

El intercambio de energía entre sistemas hamiltonianos desde la teoría del coarse-graining

Marc Meléndez*, Pep Español

Departamento de Física Fundamental, UNED

c/ Senda del Rey, 9

28080 Madrid

*mmelendez@fisfun.uned.es

Abstract: La técnica de operadores de proyección [1] permite obtener las ecuaciones de evolución para las energías macroscópicas de un conjunto de sistemas hamiltonianos clásicos en interacción. Si la hipótesis de variables lentas es válida, la evolución teórica se puede aproximar mediante una ecuación diferencial en derivadas parciales. Presentamos a continuación dos ejemplos sencillos: una mezcla de gases ideales, que cumple la hipótesis de variables lentas, y una pareja de cadenas de Fermi-Pasta-Ulam [2], que no.

Interacciones entre sistemas hamiltonianos clásicos

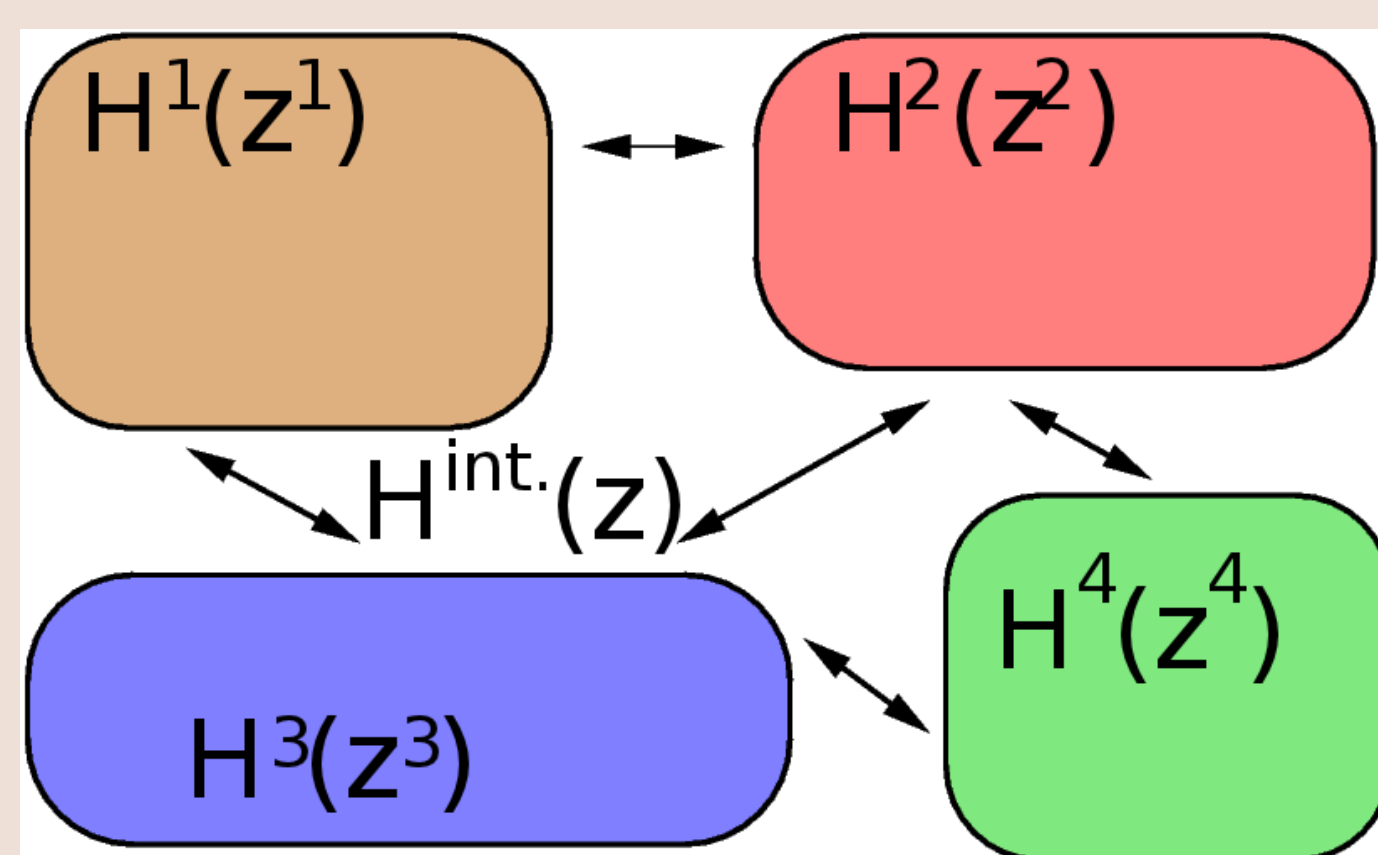
Cuando se ponen en contacto varios sistemas que, por lo demás, están aislados del resto del universo, la termodinámica predice y permite calcular un estado de equilibrio final que depende sólo de unas pocas variables macroscópicas. Sin embargo, no permite describir el proceso dinámico que lleva a estos estados de equilibrio.

Para estudiar esta evolución, partimos de un hamiltoniano para el conjunto de sistemas,

$$H(z) = \sum_{j=1}^n H^j(z^j) + H^{int.}(z).$$

El punto z^j en el espacio de fases representa las coordenadas y momentos microscópicos correspondientes al sistema j -ésimo, $z = (z^1, \dots, z^n)$, H^j es igual a la energía interna de j y $H^{int.}$ es la energía de interacción entre sistemas.

En la práctica, es imposible determinar el estado microscópico preciso en el que se encuentra un sistema macroscópico, y tenemos que conformarnos con una descripción probabilística. Por tanto, definimos una probabilidad ρ de que el sistema se encuentre en cierto punto z del espacio de fases.



La densidad de probabilidad $\rho(z)$ evoluciona en el tiempo de acuerdo con la ecuación de Liouville:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}.$$

Denotaremos mediante $P(e, t)$ la probabilidad macroscópica de que $H^1(z^1) = e_1, H^2(z^2) = e_2, \dots, H^n(z^n) = e^n$. Partiendo de la ecuación de Liouville, la técnica de operadores de proyección [1] permite obtener una ecuación integrodiferencial exacta para la evolución de la probabilidad macroscópica $P(e, t)$.

La hipótesis de variables lentas

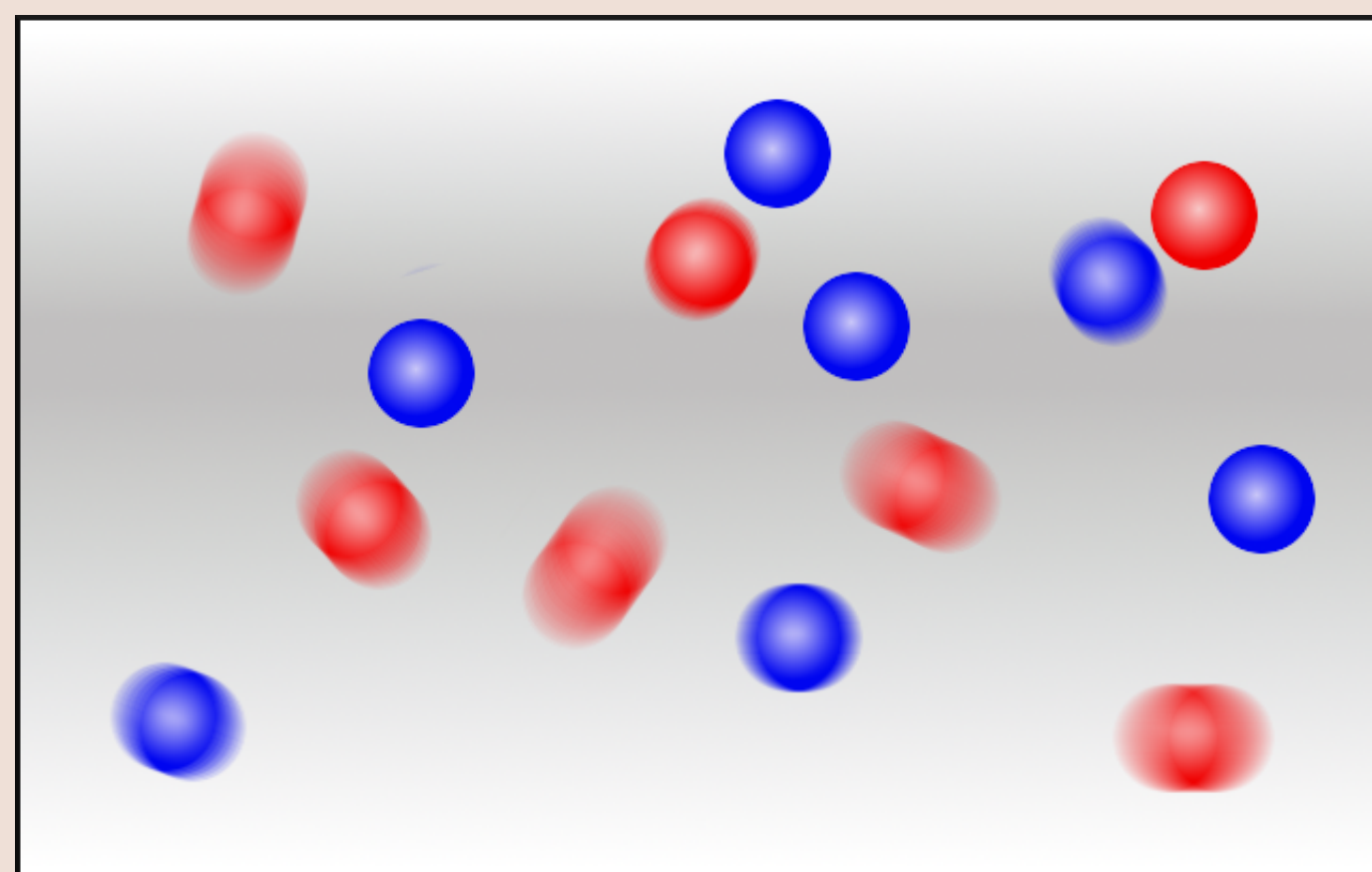
Si el cambio de las energías macroscópicas es mucho más lento que las variaciones de las variables microscópicas, entonces la ecuación integrodiferencial para $P(e, t)$ se convierte en una ecuación de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial P(e, t)}{\partial t} = - \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial e_j} v_j(e) P(e, t) + \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial e_j} \Omega(e) D_{jk}(e) \frac{\partial}{\partial e_k} P(e, t),$$

donde las funciones $\Omega(e)$, $v_j(e)$ y $D_{jk}(e)$ están todas definidas en términos de la dinámica microscópica de equilibrio.

Mezcla Homogénea de gases ideales

La ecuación para $P(e, t)$ se puede aplicar al problema académico de una mezcla homogénea de dos gases ideales diluidos que inicialmente están a temperaturas diferentes. En este caso, la ecuación de Fokker-Planck para la energía e de uno de los gases es



$$\frac{\partial P(e, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial e} \left[D(e) \left(\frac{\partial P(e, t)}{\partial e} - \left(\frac{1}{T^1(e)} - \frac{1}{T^2(E-e)} \right) P(e, t) \right) \right].$$

T^1 y T^2 son las temperaturas de los gases, y E es la energía total de la mezcla.

La probabilidad $P(e, t)$ calculada mediante la resolución (numérica) de la ecuación de Fokker-Planck se puede comparar con los resultados de las simulaciones de dinámica molecular. En la figura, se muestra el acuerdo entre la predicción teórica y una realización del proceso, calculado numéricamente a partir de un algoritmo para gases de esferas duras.

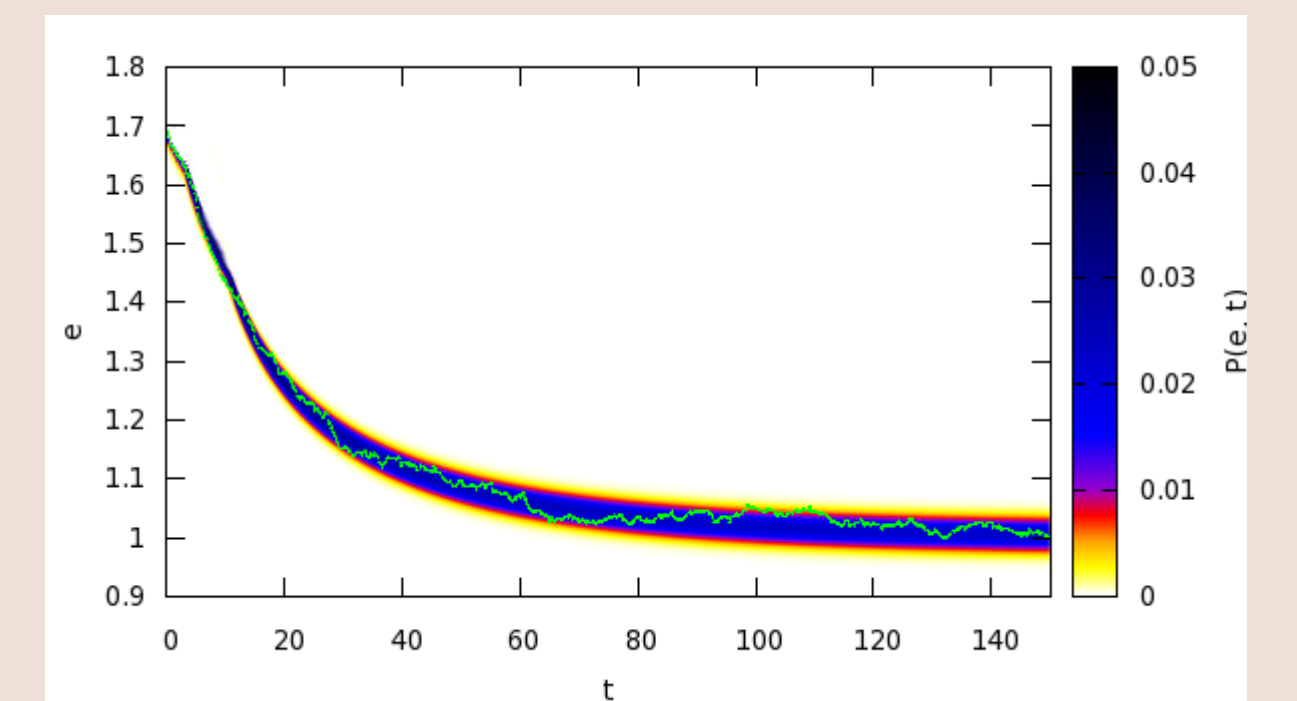


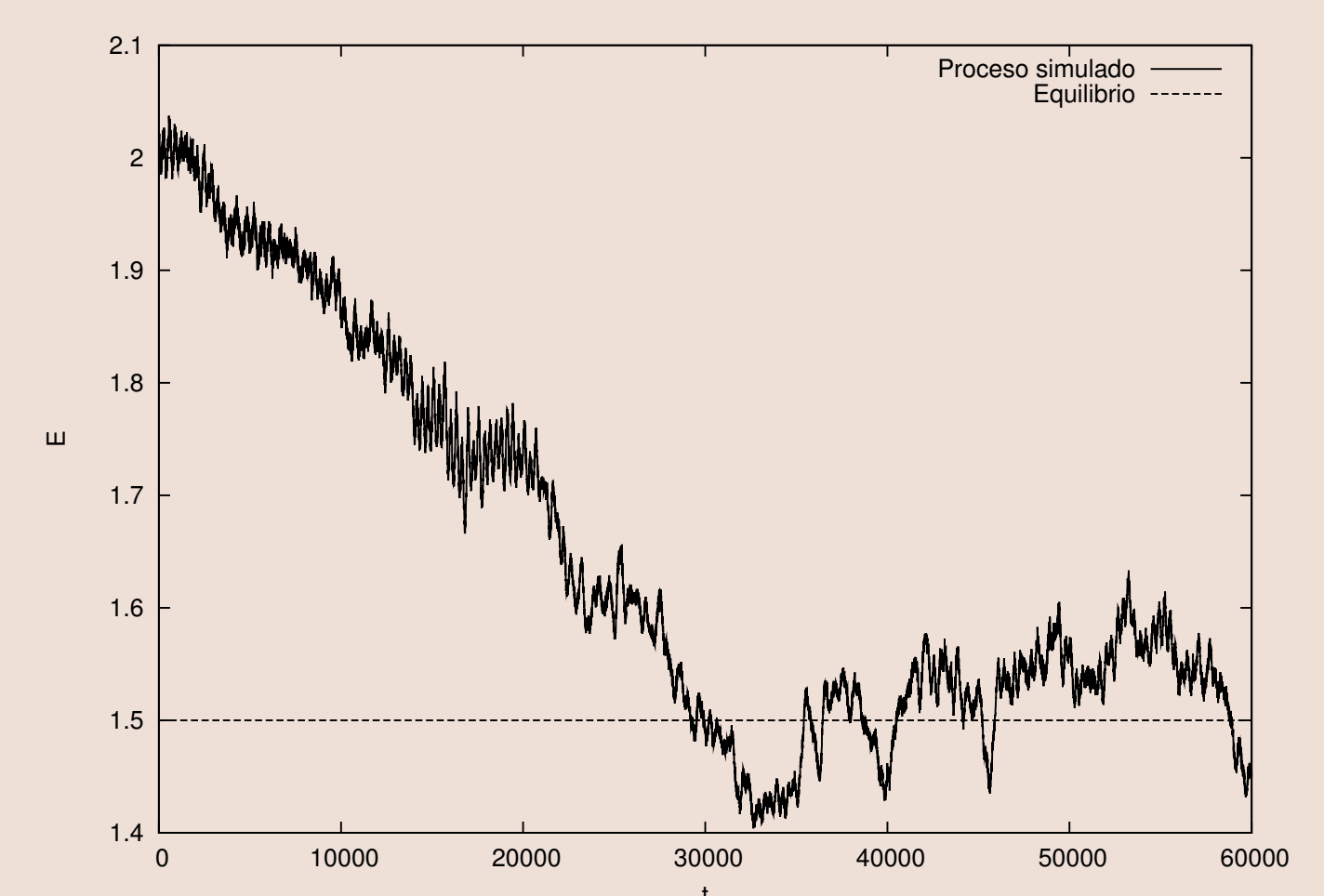
Figura: $P(e, t)$ calculada con la ecuación de Fokker-Planck, comparada con una realización del proceso de equilibrado (en verde).

Intercambio de energía entre cadenas de Fermi-Pasta-Ulam

La hipótesis de variables lentas no se cumple cuando existen gradientes térmicos internos apreciables o cuando los sistemas realizan trabajo macroscópico unos sobre otros, pues en estos casos no es suficiente conocer las energías internas para determinar la transferencia de calor, sino que hay que tener en cuenta la "memoria", es decir, la transferencia de calor en un instante depende de la evolución del sistema hasta ese instante.

Frecuentemente, es difícil anticipar la presencia de estos fenómenos con memoria. Por ejemplo, el intercambio de energía entre dos cadenas de osciladores acoplados de Fermi-Pasta-Ulam [2] presenta una tendencia al equilibrio muy diferente de la que predice la ecuación de Fokker-Planck (ilustrada en el apartado anterior con el ejemplo de la mezcla de gases), como se puede comprobar en la gráfica, que presenta la evolución de e para una de las cadenas.

Aun cuando se permite que las cadenas alcancen el equilibrio por separado a temperaturas diferentes (asegurando que ambas se encuentran en un régimen ergódico) y se deja que interactúen después global y débilmente, el intercambio energético se desarrolla como un proceso con memoria. La causa de este fenómeno se encuentra en la energía de los modos de vibración más lentos, que pasa de una cadena a otra varias veces antes de distribuirse entre otros modos de vibración. Esto señala la presencia de trabajo macroscópico entre las cadenas.



Referencias

- [1] H. GRABERT: *Projection Operator Techniques in Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Berlin-Heidelberg-New York, Springer-Verlag (1982).
- [2] G. P. BERMAN, M. IZRAILEV: *The Fermi-Pasta-Ulam problem: Fifty years of progress*, *Chaos* **15**, 015104 (2005).