curvas de $\kappa(T)$ no intervalo de alta temperatura. No gráfico inserido, mostramos a dependência de κ com N a baixas temperaturas ($T = 0.08$), para diferentes valores de α . Em todos os casos, $\Delta T/T = 0.25$. As linhas pontilhadas são guias para os olhos.

Também investigamos a dependência de κ com a temperatura média T , como mostrado na Fig. 3.8. Primeiro vamos analisar a dependência de κ com T para tamanho fixo N . Para qualquer α , observamos que, a condutividade térmica não depende de T a baixas temperaturas, mas há um *crossover* para um regime de alta temperatura onde α decai com T . No limite de temperatura suficientemente baixa, as partículas sentem o fundo do poço de potencial, quase harmônico, atingindo assim o limite de osciladores harmônicos. A temperaturas muito altas, espera-se um decaimento com T , porque a energia cinética torna-se muito maior que a potencial (que é limitada para o Hamiltoniano α -XY). Portanto, os rotores tendem a comportar-se como partículas independentes e, concomitantemente, qualquer processo de transporte tende a ser dificultado.

Em seguida, discutimos o impacto de α na dependência de κ com N . Observemos os três painéis do lado esquerdo da Fig. 3.8. O cenário para qualquer $\alpha \geq 2$ é o mesmo observado para as interações n-n ($\alpha \rightarrow \infty$). A baixa temperatura, κ aumenta com N (veja também o gráfico inserido, para $T = 0.08$). O decaimento para altas temperaturas parece seguir uma lei de potência, com o mesmo expoente observado para interações n-n (cerca de -3.2 [63]), como ilustrado para $\alpha = 3$ na Fig. 3.8. Além disso, para T alto, as curvas para diferentes tamanhos tendem a coincidir, consistentemente com nossa observação anterior sobre a existência de um valor limite de κ para N grande, quando discutimos a Fig. 3.6 que foi construída para $T = 0.8$.

Quando as interações são de curto alcance ($\alpha > 1$), o nível da região plana de $\kappa(T)$, observado para baixas temperaturas abaixo do *crossover*, cresce linearmente com N (veja o gráfico inserido no painel superior esquerdo), como esperado para uma cadeia de osciladores harmônicos. No entanto, note que, concomitantemente com esse aumento do platô com N , a temperatura do *crossover* diminui com N , sugerindo que as curvas $\kappa(T)$ para valores diferentes de N tendem a colapsar em uma mesma curva quando N aumenta (o que ocorre progressivamente a baixa temperatura e alta condutividade).

Se esse fosse o caso, o crescimento de κ com N persistiria apenas a temperatura T nula, mas, para T finita, a condutividade cresce sublinearmente com N estabilizando em um valor finito no limite termodinâmico. Então, a lei de Fourier seria válida. Esta possibilidade está de acordo com reivindicações anteriores [61, 89, 63] e contra a divergência da condutividade no limite termodinâmico [60, 62, 90], para interações n-n, mas tamanhos muito maiores seriam necessários para confirmar o resultado para qualquer $\alpha > 1$.

No valor particular $\alpha = 1$, observamos que a região constante do perfil de condutividade coincide para diferentes valores de N (κ constante no gráfico inserido), enquanto para $\alpha < 1$ (ilustrado pelo caso $\alpha = 0.75$), a condutividade

decai com o tamanho do sistema. Isso indica que $\alpha = 1$ é um caso marginal a baixas temperaturas. A temperaturas muito baixas, uma partícula sente um potencial harmônico, independentemente do valor de α . No entanto, no caso de interações de longo alcance, a aproximação harmônica não vem unicamente de interações n-n. Então, o nível do platô não aumenta com N , mas diferentemente do comportamento da cadeia harmônica de n-n, κ diminui com N , tornando-se presumivelmente nulo no limite termodinâmico.

Agora, consideremos os painéis da direita na Fig. 3.8 (isto é, $\alpha < 2$), e também o gráfico inserido. Para temperaturas acima do *crossover*, aparece uma característica distintiva em comparação com os painéis do lado esquerdo: a condutividade decai com N , sugerindo valores nulos no limite termodinâmico (como na Fig. 3.6).

Portanto, para interações de longo alcance ($\alpha < 1$), κ decai com N para qualquer T , de acordo com a nossa discussão sobre o caso m-f em que a condutividade se anula no limite $N \rightarrow \infty$ a qualquer temperatura finita.

3.2.4

Diagrama de comportamentos da condutividade versus alfa e T

Os diversos comportamentos de κ com N observados, para diferentes valores de T e α , são resumidos no diagrama da Fig. 3.9. Indicamos se, para a faixa estudada de N , κ vs N atinge um valor finito (F) ou não, e neste último caso se o comportamento é decrescente (D) ou crescente (I) com N . Seriam necessários tamanhos muito maiores para determinar o limite termodinâmico. Isto é dificultado pelo custo computacional, levando em conta que o algoritmo de integração é de ordem N^2 , e os tempos de estabilização também aumentam com N . Além disso, podem ocorrer desvios do diagrama mostrado na Fig. 3.9 para uma relação diferente $\Delta T/T$, portanto, essa dependência também deve ser investigada, mas novamente isso é limitado pela capacidade computacional.

Embora se esperasse a priori um valor crítico em $\alpha = d = 1$ (onde $d = 1$ é a dimensionalidade da rede), a curva $\alpha_c(T)$ que emerge das simulações vai de $\alpha_c \simeq 1$ a baixas temperaturas para $\alpha_c \simeq 2$ a altas temperaturas. Também, neste caso, não podemos descartar uma distorção devido a tamanhos finitos. Mas, coincidentemente, a mudança de regime ocorre perto da temperatura crítica ($T^* = 1 = \epsilon/2$) em que o sistema isolado em equilíbrio sofre uma transição ferro/paramagnética quando $\alpha \leq 1$. (Uma transição também existe para $1 < \alpha < 2$, embora a menor T^*) [68].

3.3

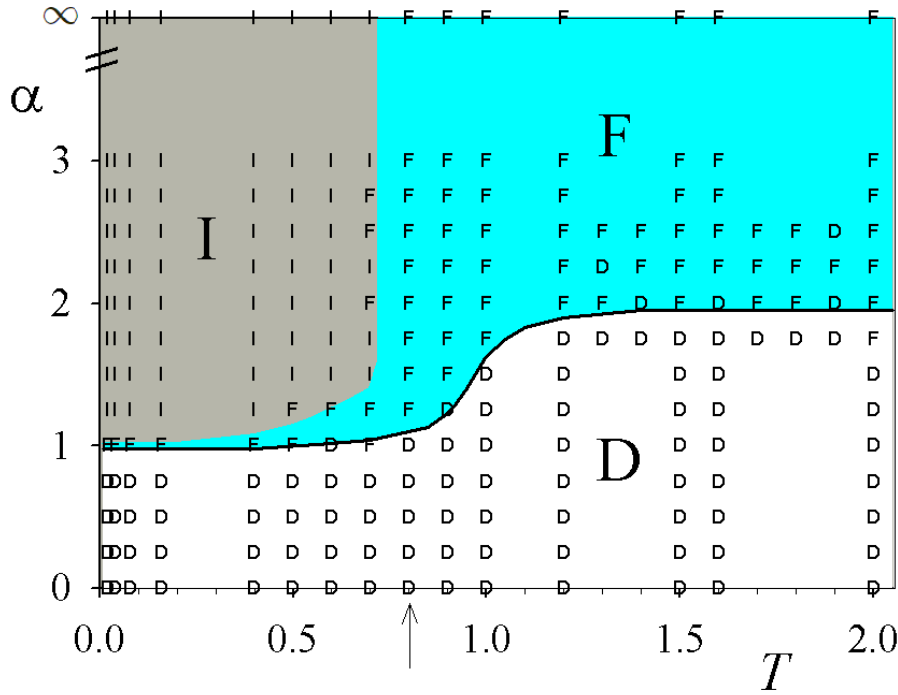


Figura 3.9: Diagrama no plano $T - \alpha$ dos diferentes regimes térmicos da condutividade κ : a condutividade atinge um valor finito (F), é decrescente (D) ou crescente (I) com N , para os tamanhos N investigados. Das curvas de $\kappa \sim N\mathcal{J}$ vs N , como na Fig. 3.6, obtivemos a classificação indicada pelos caracteres para cada par (T, α) , com $\Delta T/T = 0.25$. A seta destaca os resultados para $T = 0.8$, de acordo com o mostrado na Fig. 3.6. A linha sólida preta representa o valor crítico $\alpha_c(T)$.

Comentários finais

Em resumo, mostramos o retrato da condução de calor em um sistema unidimensional, como uma função do alcance das interações e da temperatura. Os diferentes domínios são esboçados no diagrama da Fig. 3.9. Concluimos que, quanto mais longo o alcance das interações mais a condução térmica é dificultada. Um resultado interessante é o surgimento de comportamento isolante para $\alpha < \alpha_c$ (região branca, denotada por ‘D’).

Para $\alpha > \alpha_c$, o comportamento térmico é análogo ao encontrado para as interações de primeiros vizinhos (n-n). Ou seja, para altas temperaturas, a condutividade térmica estabiliza em um valor finito (‘F’) no limite termodinâmico, decaindo com T como lei de potência. Para temperaturas baixas, a condutividade aumenta com N (‘I’). Para valores intermediários da temper-

atura, embora, para os tamanhos estudados, não observamos a estabilização de κ em um valor finito, surge um retrato semelhante ao observado para interações n - n , indicando a validade da lei de Fourier.

Diferentemente, quando a interação é de alcance suficientemente longo, o fluxo escalado $N\mathcal{J}^\alpha$ decai com N para qualquer T ('D'), aparentemente se anulando no limite termodinâmico. Então, o *bulk* do sistema apresenta um perfil de temperatura achatado e se comporta com um isolante, no sentido de que o fluxo através da cadeia é extremamente pequeno.

Finalmente, como futura extensão deste trabalho, seria interessante estender este estudo feito para uma dimensão, para dimensões arbitrárias, tanto d da rede, quanto n do movimento dos rotores.

4

Relaxação ao equilíbrio

Neste capítulo estudaremos como é o transporte de energia em sistemas isolados fora do equilíbrio. Analisaremos a conexão com os sistemas tipicamente estudados para a condução de calor onde são aplicados reservatórios térmicos. A relaxação ao equilíbrio de sistemas isolados pode dar informações importantes para entender propriedades dinâmicas e de não equilíbrio, como a difusão de calor [2, 28]. Para estudar a resposta a perturbações fora do equilíbrio, utilizamos outra configuração típica, que consiste em preparar o sistema com uma distribuição de temperatura não uniforme [6], monitorando sua evolução ao equilíbrio termodinâmico. Entender a conexão entre a propagação e condução da energia térmica, pode ser importante tanto do ponto de vista fundamental [53, 91] como do aplicado [92, 93]. Portanto, tentaremos conectar os resultados de ambos os tipos de enfoques.

Em particular, quando a lei de Fourier é satisfeita em sistemas unidimensionais de tamanho N , o transporte térmico pode ser descrito por uma equação de difusão normal

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x, t) = \frac{\kappa}{c} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x, t), \quad (4-1)$$

onde T é a temperatura na posição x e no tempo t , κ é a condutividade térmica, e c o calor específico. Sua solução em expansão de série de Fourier tem a forma [93]

$$T(x, t) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (A_n \cos(q_n x) + B_n \sin(q_n x)) e^{-t/\tau_n}, \quad (4-2)$$

com $q_n = 2\pi n/N$ e $\tau_n = cN^2/(4\pi^2 \kappa n^2)$. Então, os tempos de relaxação, particularmente o primeiro, escala como

$$\tau_1 \sim N^2/\kappa. \quad (4-3)$$

Mas, como essa relação muda quando a lei de Fourier não se aplica? Para investigar este problema, iremos realizar experimentos computacionais para diferentes modelos hamiltonianos em redes unidimensionais. Vamos considerar

um anel de rotores que satisfazem a lei de Fourier [17, 59, 60, 62, 94, 95], assim como também outros modelos onde não vale, como os osciladores lineares e não lineares, e rotores com acoplamentos globais [95].

4.1

Modelos e métodos

Consideramos modelos unidimensionais que podem ser unificados mediante o Hamiltoniano clássico da forma

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \mathcal{U}(q_1, \dots, q_N). \quad (4-4)$$

que geram as equações de movimento

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= p_i, & \text{for } 1 \leq i \leq N, \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial q_i}, \end{aligned} \quad (4-5)$$

As condições de contorno são periódicas, ou seja, o índice i é cíclico.

Nesta classe, analisaremos rotores XY com acoplamentos ferromagnéticos (de curto ou longo alcance), molas lineares (harmônicas) e não lineares do tipo Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT).

Os rotores clássicos XY têm uma energia potencial total definida por

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathcal{V}(q_i - q_{i+1}), \quad (4-6)$$

onde

$$\mathcal{V}(x) = 1 - \cos x. \quad (4-7)$$

Esta é a versão de primeiros vizinhos do um modelo geral $\alpha - XY$ [67, 68] que permite controlar o alcance das interações. No extremo oposto de alcance infinito (ou campo médio), também conhecido na literatura como HMF [83], a energia potencial assume a forma

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \mathcal{V}(q_i - q_j), \quad (4-8)$$

onde $\mathcal{V}$ é dado pela Eq. (4-7) e o prefator $1/N$ garante a extensividade.

Também investigaremos os seguintes sistemas simples de curto alcance,

onde a energia de interação na Eq. (4-6) é dada por

$$\mathcal{V}(x) = \begin{cases} \frac{x^2}{2} & (\text{HC}), \\ \frac{x^2}{2} + \beta \frac{x^4}{4} & (\text{FPUT-}\beta), \end{cases} \quad (4-9)$$

correspondentes a cadeias de molas harmônicas (HC) e anarmônicas tipo Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT- β , com $\beta = 1/6$) [49, 50, 96, 97].

Em todos os casos, as condições de contorno são periódicas, em um anel de comprimento N .

A integração numérica das equações de movimento (4-5) foi realizada mediante um algoritmo simplético de quarta ordem (apêndice B.4) [98]. Inicialmente, fazemos $q_i = 0$ para todos i com a finalidade de que a energia seja puramente cinética ($E = K$), e os p_i dados por uma distribuição uniforme entre $[-1, 1]$ e reescalado para ter a energia E . Logo, as velocidades foram deslocadas, para fazer o momento total zero, e escaladas para obter a energia total desejada $E = K = NT/2$, onde $T = \langle p^2 \rangle = \sum_i^N p_i^2 / N$ é a temperatura, de acordo com sua definição cinética.

Para cada realização, esperamos até que o sistema isolado tenha atingido o estado de equilíbrio, identificado pela partição teórica entre energia potencial e cinética, bem como pela distribuição de velocidades Maxwelliana. Uma vez no equilíbrio, no instante que definimos como $t = 0$, sem afetar as coordenadas q_i e mantendo a energia total do sistema inalterada, aplicamos um protocolo de partição da energia cinética. Este protocolo consiste em selecionar dois subsistemas S_h (quente) e S_c (frio), no nosso caso compostos pelas partículas $i = 1, 2, \dots, N/2$ e $N/2 + 1, \dots, N$, respectivamente. As velocidades de S_c são zeradas, enquanto as velocidades de S_h são escaladas por um fator $\sqrt{2}$, para compensar exatamente a perda cinética de S_c , após uma correção para garantir momento total nulo. Logo, monitoramos as energias de relaxação de cada subsistema, mantendo todo o sistema isolado na energia total E . Em todos os casos, medimos médias de mais de $2^{18}/N$ realizações. Os tempos de equilíbrio característicos foram calculados para diferentes tamanhos N e energias por partícula $u = E/N$. Os resultados serão mostrados na seção 4.2.

Uma perturbação localizada, onde apenas a energia cinética das duas partículas centrais é alterada foi também investigado e os resultados serão apresentados na Sec. 4.3.

4.2

Relaxação depois de uma perturbação não localizada

4.2.1

Rotores XY de curto alcance

Começemos por analisar o modelo XY de curto alcance, identificado pela Eq. (4-6). Este é um sistema unidimensional, excepcional dentro do cenário do transporte térmico, porque é um sistema que conserva o momento mas apresenta transporte normal de calor, isto é, condutividade térmica finita [9, 20, 59, 60, 95]. Esse comportamento é atribuído à não conservação do estiramento (soma de q_i) [65, 66].

Uma representação da relaxação após a aplicação do protocolo de divisão é mostrado na Fig. 4.1, para a densidade de energia $u = 0.4$ e vários tamanhos do sistema.

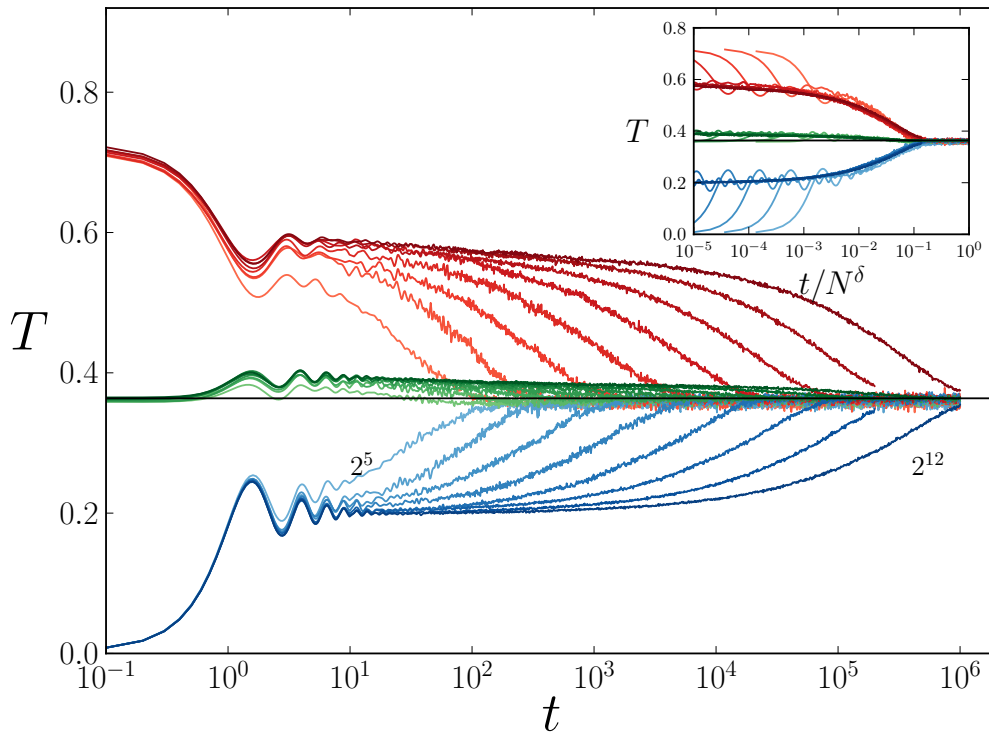


Figura 4.1: Rotores XY, primeiros vizinhos: relaxação ao equilíbrio, para $u = 0.4$. Temperaturas dos subsistemas quente (vermelho), frio (azul), e de todo o sistema (verde) versus tempo t , média sobre $2^{13}/N$ realizações. Para $N = 2^k$, onde $k = 5, \dots, 12$. A linha horizontal preta representa o valor teórico de equilíbrio. Inserção: temperatura versus tempo escalado t/N^δ , onde foi usado $\delta = 1.9$.

Observamos um regime inicial de relaxação violento com pequenas oscilações, quase insensíveis ao tamanho do sistema, seguido por um regime

de maior duração, que depende fortemente do tamanho do sistema. O decaimento é quase exponencial, mas em vez de obter taxas exponenciais de um procedimento de ajuste, estimamos o tempo de relaxação, τ_s , para $s = h, c$ como o intervalo de tempo necessário para que a diferença de temperatura $\Delta T_s(t) \equiv T_s(t) - T_{eq}$, atinja 20 % do seu valor de equilíbrio, T_{eq} , isso é $\Delta T_s(\tau_s) = 0.2\Delta T_s(0)$.

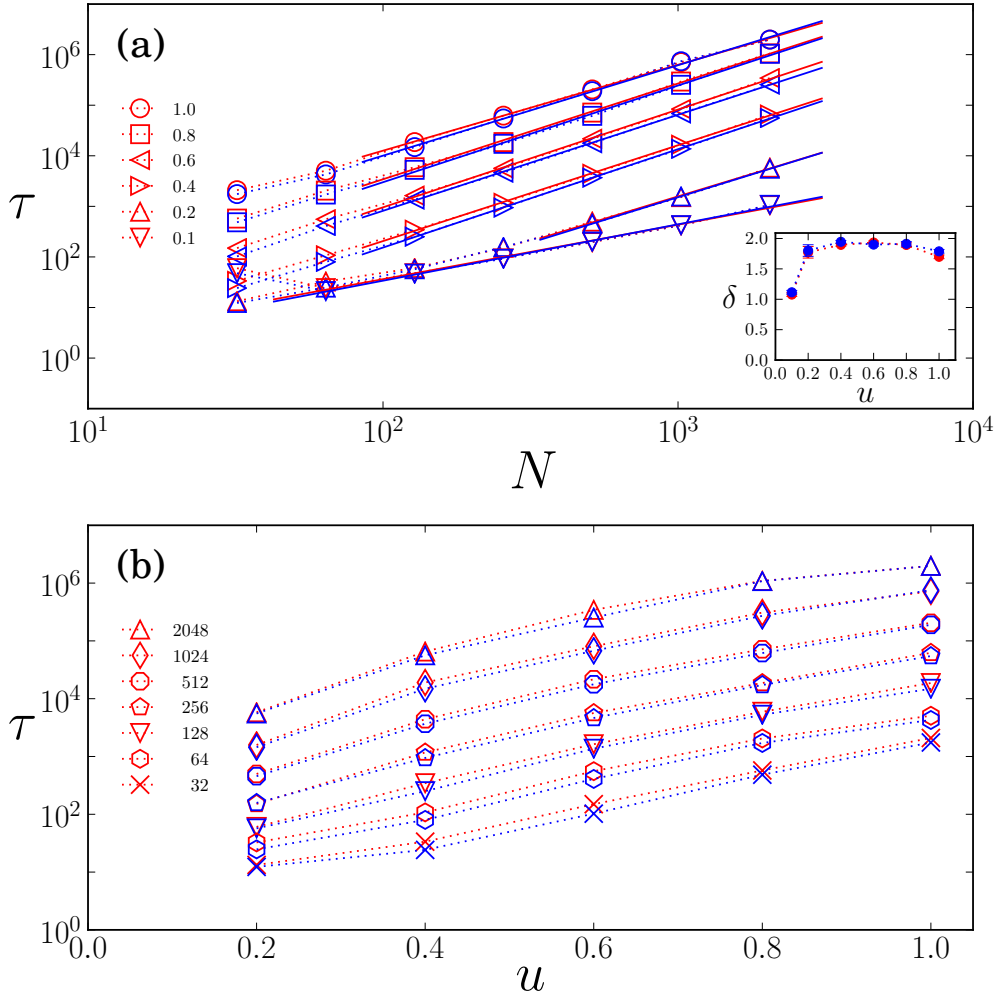


Figura 4.2: Rotores XY, primeiros vizinhos: (a) Tempo de relaxação τ versus o tamanho do sistema N para diferentes valores de energia u . As linhas sólidas correspondem ao ajuste de lei de potência com os expoentes mostrados na inserção. (b) Tempo de relaxação τ versus u para diferentes valores de N . Resultados para os subsistemas quentes e frios são mostrados por símbolos vermelhos e azuis respectivamente.

O comportamento do tempo de relaxação τ versus N é apresentado na Fig. 4.2 (a). Observamos um comportamento de escala N^δ , com valores de δ mostrados na inserção. Estes valores são ligeiramente inferiores a 2 para energias suficientemente grandes por partícula u mas se aproximam de 1 para

$u \lesssim 0.1$. Além disso, τ aumenta com u , para N fixo, quase exponencialmente, como mostrado na Fig. 4.2 (b). Verificamos que esses comportamentos de escala são robustos usando outras definições de τ , já que dão a mesma lei de escala com N .

4.2.2

Rotores HMF de alcance infinito

Agora, abordamos o modelo HMF, identificado pela Eq. (4-8). A relaxação das temperaturas é mostrada na Fig. 4.3. Como no caso de curto alcance, observamos primeiro um regime que é independente do tamanho do sistema, mas com oscilações maiores neste caso de longo alcance, seguido de um decaimento dependente do tamanho. Para $u = 0.4$, Fig. 4.3 (a), os perfis são quase simétricos. Para $u = 0.6$, Fig. 4.3 (b), há uma assimetria visível e um atraso do subsistema frio em relação ao quente. Esses efeitos são menos pronunciados em $u = 0.4$ e no caso de curto alcance.

Vale ressaltar que, mesmo quando a temperatura atingiu o valor de equilíbrio teórico, a distribuição de probabilidades de velocidade se torna gaussiana em tempos posteriores, conforme descrito na Fig. 4.4, em que é apresentada a curtose k_4 como função do tempo, onde

$$k_4 = \frac{\langle (p - \langle p \rangle)^4 \rangle}{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle^2}. \quad (4-10)$$

Diferentemente, no caso de curto alcance, a distribuição gaussiana é alcançada concomitantemente com o valor de equilíbrio da temperatura.

O comportamento do tempo de relaxação τ versus N é apresentado na Fig. 4.5 (a)-(b). O tempo τ aumenta com N seguindo aproximadamente o comportamento de escala $\tau \sim N$. Além disso, a simetria dos perfis observada para pequenas energias (e.g. $u = 0.4$ na Fig. 4.3(a)) é refletida em tempos de relaxação quase coincidentes. No entanto, para energias mais elevadas, a assimetria (e.g. $u = 0.6$ na Fig. 4.3 (b)) está relacionada aos tempos de relaxação mais curtos do subsistema frio.

Outra característica notável do caso de longo alcance, em comparação com o de curto alcance, é que entre o regime oscilatório e o decaimento para o equilíbrio, é formado um tipo de platô, sugerindo estados quase-estacionários com temperaturas diferentes das do equilíbrio térmico.

A dependência de τ com a energia é representada na Fig. 4.5(c) para dois tamanhos de sistema diferentes. Em contraste com o caso de curto alcance, τ não aumenta monotonicamente com u , mas apresenta um valor mínimo

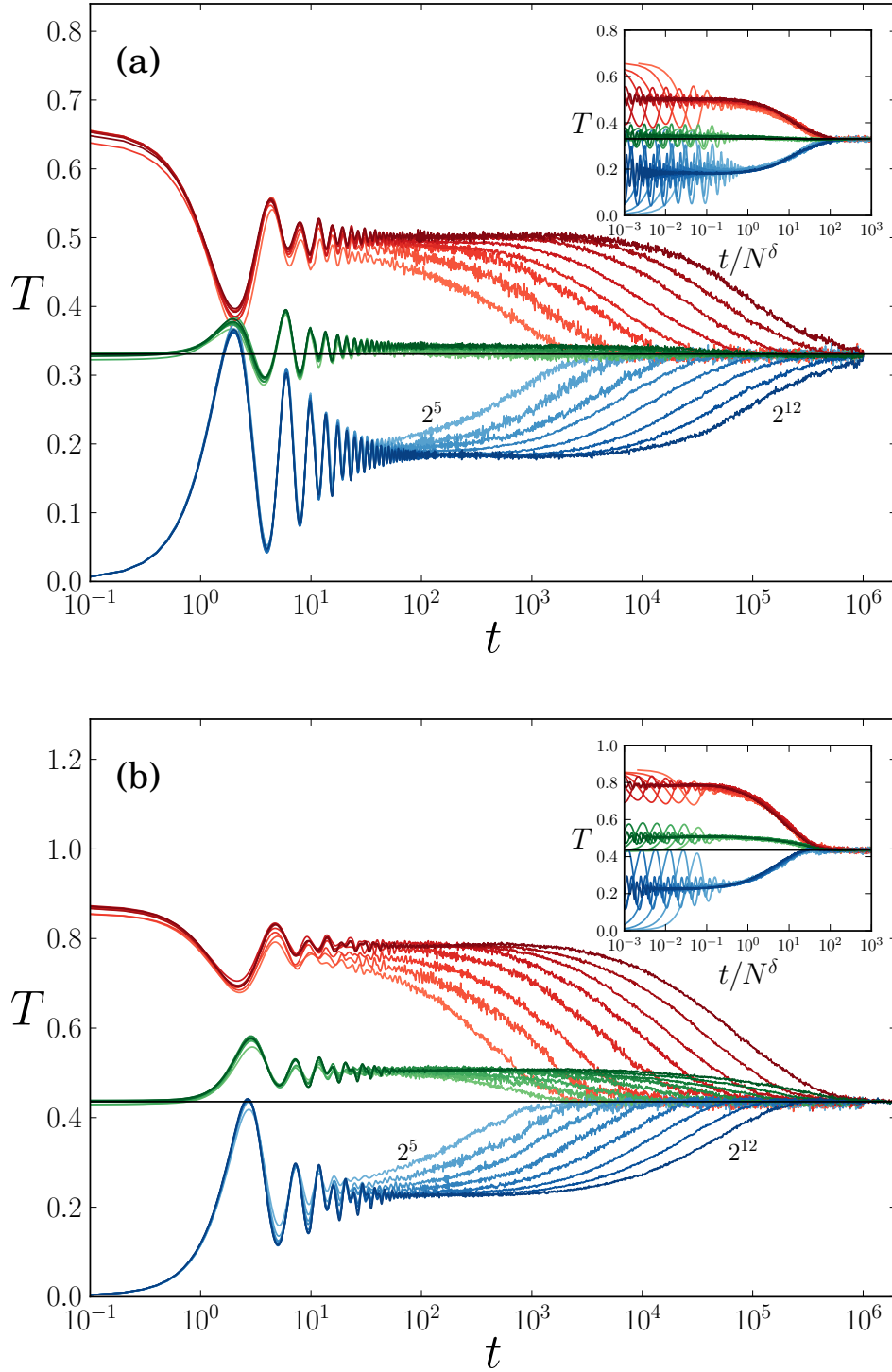


Figura 4.3: Rotores XY, campo médio: relaxação ao equilíbrio para $u = 0.4$ (a) e $u = 0.6$ (b). Temperatura dos subsistemas quentes (vermelhos), frios (azuis) e de todo o sistema (verde) versus tempo, média sobre $2^{18}/N$, com tamanhos dos sistemas $N = 2^k$, $k = 5, \dots, 12$. A linha horizontal preta representa o valor de equilíbrio teórico.

próximo da energia crítica ($u_c = 0.75$) no qual uma transição ferromagnética contínua ocorre [67]. Nesta região, também há uma maior dependência do

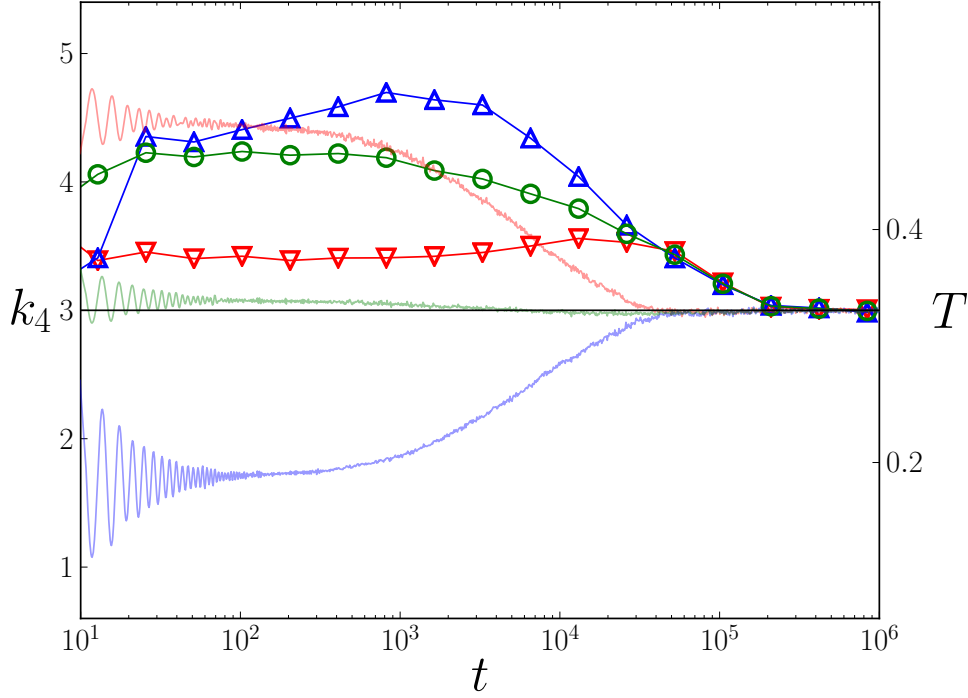


Figura 4.4: Evolução temporal da curtose da distribuição de velocidades dos rotores de campo médio XY, para $N = 256$ e $u = 0.4$. A linha preta horizontal corresponde ao valor da curtose da gaussiana $k_4 = 3$, desenhada para comparação. O valor médio de T da Fig. 4.3 é também reproduzido.

tamanho do sistema.

4.2.3

Osciladores lineares e não lineares

Agora, investigamos os sistemas de osciladores lineares e não-lineares dados pela Eq. (4-9).

No caso puramente harmônico, a evolução temporal de T é mostrada na Fig. 4.6, para $u = 0.4$ e diferentes tamanhos de sistema. Apesar dos perfis serem ruidosos, provavelmente devido à falta de interação entre modos, o comportamento de escala é $\tau \propto N$, isto é, $\delta = 1$. Além disso, observamos que esse expoente de escala é independente da energia, diferentemente dos casos anteriores. Esta lei de escala explica a mudança de comportamento observada nas curvas de τ versus N , no caso XY de curto alcance com baixa energia (veja Fig. 4.2). De fato, em energias baixas, os rotores sentem o fundo quase harmônico do potencial, atingindo o limite dos osciladores harmônicos.

Finalmente, investigamos o efeito das não-linearidades, como as introduzidas pelo potencial de interação FPUT- β , amplamente estudado nos últimos 60 anos [49, 50, 99].

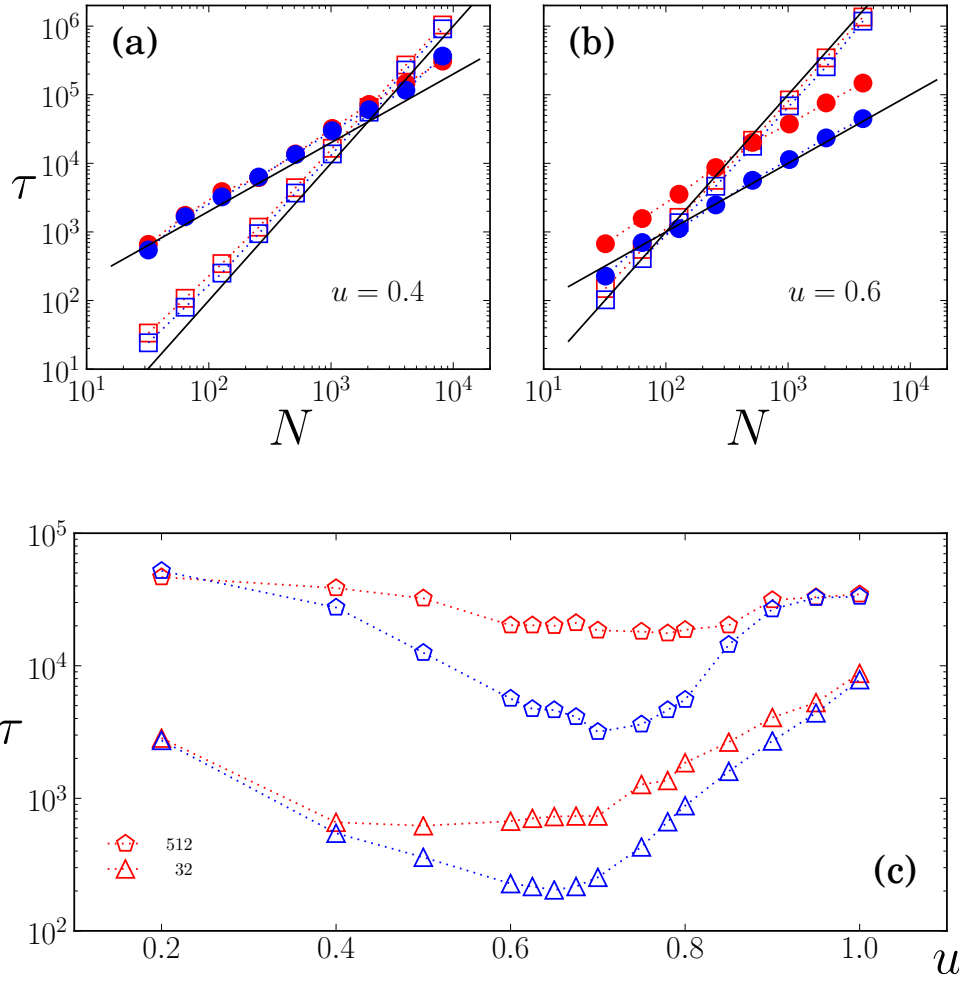


Figura 4.5: Rotores XY, campo médio: Tempo de relaxação τ como função do tamanho do sistema N (quadrados abertos) para dois valores diferentes de energia $u = 0.4$ (a) e 0.6 (b). Os resultados correspondentes para os rotores de curto alcance (círculos cheios) também são mostrados. As linhas contínuas pretas com inclinações $\tau \sim N$ e $\tau \sim N^2$ são desenhadas para comparação. Tempo de relaxação em função de u , para dois tamanhos diferentes de sistema (c). Os resultados para os subsistemas quente e frio são mostrados por símbolos vermelhos e azuis, respectivamente. Em todos os casos, foram feitas médias sobre $2^{18}/N$ realizações. Inserções: temperatura versus tempo escalado t/N^δ , onde foi usado $\delta = 1.09$ (a), 1.11 (b).

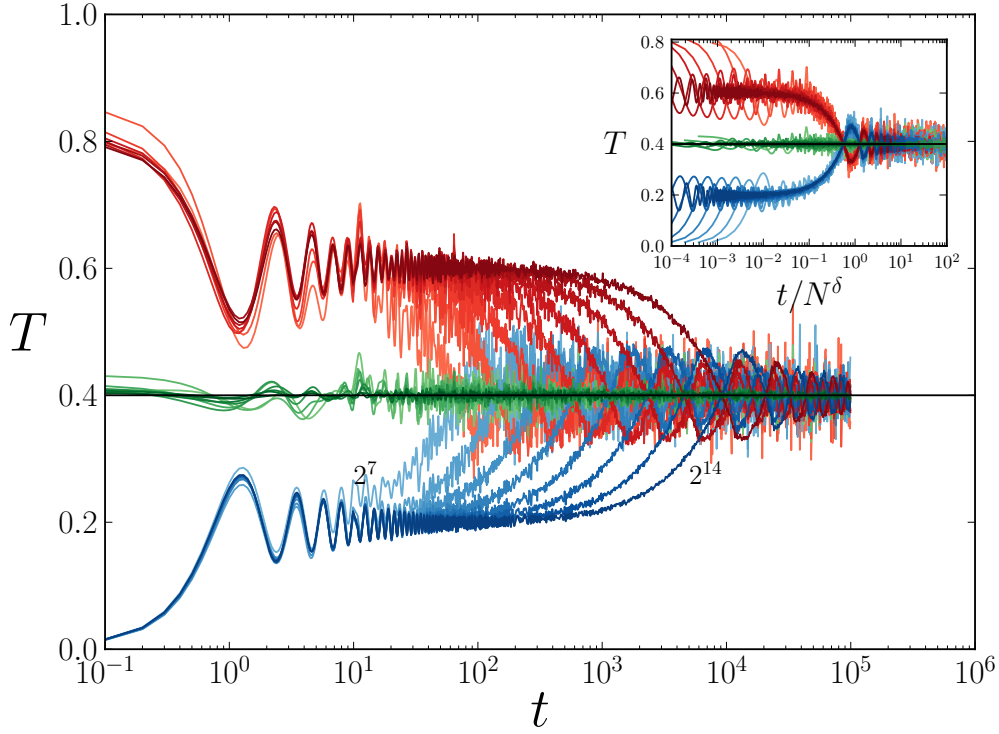


Figura 4.6: Cadeia harmônica: relaxação ao equilíbrio, como em figuras anteriores, com $u = 0.4$, para tamanhos $N = 2^k$ onde $k = 7 \dots, 14$. A inserção mostra os dados dimensionados, com $\delta = 1$.

Na Fig. 4.7, mostramos perfis de equilíbrio representativos para o FPUT- β , de diferentes tamanhos. Encontramos um fator de escala de tempo t/N^δ , onde $\delta \simeq 1.68$ para $u = 0.4$ (ver inserção da Fig. 4.7). Este valor de δ foi obtido ajustando uma exponencial $\Delta T_s(t) \sim \exp(-t/\tau)$ nos estágios finais de equilíbrio, para tamanhos $N > 1024$, quando as grandes oscilações ao redor do equilíbrio estão ausentes. Os dados colapsados usando a escala t/N^δ são mostrados na inserção, para $\delta \simeq 1.68$.

Na Fig. 4.8, mostramos o comportamento de escala dos sistemas dos osciladores. Lembremos que a condutividade κ escala com o tamanho do sistema como N^1 e $N^{1/3}$ para os osciladores lineares e anarmônicos FPU- β . Observamos que o caso anarmônico também mostra uma região plana, como nos rotores de campo médio, indicando algum tipo de estado estacionário ou quase equilibrado.

4.3

Relaxação depois de uma perturbação localizada

Para analisar a propagação da energia nos sistemas de curto alcance, aplicamos uma perturbação de energia cinética nas duas partículas centrais do

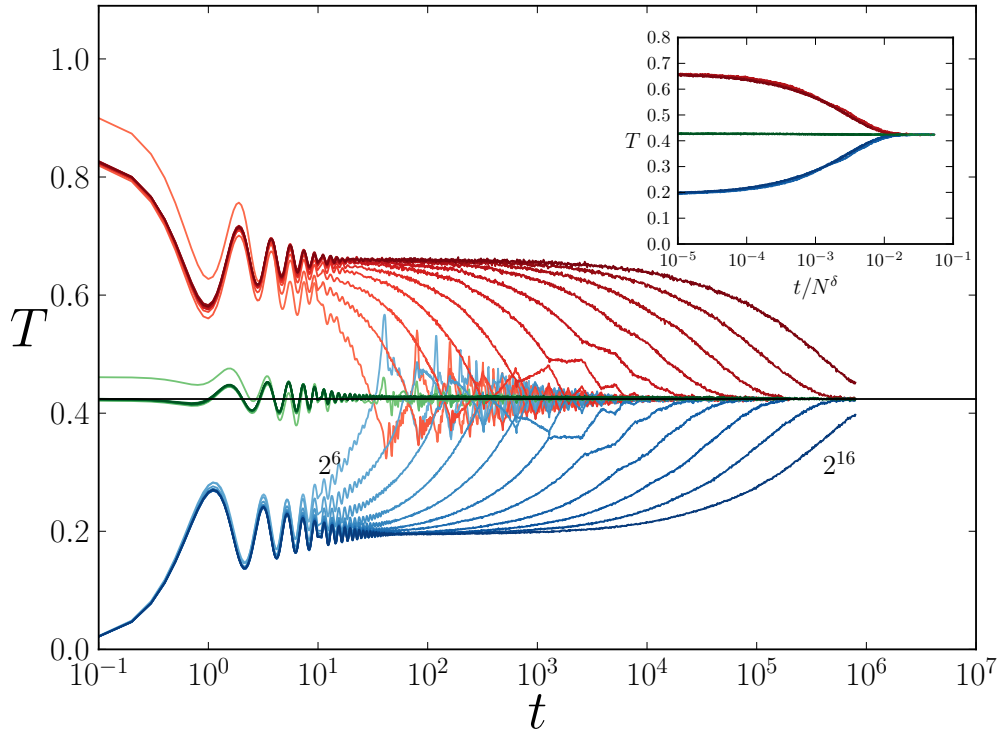


Figura 4.7: Osciladores FPUT- β com $\beta = 1/6$: relaxação para o equilíbrio, para $u = 0.4$ e tamanhos $N = 2^k$ com $k = 6, \dots, 16$. As curvas colapsadas são mostradas na inserção, com $\delta \simeq 1.68$, para $N > 2^{13}$.

sistema. (Devido às condições de fronteira periódicas, as partículas centrais podem ser quaisquer partículas contíguas). Essa perturbação consiste em alterar a energia cinética das duas partículas centrais para o dobro do valor da energia cinética de equilíbrio, com velocidades em direções opostas, para preservar o momento total. Além disso, uma pequena correção das velocidades das partículas restantes foi realizada para preservar a energia cinética e o momento total de todo o sistema.

Na Fig. 4.9, mostramos o perfil de temperatura em relação ao tempo, redimensionado de acordo com o comportamento de escala a largura da distribuição de velocidades. No caso dos rotores de curto alcance [Fig. 4.9(a)], a variância escala como $\sigma^2 \sim t$ indicando um comportamento difusivo normal. Além disso, a distribuição é gaussiana em boa aproximação. Este resultado está de acordo com o comportamento da autocorrelação de energia, que também segue uma propagação difusiva normal, conforme relatado na ref. [100].

Enquanto isso, para as molas lineares e não lineares [Figs. 4.9 (b) e (c), respectivamente], a distribuição não é gaussiana, a distribuição é mais platicúrtica e é delimitada por picos negativos que representam a propagação das frentes. A distância entre as duas frentes varia linearmente com o tempo,

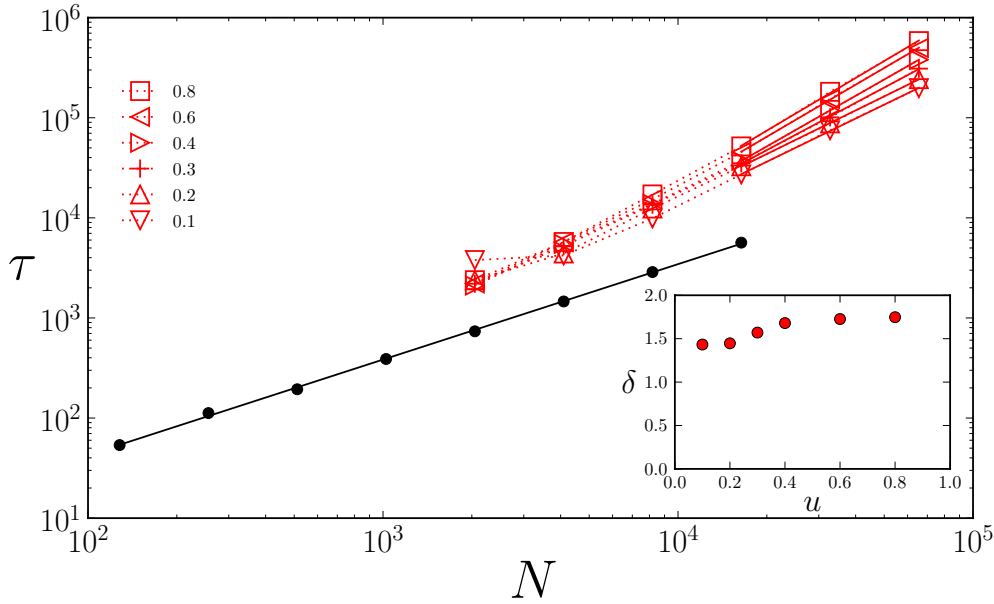


Figura 4.8: Osciladores: tempo de relaxação τ versus N , para diferentes valores de u . Os pequenos círculos cheios correspondem à cadeia de osciladores harmônicos ($u = 0.4$), a linha preta completa tem uma inclinação de $\delta = 1$. Enquanto os símbolos abertos correspondem à cadeia FPUT- β nas energias indicadas nas figuras. A inserção mostra o expoente de escala para os sistemas FPUT- β como função de u .

indicando uma propagação balística. Esse resultado também é consistente com a difusão anômala, que é uma característica dos sistemas que violam a lei de Fourier.

4.4

Comentários finais

Com o propósito de relacionar a relaxação térmica e a condução de calor, estudamos o comportamento de relaxação de sistemas unidimensionais, após aplicada uma perturbação. Consideramos modelos de rede que conservam o momento e governados por uma dinâmica hamiltoniana. Procuramos uma possível relação entre os comportamentos de tamanho finito dos tempos de relaxação e da condutividade.

A tabela 4.1 resume os expoentes de escala observados para cada sistema

Se a propagação fosse normal, a relação $\tau \sim N^2/\kappa \sim N^{2-\gamma}$, seria esperada, de acordo com Eq. (4-3). De fato, para os rotores de primeiros vizinhos, observamos a difusão normal da propagação de energia na Sec. 4.3, consistente com resultados para a função de autocorrelação da energia [100]. Enquanto isso, em trabalhos anteriores [59, 60, 95] foi observada uma condutividade constante (ou seja, $\gamma = 0$) para temperaturas moderadas. Portanto, o ex-

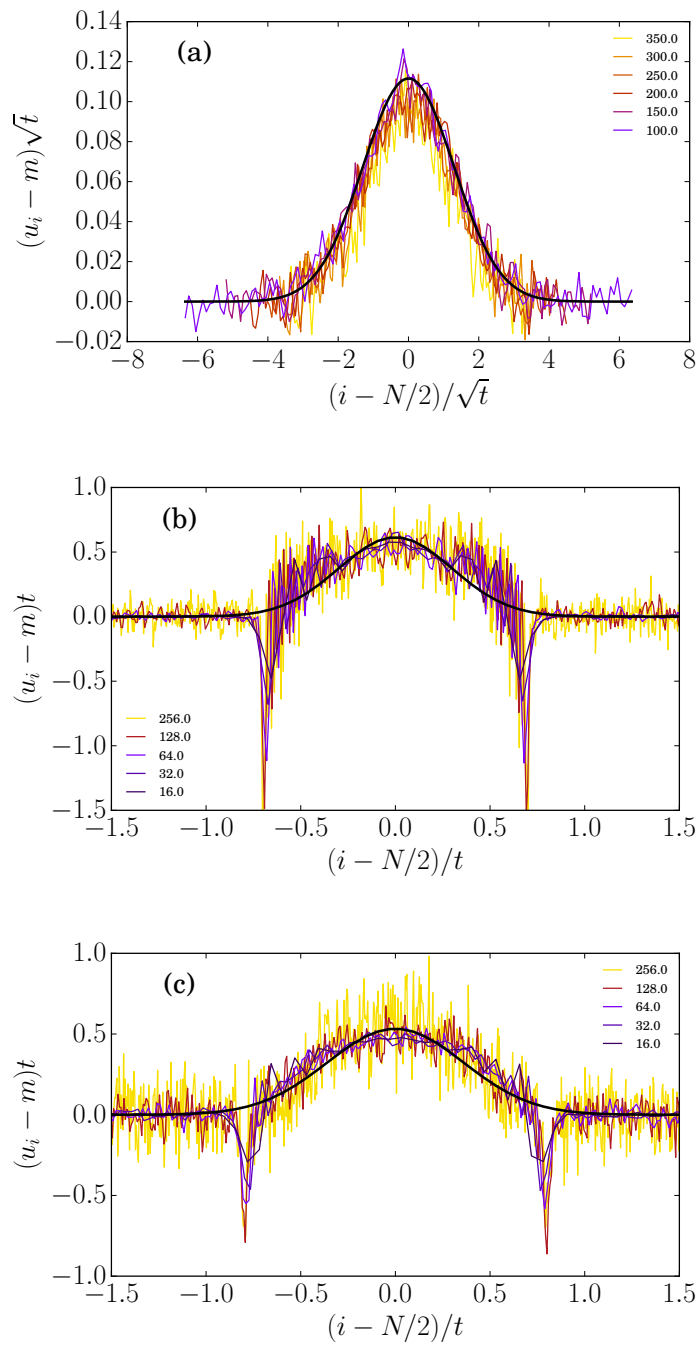


Figura 4.9: Evolução escalada do perfil de energia total sob a perturbação localizada, com $u = 0.4$, para (a) XY com $N = 128$ (a), (b) potencial harmônico (HC), e (c) FPUT- β , em ambos os casos $N = 1024$. A linha preta é um ajuste gaussiano e m é a energia média de 10 partículas em cada extremidade.

modelo	γ	δ
XY	0 [95, 20, 9]	$\simeq 1.9$
HC	1 [20, 9]	$\simeq 1.0$
FPUT $-\beta$	1/3 [20, 54, 101]	$\simeq 1.68$
HMF	-1 [95]	$\simeq 1.1$

Tabela 4.1: Expoentes de escala da condutividade $\kappa \sim N^\gamma$ e o tempo de relaxação $\tau \sim N^\delta$, com tamanho do sistema N .

poente da lei de potência de τ com N , $\delta \simeq 1.9$, é consistente com a relação Eq. (4-3), que prevê $\delta = 2 - \gamma$.

É interessante que esta relação também vale para osciladores (assim como para rotores de baixa energia, onde o limite harmônico é atingido), como pode ser visto na Tabela 4.1. Ou seja, a relação vale mesmo que a lei de Fourier falhe, ou seja mesmo que difusão de energia não seja normal nem a condutividade independente de N . Em particular para o FPUT- β , obtivemos $\delta \simeq 1.68$, que é próximo do valor $2 - \gamma = 2 - 1/3 = 5/3$.

Observe que o potencial dos rotores pode ser visto como expansão em séries de potência, cujo primeiro termo corresponde à aproximação linear (harmônica). A não linearidade (anarmonicidade) do FPUT- β , no entanto, não corresponde à expansão de segunda ordem do modelo dos rotores. Além disso, nestes osciladores de rede, o potencial é confinante, enquanto o potencial de interação dos rotores é limitado, portanto, as partículas não são confinadas. Essa diferença pode ser responsável pela não conservação do *stretch* no caso dos rotores, levando à validade da lei de Fourier.

Em contraste, nos rotores totalmente acoplados (HMF), a relação $\gamma = 2 - \delta$ não é válida. Os rotores de campo médio se comportam como um isolante no limite termodinâmico, com o decaimento da condutividade como $\kappa \sim N^{-1}$ [95], portanto $\gamma = -1$, enquanto obtivemos $\delta = 1$ na Sec. 4.2. Além disso, neste caso, a estrutura espacial é irrelevante e, portanto, a propagação espacial ocorre mais rapidamente que a lei de potência com o tamanho do sistema.

Devemos comentar que em um trabalho recente [94], Bagchi e Tsallis investigaram uma versão de longo alcance do FPUT- β [94], encontrando uma escala $\tau \sim N^{1.8}$. Embora a perturbação seja diferente da utilizada neste trabalho, essa escala pode vir do fato de que nesse experimento numérico a troca de energia entre dois subsistemas é mediada por contatos harmônicos, o

que pode produzir uma escala mais próxima do caso de curto alcance que do caso de longo.

Também devemos mencionar que a relação proposta na literatura $\gamma = \mu - 1$ [102], onde μ é o expoente de escala da propagação espacial com o tempo $(\Delta x)^2 \sim t^\mu$, só é válida no caso dos rotores com interações de primeiros vizinhos no regime que verifica a lei de Fourier.

Como uma perspectiva de trabalho futuro, seria interessante analisar a relaxação no modelo α -XY, em função do parâmetro α que controla o alcance das interações, interpolando entre os limites aqui estudados.

Resumidamente, no cap. 2 mostramos que um sistema de osciladores harmônicos com acoplamentos globais apresenta uma condutividade que decai com o tamanho do sistema N , seguindo a forma $1/N$. Isto contrasta com o que ocorre para os osciladores harmônicos com interações de primeiros vizinhos, em que a condutividade aumenta com N , sendo divergente no limite termodinâmico. Estes casos extremos ilustram que o alcance das interações tem um efeito crucial sobre a condução térmica no sistema. Como perspectiva, seria interessante completar os cálculos para valores intermediários do alcance.

No cap. 3, estudamos o efeito do alcance, indo continuamente de interações de primeiros vizinhos a campo médio, usando um modelo de rotores, o modelo α -XY. Também neste caso, observamos que no caso de campo médio a condutividade decai com N , surgindo portanto um comportamento de isolante. Entretanto, no limite de primeiros vizinhos, o sistema apresenta difusão normal e vale a lei de Fourier. Determinamos o valor crítico α_c abaixo do qual o sistema apresenta o mesmo comportamento que o campo médio. Este valor depende também da temperatura. O diagrama com os diferentes regimes encontrados é apresentado na Fig. 3.9. Uma perspectiva de continuidade dentro desta linha seria aumentar o tamanho do sistema para definir melhor as leis de escala da condutividade. Outra perspectiva seria aumentar a dimensionalidade do sistema, para ver como esta influencia o comportamento térmico em conjunção com o alcance das interações.

Finalmente, estudamos também o processo de relaxação ao equilíbrio no sistema de rotores, caso de primeiros vizinhos, em que vale a lei de Fourier, e comparamos o comportamento com o encontrado em outros sistemas simples em que essa lei falha, concretamente osciladores lineares e não lineares. Em todos os casos, os tempos de relaxação τ crescem com o tamanho do sistema, e τ apresenta uma lei de escala que está relacionada com a lei de escala da condutividade κ com o tamanho do sistema. Essa lei é $\tau = N^\delta \sim N^2/\kappa \sim N^{2-\gamma}$. Assim, o comportamento da condutividade pode ser associado ao do tempo de relaxação do sistema, independente do tipo de difusão, ou da validade da lei de Fourier. Esta relação não é observada para o caso de campo médio. Como perspectiva, o estudo da relaxação poderia ser estendido a valores intermediários de α para o modelo de rotores.

A

Hamiltoniano de campo médio

Neste apêndice descrevemos a dedução analítica da curva calórica para o Hamiltoniano de campo médio [83]

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{\epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (\text{A-1})$$

que pode ser reescrito

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{\epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - (\cos(\theta_i) \cos(\theta_j) + \sin(\theta_i) \sin(\theta_j))], \quad (\text{A-2})$$

ou

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{\epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j], \quad (\text{A-3})$$

onde

$$\vec{m}_k \equiv (\cos(\theta_k), \sin(\theta_k)) = (m_{x,k}, m_{y,k}), \quad (\text{A-4})$$

é o vetor spin clássico associado à partícula k . Então, a magnetização total do sistema é $\vec{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{m}_i$ com, a qual podemos reescrever o Hamiltoniano como

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{\epsilon}{2N} \left[N^2 - \sum_{i,j=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j \right], \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{\epsilon N}{2} [1 - \vec{M}^2]. \end{aligned} \quad (\text{A-5})$$

Daqui podemos notar que a energia potencial do sistema depende diretamente da magnetização M .

Agora, usando as equações de Hamilton:

$$\begin{aligned}\dot{p}_k &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_k}, \\ \dot{\theta}_k &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k},\end{aligned}\tag{A-6}$$

temos as equações de movimento

$$\begin{aligned}\ddot{\theta}_k &= \epsilon \left[\vec{M} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_k} \vec{m}_k \right] \\ &= \epsilon [-M_x m_{y,k} + M_y m_{x,k}] \\ &= -\epsilon [M_x m_{y,k} - M_y m_{x,k}] \\ &= -\epsilon [M \cos(\phi) \sin(\theta_k) - M \sin(\phi) \cos(\theta_k)] \\ &= -\epsilon M \sin(\theta_k - \phi),\end{aligned}\tag{A-7}$$

onde $\tan(\phi) = M_x/M_y$. Isto pode ser interpretado como a equação de um pêndulo no qual a magnetização M desempenha o papel da aceleração da gravidade (ou o comprimento da corda) e ϕ é uma perturbação na fase. E, portanto, no caso em que $M = 0$, temos a equação de uma partícula livre.

A.1

Dedução da curva calórica

Para determinar as propriedades termodinâmicas do HMF usaremos o ensemble canônico e portanto calcularemos a função de partição

$$Z = \int \prod_{l=1}^N dp_l d\theta_l \exp(-\beta \mathcal{H}),\tag{A-8}$$

do HMF como

$$Z = \int \prod_{l=1}^N dp_l d\theta_l \exp \left(-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} - \frac{\beta \epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j] \right),\tag{A-9}$$

onde podemos separar esta função como $Z = Z_K Z_V$, onde Z_K corresponde à parte cinética e Z_V à parte potencial. Sendo

$$Z_K = \int \prod_{l=1}^N dp_l \exp \left(-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} \right) = \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{N/2}\tag{A-10}$$

e

$$Z_V = \exp \left(-\frac{\beta \epsilon N}{2} \right) J, \tag{A-11}$$

onde

$$\begin{aligned}
 J &= \int \prod_{l=1}^N d\theta_l \exp \left(-\frac{\beta\epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N [-\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j] \right) \\
 &= \int \prod_{l=1}^N d\theta_l \exp \left(-\frac{\beta\epsilon}{2N} \left[-\left(\sum_{i=1}^N \vec{m}_i \right) \cdot \left(\sum_{j=1}^N \vec{m}_j \right) \right] \right) \\
 &= \int \prod_{l=1}^N d\theta_l \exp \left(\frac{\beta\epsilon}{2N} \left[\sum_{j=1}^N \vec{m}_j \right]^2 \right) \\
 &= \int \prod_{l=1}^N d\theta_l \exp \left(\frac{\beta\epsilon N}{2} \left[\sum_{j=1}^N \frac{\vec{m}_j}{N} \right]^2 \right) \\
 &= \int \prod_{l=1}^N d\theta_l \exp \left(\frac{\mu}{2} \vec{x}^2 \right),
 \end{aligned} \tag{A-12}$$

para o qual definimos $\vec{x} \equiv \sum_{j=1}^N \vec{m}_j = N\vec{M}$ and $\mu \equiv \beta\epsilon/N$.

Agora devemos notar que $\mu > 0$ portanto a integral diverge no infinito. Então, devemos usar a transformação de Hubbard-Stratonovich para o cálculo da integral.

Agora como

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[-(s-a)^2] ds = \sqrt{\pi}, \tag{A-13}$$

vemos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \exp \left[-\left(\vec{y} - \sqrt{\frac{\mu}{2}} \vec{x} \right)^2 \right] = \pi \tag{A-14}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \exp \left[-\vec{y}^2 + 2\sqrt{\frac{\mu}{2}} \vec{x} \cdot \vec{y} - \frac{\mu}{2} \vec{x}^2 \right] = \pi, \tag{A-15}$$

então

$$\exp \left[\frac{\mu}{2} \vec{x}^2 \right] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \exp \left[-\vec{y}^2 + 2\sqrt{\frac{\mu}{2}} \vec{x} \cdot \vec{y} \right], \tag{A-16}$$

ou

$$\exp \left[\frac{\beta\epsilon}{2N} \vec{x}^2 \right] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \exp \left[-\vec{y}^2 + 2\sqrt{\frac{\beta\epsilon}{2N}} \vec{x} \cdot \vec{y} \right]. \tag{A-17}$$

Logo fazendo $\vec{y} \rightarrow \sqrt{\frac{N}{2\beta\epsilon}} \vec{y}$

$$\exp \left[\frac{\beta\epsilon}{2N} \vec{x}^2 \right] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{N}{2\beta\epsilon} d^2\vec{y} \exp \left[-\frac{N}{2\beta\epsilon} \vec{y}^2 + 2\sqrt{\frac{\beta\epsilon}{2N}} \vec{x} \cdot \sqrt{\frac{N}{2\beta\epsilon}} \vec{y} \right], \tag{A-18}$$

temos

$$\exp \left[\frac{\beta\epsilon}{2N} \vec{x}^2 \right] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{N}{2\beta\epsilon} d^2\vec{y} \exp \left[-\frac{N}{2\beta\epsilon} \vec{y}^2 + \vec{x} \cdot \vec{y} \right]. \quad (\text{A-19})$$

Usando a representação integral da função modificada de Bessel temos que

$$I_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \exp [z \cos \alpha] \cos(n\alpha) d\alpha \quad (\text{A-20})$$

$$\text{então } \vec{x} \cdot \vec{y} = \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{y} = \sum_{i=1}^N (\cos(\theta_i) y_x + \sin(\theta_i) y_y).$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \exp [\vec{x} \cdot \vec{y}] &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \exp \left[\left(\sum_{j=1}^N \vec{m}_j \right) \cdot \vec{y} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \prod_{j=1}^N \exp [\vec{m}_j \cdot \vec{y}] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \prod_{j=1}^N \exp [\cos(\theta_j) y_x + \sin(\theta_j) y_y]. \end{aligned} \quad (\text{A-21})$$

Logo,

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_j \exp [\cos(\theta_j) y_x + \sin(\theta_j) y_y] &= \prod_{j=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_j \exp [y \cos(\theta_j) \cos(\phi) + y \sin(\theta_j) \sin(\phi)] \\ &= \prod_{j=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_j \exp [y \cos(\theta_j - \phi)] \\ &= \prod_{j=1}^N 2\frac{\pi}{\pi} \int_0^\pi d\theta_j \exp [y \cos(\theta_j)] \\ &= (2\pi I_0(y))^N \\ &= \exp [N \ln (2\pi I_0(y))]. \end{aligned} \quad (\text{A-22})$$

Devemos notar que não importa o valor do ϕ porque a integração é sobre todo o período, então a integral será a mesma.

$$J = \frac{1}{\pi} \frac{N}{2\beta\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{y} \exp \left(-N \left[\frac{\vec{y}^2}{2\beta\epsilon} - \ln (2\pi I_0(y)) \right] \right). \quad (\text{A-23})$$

Usando a aproximação do ponto de sela

$$\begin{aligned} J &\approx \max_y \left[\exp \left(-N \left[\frac{\bar{y}^2}{2\beta\epsilon} - \ln(2\pi I_0(y)) \right] \right) \right], \\ &\approx \exp \left[\max_y \left(-N \left[\frac{\bar{y}^2}{2\beta\epsilon} - \ln(2\pi I_0(y)) \right] \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{A-24})$$

então

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{N/2} \exp\left(-\frac{\beta\epsilon N}{2}\right) J \\ &= \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{N/2} \exp\left(-\frac{\beta\epsilon N}{2}\right) \exp \left[\max_y \left(-N \left[\frac{\bar{y}^2}{2\beta\epsilon} - \ln(2\pi I_0(y)) \right] \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A-25})$$

Portanto, temos que a energia livre por partícula será

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\beta N} \ln Z \right), \quad (\text{A-26})$$

ou seja

$$\beta f = -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\pi}{\beta} \right) + \frac{\beta\epsilon}{2} + \max_y \left(-\frac{y^2}{2\beta\epsilon} + \ln(2\pi I_0(y)) \right). \quad (\text{A-27})$$

Então, podemos calcular a energia média do sistema por partícula

$$u = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f). \quad (\text{A-28})$$

Logo, lembrando que $dI_0(y)/dy = I_1(y)$, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f) = \frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\pi}{\beta} \right) + \frac{\beta\epsilon}{2} + \max_y \left(-\frac{y^2}{2\beta\epsilon} + \ln(2\pi I_0(y)) \right) \right\} \quad (\text{A-29})$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f) = \frac{1}{2\beta} + \frac{\epsilon}{2} + \frac{\partial}{\partial \beta} \max_y \left(-\frac{y^2}{2\beta\epsilon} + \ln(2\pi I_0(y)) \right), \quad (\text{A-30})$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f) = \frac{1}{2\beta} + \frac{\epsilon}{2} + \frac{\partial}{\partial \beta} \left(-\frac{y_{max}^2}{2\beta\epsilon} + \ln(2\pi I_0(y_{max})) \right), \quad (\text{A-31})$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta}(\beta f) = \frac{1}{2\beta} + \frac{\epsilon}{2} \left(1 - \left(\frac{y_{max}}{\beta \epsilon} \right)^2 \right) \quad (\text{A-32})$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta}(\beta f) = \frac{1}{2\beta} + \frac{\epsilon}{2} \left(1 - \left(\frac{I_1}{I_0}(y_{max}) \right)^2 \right). \quad (\text{A-33})$$

Então, a energia por partícula u (densidade de energia) é

$$u = \frac{1}{2\beta} + \frac{\epsilon}{2} \left(1 - \left(\frac{I_1}{I_0}(y_{max}) \right)^2 \right), \quad (\text{A-34})$$

onde podemos ver que a magnetização M deve ser:

$$M = \frac{I_1}{I_0}(y_{max}). \quad (\text{A-35})$$

Para obter o máximo valor de y devem ser satisfeitas as seguintes condições:

$$\frac{1}{\beta} = \frac{\epsilon}{y_{max}} \frac{I_1}{I_0}(y_{max}). \quad (\text{A-36})$$

Podemos solucionar numericamente as equações (A-35) e (A-36), e obter um gráfico como mostrado na Fig. 1.3 para os valores correspondentes de energia e temperatura.

B

Integração numérica

A dinâmica molecular é uma técnica que permite realizar a integração numérica das equações de movimento de um sistema físico dadas as condições iniciais (posições e momentos) e interações entre as partículas para determinar a sua evolução temporal e assim poder calcular as quantidades de interesse.

Se temos uma equação diferencial da ordem m

$$\frac{d^m y}{dt^m} = f\left(t, y, \frac{dy}{dt}, \dots, \frac{d^{m-1}y}{dt^{m-1}}\right), \quad (\text{B-1})$$

podemos reduzir esta em m equações diferenciais ordinárias de primeira ordem definindo novas variáveis $y_1 = y$, $y_{j+1} = d^j y / dt^j$ para $j = 1, \dots, m-1$ e assim

$$\begin{aligned} \frac{dy_j}{dt} &= y_{j+1} \\ \frac{dy_m}{dt} &= f(t, y_1, y_2, \dots, y_m), \end{aligned} \quad (\text{B-2})$$

onde $j = 1, 2, \dots, m-1$. Portanto, para simular uma equação diferencial de ordem m basta integrar m equações de ordem 1.

Para integrar numericamente as equações (B-2), usaremos métodos de diferenças finitas. Estes métodos consistem em discretizar os passos de tempo e calcular os novos valores iterativamente. Esta discretização é uma aproximação numérica geralmente baseada em expansões de Taylor. Existem diversos esquemas, de diferentes ordens de precisão, tanto implícitos quanto explícitos com suas respectivas vantagens e desvantagens na convergência ou estabilidade da solução [87].

B.1

Algoritmo de Verlet

O algoritmo de Verlet, é baseado em dois truncamentos de segunda ordem na expansão em série de Taylor da posição

$$\begin{aligned} r(t + \delta t) &= r(t) + \delta t v(t) + \frac{\delta t^2}{2} a(t), \\ r(t - \delta t) &= r(t) - \delta t v(t) + \frac{\delta t^2}{2} a(t). \end{aligned} \quad (\text{B-3})$$

e portanto

$$\begin{aligned} r(t + \delta t) &= 2r(t) - r(t - \delta t) + \delta t^2 a(t), \\ v(t) &= \frac{r(t + \delta t) - r(t - \delta t)}{2\delta t}. \end{aligned} \quad (\text{B-4})$$

Devemos notar que a posição no tempo $t + \delta t$ é calculada independentemente da velocidade, mas depende da posição, no tempo t e num instante anterior ($r(t)$ e $r(t - \delta t)$), assim como também da aceleração em t . As vantagens de usar este método são: (i) as posições são calculadas com erros da ordem de δt^2 , (ii) apresenta reversibilidade temporal para forças conservativas, (iii) a nova posição é calculada numa iteração e (iv) a energia é conservada. Mas o fato de que um termo tão pequeno é adicionado a cada passo pode levar a tempos longos a imprecisões numéricas (problemas de convergência) [87].

B.2

Integração numérica de equações diferenciais estocásticas

Para uma equação diferencial estocástica da forma

$$\frac{dx}{dt} = a(x, t) + b(x, t)\xi(t), \quad (\text{B-5})$$

não existe uma adaptação simples dos métodos numéricos de equações diferenciais ordinárias [22] e isto é porque a idealização do ruído é não diferenciável. Portanto, a solução

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t a(x(s))ds + \int_{t_0}^t b(x(s))dW(s), \quad (\text{B-6})$$

onde $dW(t) \equiv \xi(t)dt$, têm dois termos integrais, o primeiro do tipo riemanniano e o segundo termo uma integral que pode ser calculada desde dois pontos de vista: Itô ou Stratonovich, do qual depende a escolha da forma de cálculo da integral estocástica segundo o valor atribuído a $b(x, t)$ [22].

Porém no caso de ruído aditivo o termo $b(x, t)$ é constante portanto o segundo termo de integração não depende do estado do sistema, então

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t a(x(s))ds + b \int_{t_0}^t dW(s), \quad (\text{B-7})$$

o qual permite usar os métodos de integração numérica usuais e acrescentar o termo do ruído a cada passo de tempo.

B.3

Dinâmica browniana

Para fazer uma integração numérica de um sistema de equações de Langevin com forças externas usamos o algoritmo de Verlet acoplado com uma dinâmica de langevin [87].

$$\begin{aligned}\dot{r} &= v(t) \\ m\dot{v} &= F(t) - m\gamma v(t) + \eta(t),\end{aligned}\tag{B-8}$$

onde $\langle \eta(t)\eta(0) \rangle = 2mk_B T \gamma \delta(t)$.

As equações de movimento (B-8) são discretizadas, supondo que as forças permanecem aproximadamente constantes num intervalo de tempo δt da seguinte forma [87]:

$$\begin{aligned}r(t + \delta t) &= r(t) + c_1 v(t) \delta t + c_2 \frac{F(t)}{m} \delta t^2 + c_3 \frac{\dot{F}(t)}{m} \delta t^3 + \delta r^G, \\ v(t + \delta t) &= c_0 v(t) + c_1 \frac{F(t)}{m} \delta t + c_2 \frac{\dot{F}(t)}{m} \delta t^2 + \delta v^G,\end{aligned}\tag{B-9}$$

onde

$$\begin{aligned}c_0 &= \exp(-\gamma \delta t), \\ c_1 &= (1 - c_0)/(\gamma \delta t), \\ c_2 &= (1 - c_1)/(\gamma \delta t), \\ c_3 &= (1/2 - c_2)/(\gamma \delta t),\end{aligned}\tag{B-10}$$

são constantes de integração e δr^G e δv^G são variáveis aleatórias correlacionadas via uma distribuição gaussiana bivariada [87] da forma

$$\begin{aligned}\rho(\delta r^G, \delta v^G) &= \frac{1}{2\pi\sigma_r\sigma_v(1 - c_{rv}^2)^{1/2}} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2(1 - c_{rv}^2)^2} \left[\left(\frac{\delta r^G}{\sigma_r} \right)^2 + \left(\frac{\delta v^G}{\sigma_v} \right)^2 - 2c_{rv} \left(\frac{\delta r^G}{\sigma_r} \right) \left(\frac{\delta v^G}{\sigma_v} \right) \right] \right\},\end{aligned}\tag{B-11}$$

onde

$$\sigma_v^2 = \langle (\delta v^G)^2 \rangle = \frac{KT}{m} (1 - \exp(-2\gamma\delta t)), \quad (\text{B-12})$$

$$\sigma_r^2 = \langle (\delta r^G)^2 \rangle = \delta t^2 \frac{KT}{m} \frac{1}{\gamma\delta t} \times \left[2 - \frac{1}{\gamma\delta t} (3 - 4e^{-\gamma\delta t} + e^{-2\gamma\delta t}) \right], \quad (\text{B-13})$$

e

$$c_{rv} = \delta t \frac{KT}{m} \frac{1}{\sigma_r \sigma_v} \frac{1}{\gamma\delta t} (1 - e^{-\gamma\delta t})^2. \quad (\text{B-14})$$

Finalmente, para obter os termos δv^G e δr^G correlacionados mediante (B-11) temos que sortear duas números η_1 e η_2 com dois distribuições gaussianas e assim teremos [88]

$$\begin{aligned} \delta v^G &= \sigma_v \left(c_{rv} \eta_1 + \sqrt{(1 - c_{rv}^2)} \eta_2 \right), \\ \delta r^G &= \sigma_r \eta_1. \end{aligned} \quad (\text{B-15})$$

Com este método devemos obter uma integração estocásticos para os banhos térmicos. Devemos notar que no limite sem ruídos estocástica se recupera o algoritmo de Verlet.

B.4

Algoritmo simplético

Os algoritmos simpléticos são integradores numéricos que conservam o volume do espaço de fases, mediante transformações canônicas. Isto garante a conservação da energia total do sistema isolado [98].

Dado um Hamiltoniano da forma

$$\mathcal{H} = T(p) + V(q), \quad (\text{B-16})$$

onde p e q são o momento e a posição de uma partícula. Então podemos escrever as equações de Hamilton

$$\dot{z} = \{z, H(z)\} = D_H z, \quad (\text{B-17})$$

onde $z = (q, p)$ é um ponto no espaço de fases, $D_H F = \{F, H(z)\}$ é o operador de evolução e $\{, \}$ as chaves de Poisson. Então, a solução formal desta é

$$z(\tau) = \exp(\tau D_H) z(0), \quad (\text{B-18})$$

e, como o $D_H = D_T + D_V$, temos que

$$\exp[\tau D_H] = \prod_{i=1}^k \exp(c_i \tau D_T) \exp(d_i \tau D_V) + O(\tau^{n+1}). \quad (\text{B-19})$$

Desta expressão podemos extrair uma sucessão de mapas, para as coordenadas (q, p) , da forma

$$\begin{aligned} q_i &= q_{i-1} + \tau c_i \frac{\partial T}{\partial p}(p_{i-1}), \\ p_i &= p_{i-1} - \tau d_i \frac{\partial V}{\partial q}(q_{i-1}). \end{aligned} \quad (\text{B-20})$$

Com estas podemos iterar a cada passo de tempo τ com uma precisão $O(\tau^{n+1})$ conforme a ordem que desejemos. Entretanto, para o caso de segunda ordem, se recupera o algoritmo de Verlet. E para o caso de quarta ordem temos que os coeficientes c_i e d_i são [98]

$$\begin{aligned} d_1 &= d_3 = x_1, & d_2 &= x_0, d_4 = 0, \\ c_1 &= c_4 = x_1/2, & c_2 &= c_3 = (x_0 + x_1)/2, \end{aligned} \quad (\text{B-21})$$

onde

$$x_0 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \quad x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}. \quad (\text{B-22})$$

Uma característica dos algoritmos simpléticos é que podemos ter uma precisão alta para um τ não muito pequeno. Porém, isto não reduz o tempo de cálculo já que num mesmo passo de tempo temos que iterar n vezes dependendo da ordem simplética escolhida.

C

Tempo de relaxação para a difusão normal

Se a lei de Fourier é satisfeita, então a temperatura terá um comportamento difusivo

$$\frac{\partial}{\partial t}T(t, x) = \frac{\kappa}{c} \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(t, x). \quad (\text{C-1})$$

A solução desta equação pode-se obter usando separação de variáveis

$$T(x, t) = \zeta(x)\theta(t). \quad (\text{C-2})$$

Então, a solução geral desta equação para condições periódicas de contorno é

$$T(x, t) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (A_n \cos(q_n x) + B_n \sin(q_n x)) e^{-t/\tau_n}, \quad (\text{C-3})$$

onde,

$$\tau_n = \frac{1}{4\pi^2} \frac{c}{\kappa} \frac{N^2}{n^2}, \quad (\text{C-4})$$

sendo $q_n = 2\pi n/N$, κ a condutividade térmica, e N o número de partículas. Portanto, se inicialmente o sistema tem duas temperaturas diferentes T_1 e T_2 em cada metade, logo $\Delta T = T_1 - T_2$ será:

$$\Delta T(t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{8(T_1 - T_2)}{(2m+1)^2 \pi^2} e^{-(2m+1)^2 t/\tau_1}. \quad (\text{C-5})$$

Agora, como $\tau_1 > \tau_2 > \dots, > \tau_n > \dots$, pode-se truncar a série no primeiro termo

$$\kappa = \frac{1}{4\pi^2} \frac{c}{\tau_1} N^2. \quad (\text{C-6})$$

Finalmente, se o sistema satisfaz a lei de Fourier, o tempo de relaxação τ_1 deve escalar como N^2 [93].

Referências bibliográficas

- [1] FERMI, E.. **Thermodynamics**. Dover books in physics and mathematical physics. Dover Publications, 1956.
- [2] GALLAVOTTI, G.; REITER, W. ; YNGVASON, J.. **Boltzmann's Legacy**. ESI lectures in mathematics and physics. European Mathematical Society, 2008.
- [3] SCHRÖDINGER, E.. **What is Life?: The Physical Aspect of the Living Cell**. What is Life?: The Physical Aspect of the Living Cell. The University Press, 1944.
- [4] LEBOWITZ, J.; LIVI, R.; MAJUMDAR, S.; MUKAMEL, D.; RUFFOLI, S.; CASETTI, L. ; LEPRI, S.. **Advances in non-equilibrium statistical mechanics: large deviations and long-range correlations, extreme value statistics, anomalous transport and long-range interactions**. Il Colle di Galileo, 4(1), 2015.
- [5] BRUSH, S.. **The kind of motion we call heat: a history of the kinetic theory of gases in the 19th century**, v. 2. North-Holland, 1986.
- [6] BONETTO, F.; LEBOWITZ, J. L. ; REY-BELLET, L.. **Fourier's Law: a Challenge for Theorists**. p. 128–150, 2000.
- [7] HUANG, K.. **Statistical mechanics**. Wiley, 1987.
- [8] KARDAR, M.. **Statistical Physics of Particles**. Cambridge University Press, 2007.
- [9] LEPRI, S.; LIVI, R. ; POLITI, A.. **Thermal conduction in classical low-dimensional lattices**. Physics Reports, 377(1):1–80, Apr. 2003.
- [10] CHANG, C. W.; OKAWA, D.; GARCIA, H.; MAJUMDAR, A. ; ZETTL, A.. **Breakdown of fourier's law in nanotube thermal conductors**. Phys. Rev. Lett., 101:075903, Aug 2008.
- [11] WANG, Z.; CARTER, J. A.; LAGUTCHEV, A.; KOH, Y. K.; SEONG, N.-H.; CAHILL, D. G. ; DLOTT, D. D.. **Ultrafast flash thermal conductance of molecular chains**. Science, 317(5839):787–790, 2007.

- [12] MEIER, T.; MENGES, F.; NIRMALRAJ, P.; HÖLSCHER, H.; RIEL, H. ; GOTSMANN, B.. **Length-dependent thermal transport along molecular chains**. *Phys. Rev. Lett.*, 113:060801, Aug 2014.
- [13] LI, N.; REN, J.; WANG, L.; ZHANG, G.; HÄNGGI, P. ; LI, B.. **Colloquium**. *Rev. Mod. Phys.*, 84:1045–1066, Jul 2012.
- [14] DUBI, Y.; DI VENTRA, M.. **Colloquium**. *Rev. Mod. Phys.*, 83:131–155, Mar 2011.
- [15] CHANG, C. W.; OKAWA, D.; MAJUMDAR, A. ; ZETTL, A.. **Solid-state thermal rectifier**. *Science*, 314(5802):1121–1124, 2006.
- [16] LI, B.; WANG, L. ; CASATI, G.. **Thermal diode: Rectification of heat flux**. *Phys. Rev. Lett.*, 93:184301, Oct 2004.
- [17] PEREIRA, E.; ÁVILA, R. R.. **Increasing thermal rectification: Effects of long-range interactions**. *Phys. Rev. E*, 88:032139, Sep 2013.
- [18] CHEN, S.; PEREIRA, E. ; CASATI, G.. **Ingredients for an efficient thermal diode**. *EPL (Europhysics Letters)*, 111(3):30004, 2015.
- [19] PEIERLS, R.. **Quantum Theory of Solids**. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 1996.
- [20] DHAR, A.. **Heat transport in low-dimensional systems**. *Advances in Physics*, 57(5):457–537, 2008.
- [21] TEHVER, R.; TOIGO, F.; KOPLIK, J. ; BANAVAR, J. R.. **Thermal walls in computer simulations**. *Phys. Rev. E*, 57:R17–R20, Jan 1998.
- [22] GARDINER, C.. **Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences**. Springer series in synergetics. Springer, 1994.
- [23] VAN KAMPEN, N.. **Stochastic Processes in Physics and Chemistry**. North-Holland Personal Library. Elsevier Science, 2011.
- [24] RISKEN, H.. **The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications**. Springer series in synergetics. Springer-Verlag, 1989.
- [25] T., T.; DE OLIVEIRA, M.. **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade Vol. 35**. EDUSP, 2001.
- [26] MORGADO, W.. **Física de não equilíbrio (notas de aula, unpublished)**.

- [27] KURCHAN, J.. **Six out of equilibrium lectures**. ArXiv e-prints, Jan. 2009.
- [28] TODA, M.; KUBO, R.; SAITŌ, N. ; HASHITSUME, N.. **Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics**. Series C, English Authors. Springer Berlin Heidelberg, 1992.
- [29] NOSÉ, S.. **A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods**. The Journal of Chemical Physics, 81(1):511–519, 1984.
- [30] HOOVER, W. G.. **Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions**. Phys. Rev. A, 31:1695–1697, Mar 1985.
- [31] AOKI, K.; KUSNEZOV, D.. **Fermi-Pasta-Ulam β Model: Boundary Jumps, Fourier's Law, and Scaling**. Physical Review Letters, 86(18):4029–4032, Apr. 2001.
- [32] CASHER, A.; LEBOWITZ, J. L.. **Heat flow in regular and disordered harmonic chains**. Journal of Mathematical Physics, 12(8):1701–1711, 1971.
- [33] RUBIN, R. J.; GREER, W. L.. **Abnormal lattice thermal conductivity of a one-dimensional, harmonic, isotopically disordered crystal**. Journal of Mathematical Physics, 12(8):1686–1701, 1971.
- [34] SOARES-PINTO, D.; MORGADO, W.. **Brownian dynamics, time-averaging and colored noise**. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 365(2):289 – 299, 2006.
- [35] MORGADO, W. A.; GUERREIRO, T.. **A study on the action of non-gaussian noise on a brownian particle**. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 391(15):3816 – 3827, 2012.
- [36] MORGADO, W. A. M.; DUARTE QUEIRÓS, S. M.. **Role of the nature of noise in the thermal conductance of mechanical systems**. Phys. Rev. E, 86:041108, Oct 2012.
- [37] MORGADO, W. A. M.; QUEIRÓS, S. M. D.. **Thermostatistics of small nonlinear systems: Poissonian athermal bath**. Phys. Rev. E, 93:012121, Jan 2016.
- [38] CANDIDO, M.. **Problemas em Condutividade Térmica em Cadeias Harmônicas e Não-Harmônicas**. PhD thesis, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2017.

- [39] KANAZAWA, K.; SAGAWA, T. ; HAYAKAWA, H.. **Stochastic energetics for non-gaussian processes**. Phys. Rev. Lett., 108:210601, May 2012.
- [40] KANAZAWA, K.; SAGAWA, T. ; HAYAKAWA, H.. **Heat conduction induced by non-gaussian athermal fluctuations**. Phys. Rev. E, 87:052124, May 2013.
- [41] KANAZAWA, K.; SANO, T. G.; SAGAWA, T. ; HAYAKAWA, H.. **Minimal model of stochastic athermal systems: Origin of non-gaussian noise**. Phys. Rev. Lett., 114:090601, Mar 2015.
- [42] DHAR, A.; DANDEKAR, R.. **Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals**. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 418:49 – 64, 2015. Proceedings of the 13th International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics.
- [43] NAKAZAWA, H.. **On the lattice thermal conduction**. Progress of Theoretical Physics Supplement, 45:231, 1970.
- [44] RIEDER, Z.; LEBOWITZ, J. L. ; LIEB, E.. **Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state**. Journal of Mathematical Physics, 8(5):1073–1078, 1967.
- [45] DHAR, A.. **Heat conduction in the disordered harmonic chain revisited**. Phys. Rev. Lett., 86:5882–5885, Jun 2001.
- [46] DHAR, A.; ROY, D.. **Heat transport in harmonic lattices**. Journal of Statistical Physics, 125(4):801–820, 2006.
- [47] ROY, D.; DHAR, A.. **Heat transport in ordered harmonic lattices**. Journal of Statistical Physics, 131(3):535–541, 2008.
- [48] FERMI, E.; PASTA, J. ; ULAM, S.. **Studies of nonlinear problems I, Los Alamos Report LA 1940, 1955**. In: Newell, A. C., editor, *REPRODUCED IN NONLINEAR WAVE MOTION*, Providence, RI, 1974. Amer. Math. Soc.
- [49] BERMAN, G. P.; IZRAILEV, F. M.. **The fermi-pasta-ulam problem: Fifty years of progress**. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 15(1):015104, 2005.
- [50] DAUXOIS, T.. **Fermi, pasta, ulam, and a mysterious lady**. Physics Today, 61(1):55–57, jan 2008.

- [51] FORD, J.. **The Fermi-Pasta-Ulam problem: Paradox turns discovery.** Physics Reports, 1992.
- [52] LEPRI, S.; LIVI, R. ; POLITI, A.. **Heat Conduction in Chains of Nonlinear Oscillators.** Physical Review Letters, 78(10):1896–1899, Mar. 1997.
- [53] LEPRI, S.; LIVI, R. ; POLITI, A.. **On the anomalous thermal conductivity of one-dimensional lattices.** Europhysics Letters (EPL), 43(3):271–276, Aug. 1998.
- [54] MAI, T.; DHAR, A. ; NARAYAN, O.. **Equilibration and universal heat conduction in fermi-pasta-ulam chains.** Phys. Rev. Lett., 98:184301, May 2007.
- [55] HU, B.; LI, B. ; ZHAO, H.. **Heat conduction in one-dimensional nonintegrable systems.** Phys. Rev. E, 61:3828–3831, Apr 2000.
- [56] PROSEN, T.; CAMPBELL, D. K.. **Momentum conservation implies anomalous energy transport in 1d classical lattices.** Phys. Rev. Lett., 84:2857–2860, Mar 2000.
- [57] LIVI, R.; PETTINI, M.; RUFFO, S. ; VULPIANI, A.. **Chaotic behavior in nonlinear hamiltonian systems and equilibrium statistical mechanics.** Journal of Statistical Physics, 48(314):539, 1987.
- [58] ESCANDE, D.; KANTZ, H.; LIVI, R. ; RUFFO, S.. **Self-consistent check of the validity of gibbs calculus using dynamical variables.** Journal of Statistical Physics, 76(1):605–626, 1994.
- [59] GIARDINÁ, C.; LIVI, R.; POLITI, A. ; VASSALLI, M.. **Finite thermal conductivity in 1d lattices.** Phys. Rev. Lett., 84:2144–2147, Mar 2000.
- [60] GENDELMAN, O. V.; SAVIN, A. V.. **Normal heat conductivity of the one-dimensional lattice with periodic potential of nearest-neighbor interaction.** Phys. Rev. Lett., 84:2381–2384, Mar 2000.
- [61] YANG, L.; HU, B.. **Comment on “normal heat conductivity of the one-dimensional lattice with periodic potential of nearest-neighbor interaction”.** Phys. Rev. Lett., 94:219404, Jun 2005.
- [62] GENDELMAN, O. V.; SAVIN, A. V.. **Gendelman and savin reply:.** Phys. Rev. Lett., 94:219405, Jun 2005.

- [63] LI, Y.; LI, N. ; LI, B.. Temperature dependence of thermal conductivities of coupled rotator lattice and the momentum diffusion in standard map. *The European Physical Journal B*, 88(7):182, 2015.
- [64] LI, Y.; LI, N.; TIRNAKLI, U.; LI, B. ; TSALLIS, C.. Thermal conductance of the coupled-rotator chain: Influence of temperature and size. *EPL (Europhysics Letters)*, 117(6):60004, 2017.
- [65] DAS, S. G.; DHAR, A.. Role of conserved quantities in normal heat transport in one dimension. *ArXiv e-prints*, Nov. 2014.
- [66] LEPRI, S.. Thermal transport in low dimensions: from statistical physics to nanoscale heat transfer, volumen 921. Springer, 2016.
- [67] ANTENEODO, C.; TSALLIS, C.. Breakdown of exponential sensitivity to initial conditions: Role of the range of interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 80:5313–5316, Jun 1998.
- [68] TAMARIT, F.; ANTENEODO, C.. Rotators with long-range interactions: Connection with the mean-field approximation. *Phys. Rev. Lett.*, 84:208–211, Jan 2000.
- [69] TSALLIS, C.. *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World*. Springer New York, 2009.
- [70] TOUCHETTE, H.. When is a quantity additive, and when is it extensive? *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 305(1):84 – 88, 2002. *Non Extensive Thermodynamics and Physical applications*.
- [71] CAMPA, A.; DAUXOIS, T. ; RUFFO, S.. Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *Physics Reports*, 480(3-6):57 – 159, 2009.
- [72] KAC, M.; UHLENBECK, G. E. ; HEMMER, P. C.. On the van der Waals Theory of the Vapor-Liquid Equilibrium. I. Discussion of a One-Dimensional Model. *Journal of Mathematical Physics*, 4(2):216, 1963.
- [73] GUPTA, S.; RUFFO, S.. The world of long-range interactions: A bird's eye view. *International Journal of Modern Physics A*, 32(09):1741018, 2017.

- [74] LEVIN, Y.; PAKTER, R.; RIZZATO, F. B.; TELES, T. N. ; BENETTI, F. P.. **Nonequilibrium statistical mechanics of systems with long-range interactions**. *Physics Reports*, 535(1):1 – 60, 2014. **Nonequilibrium statistical mechanics of systems with long-range interactions**.
- [75] MUKAMEL, D.. **Notes on the statistical mechanics of systems with long-range interactions**. *ArXiv e-prints*, May 2009.
- [76] BARRÉ, J.; MUKAMEL, D. ; RUFFO, S.. **Inequivalence of ensembles in a system with long-range interactions**. *Phys. Rev. Lett.*, 87:030601, Jun 2001.
- [77] YAMAGUCHI, Y. Y.; BARRÉ, J.; BOUCHET, F.; DAUXOIS, T. ; RUFFO, S.. **Stability criteria of the vlasov equation and quasi-stationary states of the hmf model**. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 337(1):36 – 66, 2004.
- [78] ANTENEODO, C.; VALLEJOS, R. O.. **Vlasov stability of the hamiltonian mean field model**. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 344(3):383 – 392, 2004. *Proceedings of the International Workshop on 'Trends and perspectives in extensive and non-extensive statistical mechanics', in honor of the 60th birthday of Constantino Tsallis*.
- [79] LATORA, V.; RAPISARDA, A. ; RUFFO, S.. **Superdiffusion and out-of-equilibrium chaotic dynamics with many degrees of freedoms**. *Phys. Rev. Lett.*, 83:2104–2107, Sep 1999.
- [80] MOYANO, L. G.; ANTENEODO, C.. **Diffusive anomalies in a long-range hamiltonian system**. *Phys. Rev. E*, 74:021118, Aug 2006.
- [81] MUKAMEL, D.; RUFFO, S. ; SCHREIBER, N.. **Breaking of ergodicity and long relaxation times in systems with long-range interactions**. *Phys. Rev. Lett.*, 95:240604, Dec 2005.
- [82] BOUCHET, F.; BARRÉ, J.. **Statistical mechanics of systems with long range interactions**. *Journal of Physics: Conference Series*, 31(1):18, 2006.
- [83] ANTONI, M.; RUFFO, S.. **Clustering and relaxation in hamiltonian long-range dynamics**. *Phys. Rev. E*, 52:2361–2374, Sep 1995.
- [84] ROCHA FILHO, T. M.; AMATO, M. A.; SANTANA, A. E.; FIGUEIREDO, A. ; STEINER, J. R.. **Dynamics and physical interpretation of**

- quasistationary states in systems with long-range interactions. Phys. Rev. E, 89:032116, Mar 2014.
- [85] CAMPA, A.; GIANANTI, A. ; MORONI, D.. Canonical solution of a system of long-range interacting rotators on a lattice. Phys. Rev. E, 62:303–306, Jul 2000.
- [86] CAMPA, A.; GIANANTI, A. ; MORONI, D.. Canonical solution of classical magnetic models with long-range couplings. Journal of Physics A: Mathematical and General, 36(25):6897, 2003.
- [87] ALLEN, M.; TILDESLEY, D.. Computer Simulation of Liquids. Oxford Science Publ. Clarendon Press, 1989.
- [88] PATERLINI, M.; FERGUSON, D. M.. Constant temperature simulations using the langevin equation with velocity verlet integration. Chemical Physics, 236(1-3):243 – 252, 1998.
- [89] YANG, L.; GRASSBERGER, P.. Are there really phase transitions in 1-d heat conduction models? eprint arXiv:cond-mat/0306173, June 2003.
- [90] PEREIRA, E.; FALCAO, R.. Normal heat conduction in a chain with a weak interparticle anharmonic potential. Phys. Rev. Lett., 96:100601, Mar 2006.
- [91] GENDELMAN, O. V.; SAVIN, A. V.. Nonstationary heat conduction in one-dimensional chains with conserved momentum. Phys. Rev. E, 81:020103, Feb 2010.
- [92] ZAOUI, H.; PALLA, P. L.; CLERI, F. ; LAMPIN, E.. Length dependence of thermal conductivity by approach-to-equilibrium molecular dynamics. Phys. Rev. B, 94:054304, Aug 2016.
- [93] LAMPIN, E.; PALLA, P. L.; FRANCIOSO, P.-A. ; CLERI, F.. Thermal conductivity from approach-to-equilibrium molecular dynamics. Journal of Applied Physics, 114(3):033525, 2013.
- [94] BAGCHI, D.; TSALLIS, C.. Long-ranged fermi–pasta–ulam systems in thermal contact: Crossover from q-statistics to boltzmann–gibbs statistics. Physics Letters A, p. –, 2017.
- [95] OLIVARES, C.; ANTENEODO, C.. Role of the range of the interactions in thermal conduction. Phys. Rev. E, 94:042117, Oct 2016.

- [96] DAUXOIS, T.; PEYRARD, M. ; RUFFO, S.. **The fermi–pasta–ulam ‘numerical experiment’: history and pedagogical perspectives.** European Journal of Physics, 26(5):S3, 2005.
- [97] PETTINI, M.; CASETTI, L.; CERRUTI-SOLA, M.; FRANZOSI, R. ; COHEN, E. G. D.. **Weak and strong chaos in fermi–pasta–ulam models and beyond.** Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 15(1):015106, 2005.
- [98] YOSHIDA, H.. **Construction of higher order symplectic integrators.** Physics Letters A, 150(5):262 – 268, 1990.
- [99] LI, N.; LI, B. ; FLACH, S.. **Energy Carriers in the Fermi-Pasta-Ulam beta Lattice: Solitons or Phonons?** Physical Review Letters, 105(5):054102, 2010.
- [100] LI, Y.; LIU, S.; LI, N.; HÄNGGI, P. ; LI, B.. **1d momentum-conserving systems: the conundrum of anomalous versus normal heat transport.** New Journal of Physics, 17(4):043064, 2015.
- [101] NARAYAN, O.; RAMASWAMY, S.. **Anomalous heat conduction in one-dimensional momentum-conserving systems.** Phys. Rev. Lett., 89:200601, Oct 2002.
- [102] LIU, S.; HÄNGGI, P.; LI, N.; REN, J. ; LI, B.. **Anomalous heat diffusion.** Phys. Rev. Lett., 112:040601, Jan 2014.