

# ESTUDOS EXATOS DA CONDUÇÃO TÉRMICA NA CADEIA HARMÔNICA UNIDIMENSIONAL

**Aluno: Diogo Gaia**

**Orientador: Welles Antônio Martinez Morgado**

## Introdução

O problema da condução térmica baseada em dinâmicas microscópicas, apesar de toda uma extensa literatura sobre o tema, ainda é um problema sob debate [1]. A Lei empírica de Fourier, que determina que o fluxo local de calor  $\mathbf{J}$  é igual em módulo ao produto do coeficiente de condutividade térmica  $\lambda$  pelo gradiente de temperatura. Este coeficiente é uma propriedade intensiva dos materiais e independe das dimensões físicas dos mesmos, mas podendo depender da temperatura e pressão. A conservação microscópica da energia implica uma equação de continuidade entre o fluxo de calor  $J$  e variações da densidade de energia térmica proporcionais à variações da temperatura,  $d\rho = c dT$ . Assim temos  $\partial\rho/\partial t = -\text{div } \mathbf{J}$  e portanto a temperatura, e por conseguinte a energia térmica, obedece uma equação de difusão:

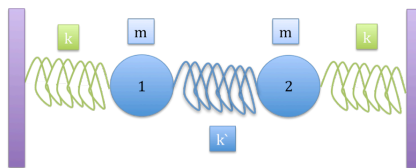
$$\partial T/\partial t = D \nabla^2 T,$$

onde  $D = \lambda/c$ . Assim, qualquer modelo que pretenda representar um sistema que obedeça a lei de Fourier deve ser capaz de espalhar os fluxos microscópicos de calor de modo eficiente. Em outras palavras, a energia térmica deve se espalhar de modo difusivo (e irreversível) ao longo do sistema representado pelo modelo. Isto leva às propriedades usuais da condutividade térmica de materiais tais como o fluxo total de calor ao longo do eixo principal de um cilindro submetido a um gradiente externo de temperatura (não importando a secção reta do mesmo). Podemos verificar que o fluxo total de calor será inversamente proporcional ao comprimento desse cilindro, quando  $\lambda$  não depende das dimensões do material. Um gradiente uniforme de temperatura se estabelece então ao longo deste cilindro. Isto é essencial para caracterizar o material como obedecendo à Lei de Fourier.

Uma idéia inicial, aparentemente boa, é utilizar um sistema de cadeia unidimensional de massas acopladas a osciladores harmônicos, ou seja, modelos do tipo massa-mola com energia potencial quadrática. Para efetuar a condução de calor ao longo do sistema, uma extremidade é acoplada a um termostato de temperatura  $T_1$ , enquanto que a outra se encontra acoplada a um outro termostato à temperatura  $T_2 > T_1$ . Este acoplamento consiste em geral de termos de força de Langevin [2] agindo em cada partícula das extremidades, e termos dissipativos correspondentes, de acordo com o teorema de Mori [3]. Contudo, um grande inconveniente deste modelo é que a energia é nele transportada a maneira de uma onda, ou seja, de forma balística e não difusiva. Uma consequência imediata é que o fluxo total de calor depende da diferença  $T_2 - T_1$ , mas não exatamente do inverso do comprimento total do sistema  $L$  [4]. Em outras palavras,  $\lambda$  depende de  $L$  e este modelo não obedece à Lei de Fourier.

Fica claro que um sistema de molas não lineares acoplando massas uniformes ao longo de uma cadeia unidimensional (modelo que, via simulação computacional, nos dá o comportamento esperado do sistema) é altamente complexo do ponto de vista de um

tratamento analítico. Contudo o interesse em uma solução analítica deste modelo é bastante alto. Podemos dizer que este é um problema na da fronteira da investigação da física matemática.



*Ilustração de uma cadeia linear curta a 2 partículas*

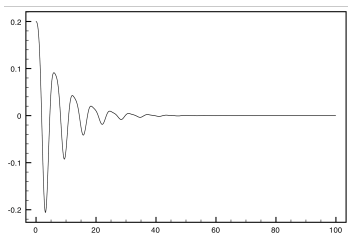
### Metodologia

Foi feita uma abordagem numérica, onde foram produzidos códigos na linguagem C para reproduzir o comportamento do sistema ao longo do tempo. Uma abordagem do tipo Euler foi utilizada para a evolução do sistema:

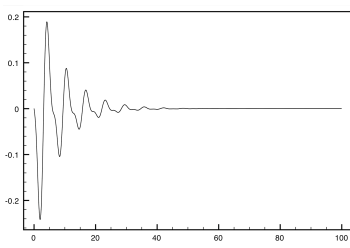
$$\begin{aligned} x(t+\Delta t) &= x(t) + v(t) \Delta t + \frac{1}{2} a \Delta t^2 \\ v(t+\Delta t) &= v(t) + a(t) \Delta t \\ a(t+\Delta t) &= F_{\text{Resultante}}(t + \Delta t) / m \end{aligned}$$

### Resultados e Discussões

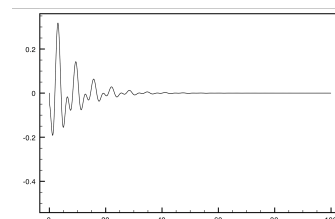
Utilizamos esta técnica para estudar a evolução no tempo de um sistema oscilante com e sem amortecimento cujos resultados para posições velocidades e acelerações mostramos a seguir para o caso de duas partículas acopladas.



Posição partícula 1



Velocidade partícula 1



Aceleração partícula 1

Para reproduzir os efeitos térmicos sobre as partículas utilizamos a equação de Langevin

$$m a = - \gamma v - k x + \eta(t)$$

onde  $\eta(t)$  é um ruído térmico que representa a interação do sistema com um banho térmico a

uma temperatura T. Tecnicamente temos

$$\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2 \gamma T \delta(t-t'),$$

onde  $\delta(t)$  é a função delta de Dirac. O ruído térmico pode ser obtido via o teorema do limite central ao somarmos uma quantidade de variáveis aleatórias  $\xi$  distribuídas independentemente em um intervalo  $(-A, A)$ . O limite A é proporcional à raiz quadrada da temperatura T. As variáveis  $\xi$  são geradas utilizando a rotina `ran1()`. Esta soma está representada abaixo.

$$\xi_t \cdot \Delta t = \int_t^{t+\Delta t} \eta(t') dt'$$

$$\langle \xi_t \rangle = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \langle \eta(t') \rangle dt' = 0$$

$$\begin{aligned} \langle \xi_{t_1} \xi_{t_2} \rangle &= \frac{1}{\Delta t^2} \int_{t_1}^{t_1+\Delta t} dt' \int_{t_2}^{t_2+\Delta t} dt'' \langle \eta(t') \eta(t'') \rangle \\ &= \frac{1}{\Delta t^2} \int_{t_1}^{t_1+\Delta t} dt' \int_{t_2}^{t_2+\Delta t} 2 \gamma T \delta(t' - t'') dt'' \end{aligned}$$

When  $t_1 = t_2$ ,

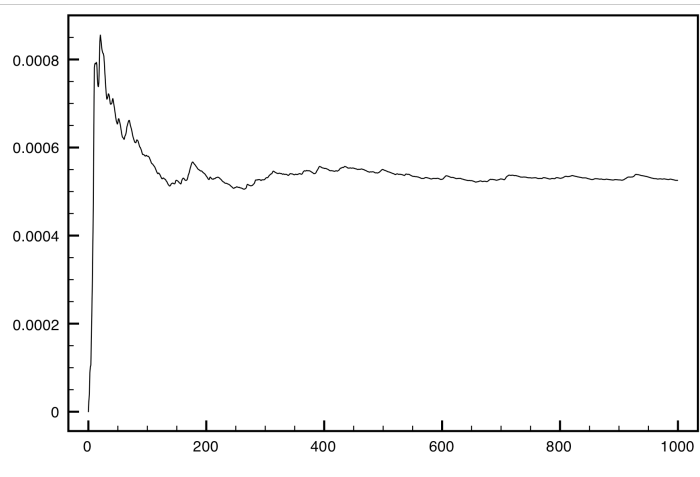
$$\sigma_{\xi_t}^2 = \langle \xi_t^2 \rangle = \frac{2 \gamma T}{\Delta t^2} \int_{t_1}^{t_1+\Delta t} dt' = \frac{2 \gamma T}{\Delta t}$$

$$\xi_t = \sum_{n=1}^{N_T} A Y_n,$$

Podemos então estudar a condutância térmica do sistema mecânico descrito na introdução, cujo resultado exato é conhecido na referencia [4].

A condutância térmica é o fator de proporcionalidade entre o calor conduzido de uma partícula a outra e a diferença de temperatura entre as duas.

Suporemos que cada partícula tem um ruído térmico associado, cujas temperaturas são diferentes, dado que a igualdade de temperaturas implica no equilíbrio e no fluxo de calor nulo. Assim, podemos começar com o sistema totalmente em repouso e injetar energia via calor até a Energia do sistema atingir uma situação de estado estacionário (abaixo em unidades arbitrárias):



Energia x Tempo

O fluxo de energia é definido como a média da corrente  $J_{12}$  dada por:

$$J_{12} = -k' (x_1 - x_2) (v_1 + v_2)/2$$

Portanto temos

$$\langle J_{12} \rangle = \kappa \Delta T,$$

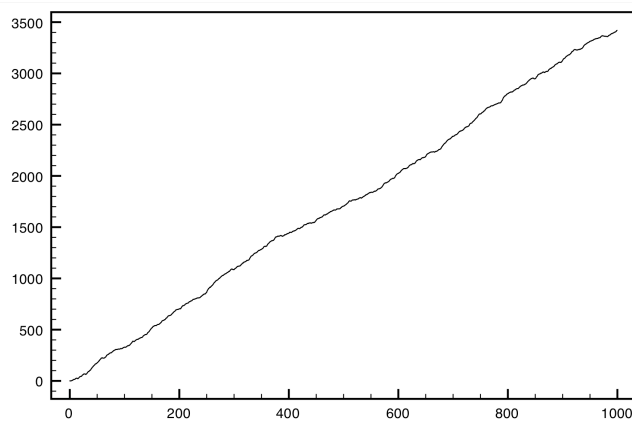
onde [4]

$$\kappa = \frac{k^2 \gamma}{2[mk^2 + \gamma^2(k + k')]},$$

é a condutância térmica do sistema. Para efeitos de comparação, escolhemos dois conjuntos de temperaturas  $(T_1, T_2)$ ; a) (1.0 , 1.5); b) (1.0 , 2.0), cujo é o dobro do anterior.

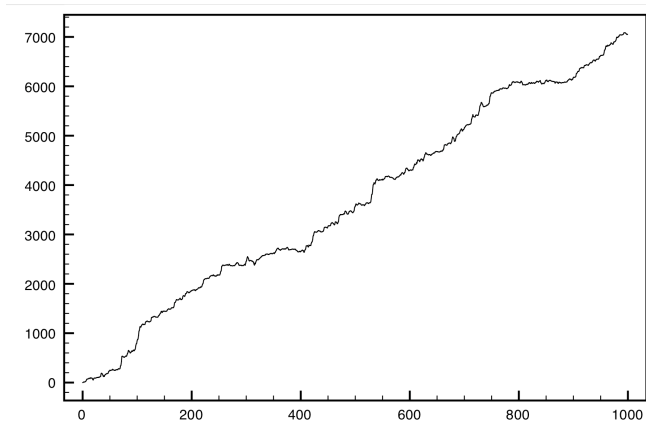
Simulando o sistema, obtemos dados em unidades arbitrárias como segue.

Caso a):



Calor x Tempo (média de 20 simulações)

Neste caso o coeficiente angular é aproximadamente 3.4 quando  $\Delta T = 0.5$ .



Caso b):

Calor x Tempo (1 simulação)

Neste caso o coeficiente angular é aproximadamente 7.0 quando  $\Delta T = 1.0$ . Assim verificamos que ao dobrarmos a diferença de temperatura dobramos o fluxo de calor.

### Conclusões

Estamos desenvolvendo o método para simulação de uma cadeia não linear de molas e massas, Até o momento fomos capazes de obter o comportamento no caso linear e obter resultados muito consistentes com a condução térmica calculada analiticamente [4].

Nosso objetivo em breve será generalizar estes resultados para um sistema não-linear (não-harmônico) de molas.

### Referências

1. F. Bonetto, J. L. Lebowitz, and J. Lukkarinen, **J. Stat. Phys.** **116**, 783 (2004).
2. N. C. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, 1992.
3. R. Zwanzig, in: W.E. Broton (Ed.), *Lectures in Theoretical Physics*, Boulder, vol. 3, Interscience, New York, 1961; H. Mori, **Phys. Rev.** v. 112 p. 1892, 1958.
4. MORGADO, Welles Antônio Martinez e SOARES-PINTO, Diogo Oliveira, *Exact time-averaged thermal conductance for small systems: Comparison between direct calculation and Green-Kubo formalism*. **Physical Review E**, v.365, p. 289, 2009.