

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

Marc Meléndez Schofield*

Dpto. Física Fundamental UNED. Senda del Rey, 9, 28040 Madrid

Pep Español Garrigós

Dpto. Física Fundamental UNED. Senda del Rey, 9, 28040 Madrid

Cuando varios sistemas hamiltonianos intercambian energía mediante una interacción débil, se produce una tendencia al equilibrio térmico si la dinámica presenta la propiedad de *mixing*¹. Utilizando la técnica de operadores de proyección de Zwanzig² se puede escribir una ecuación de evolución para la probabilidad $P(e, t)$ de que cada uno de los sistemas en interacción tenga una energía dada.

En el caso de que se cumpla además la *hipótesis de variables lentas*, esta ecuación para la probabilidad se convierte en una *ecuación de Fokker-Planck*.

$$\frac{\partial P(e, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial e_j} v_j(e) P(e, t) + \frac{\partial}{\partial e_j} \Omega(e) D_{jk}(e) \frac{\partial}{\partial e_k} P(e, t),$$

donde las funciones $\Omega(e)$, $v_j(e)$ y $D_{jk}(e)$ están definidas en términos de la dinámica microscópica. Las predicciones de esta ecuación se ajustan a las simulaciones de dinámica molecular si los sistemas cumplen la hipótesis antes mencionada (véase el ejemplo de la figura 1).

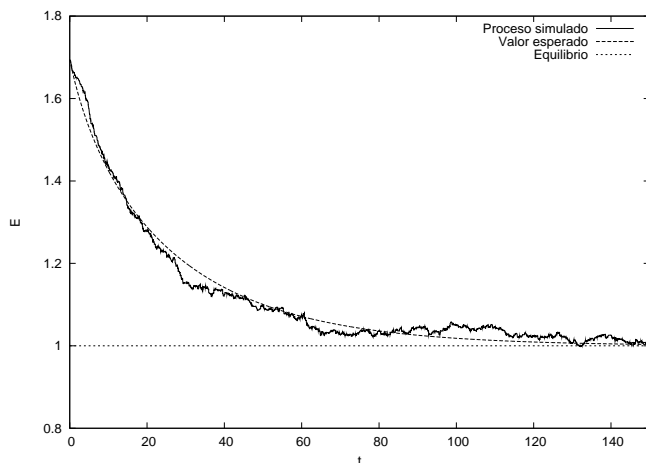


FIG. 1. Energía cinética media por partícula frente al tiempo de un gas de esferas duras que se equilibra con otro de las mismas características pero menor temperatura (*línea continua: simulación de dinámica molecular; línea discontinua: valor esperado calculado con la ecuación de Fokker-Planck; puntos: energía correspondiente al estado de equilibrio*).

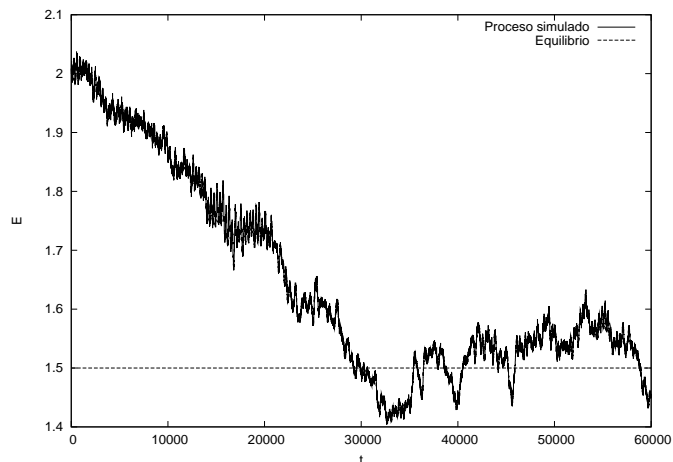


FIG. 2. Energía cinética media por partícula frente al tiempo de una cadena de osciladores no lineales que se equilibra con otra de las mismas características pero menor temperatura. La dinámica difiere apreciablemente de la que predice la ecuación de Fokker-Planck.

Sin embargo, si existen gradientes térmicos apreciables en el seno de los sistemas en interacción o si unos sistemas realizan trabajo macroscópico sobre otros, es decir, si no se cumple la hipótesis de variables lentas, entonces no se puede derivar la ecuación de Fokker-Planck mencionada antes y se deben tener en cuenta los efectos de memoria. Incluso si los sistemas han alcanzado el equilibrio térmico por separado y se permite que intercambien energía con un acoplamiento global y débil, es posible que aparezcan dinámicas no markovianas en la tendencia al equilibrio térmico. Nuestro análisis del equilibrado térmico entre dos sistemas de Fermi-Pasta-Ulam reveló este tipo de proceso no markoviano debido al intercambio de energía entre los modos de vibración más lentos de ambos sistemas (figura 2).

* mmelendez@fisfun.uned.es

¹ J. ESPAÑOL, F.J. DE LA RUBIA, and J.M. RUBÍ, *Mixing and Equilibrium Probability Densities in Classical Statistical Mechanics*, Physica A 187, 589 (1992).

² GRABERT, H. *Projection Operator Techniques in Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Springer Tracts in Modern Physics, 95 (1982).