**Condução de calor em cadeias de osciladores harmônicos com massas alternadas**

Romero Barbieri Solha

Abril de 2010

# Condução de calor em cadeias de osciladores harmônicos com massas alternadas

**Romero Barbieri Solha**

**Orientador: Prof. Emmanuel Araújo Pereira**

Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do grau de mestre em Física.

Abril de 2010

# Agradecimentos

Ao Emmanuel, pela orientação, oportunidade e conversas jogadas fora.

Aos meus professores, que em várias vezes foram ótimos companheiros: Terra, que foi bem mais que um orientador desde o início; Israel (esse será o único momento em que admitirei as vantagens da Álgebra); Bismarck, pela independência que me foi dada, uma das qualidades que mais admiro em mim; Dickman, por ter oferecido o curso de física mais bonito que já fiz; Schor, pelas ótimas aulas e pelos “causos”, me orgulha muito ter sido seu aluno; Rodney; Paulo Antônio; Armando; Cupertino; Seme; Bernardo; Remy; Mário Jorge; Maurício Tonescu e Luis; Edmar, França e Mario Sérgio, bons camaradas.

Aos meus irmãos de orientação: Custela, pela orientação e diversão; Humberto, pela orientação; Ricardo, pelas ótimas horas perdidas nos corredores; e o caçula Leonardo.

Aos funcionários dos departamentos de física e matemática, em geral solícitos e educados, em especial: Andréa e Valdney; as meninas da Biblioteca, Shirley e Clarice.

Aos meus pais por todo suporte, minha avó Diva (que já conhecia o problema da braquistócrona), e à família (que vai bem além do sangue, Cida é um exemplo).

Aos camaradas, tanto de curso(s) quanto da vida, destacarei alguns: Malfeitões, nem tenho palavras; Black Electron Poker Club (Breno, Diodão, Dudu, Edmilson, Kaká, Lorão, Magas e Mumuca), pelos excessos, tanto na farra quanto no trabalho; Wilson, Junin e Glaucin; Jesus, meu futuro colaborador, pelos bons momentos de estudo e diversão; La Venganza Marcha; Turma de 2004 (Diego, Gustavo, Harry, Luiz, Priscila,...), por ser maioria; Quarta no Stad Jever (Batata, Diagonale, Dutty, Júlia, Pablo,...); Anasbisgouslly, Bretas e Fábio, quase um divã; Pedro Peste, por toda ajuda; Helvécio, seu arquivo LaTeX se tornou isso; Bodinhos (a lista é longa).

Desagradecimentos ao Edmilson; e ao Nilmar, pelas festas, e som eternamente no *repeat*.

Agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro.

*"More seriously I took things*

*The harder the rules became"*

Megadeth

*"Cause the truth about the world is that crime does pay"*

The Offspring

# Resumo

Tendo em mente a investigação analítica de propriedades da condutividade térmica com possíveis aplicações no mecanismo de controle do fluxo de calor, neste trabalho são apresentados estudos analíticos detalhados de um modelo microscópico simples. Alguns resultados da literatura são revisados: basicamente aqueles sobre cadeias de osciladores harmônicos com dinâmica hamiltoniana e conservativa, com reservatórios térmicos sendo modelados por ruídos estocásticos. Como resultado principal, é mostrado que em uma cadeia de osciladores harmônicos com massas alternadas e banhos térmicos apenas nas extremidades, o fluxo de calor decai com o inverso do quadrado da diferença entre as massas, em contraste com a cadeia de partículas de mesma massa, onde esse decai com o inverso da massa. Resultados para a cadeia com reservatórios auto-consistentes, outro modelo de comportamento similar, são reapresentados, com o intuito de mostrar que esse comportamento da condutividade térmica em função das massas das partículas pode ser uma propriedade geral, válido em sistemas diversos.

# Abstract

In order to search for nontrivial properties of the thermal conductivity with possible applications in the mechanism of heat flow control, this work address the detailed analytical study of a simple microscopic model. It reviews some results from the literature: mainly chains of harmonic oscillators with Hamiltonian and conservative dynamics, with thermal reservoirs modeled by stochastic noises. As a main result it is shown that, in harmonic chains of oscillators with alternate masses and thermal baths at the boundaries only, the heat flow decays as the inverse of the square of the mass difference, in contrast with the homogeneous chain, where it decays with the inverse of the mass. It recalls some results for the chain with self-consistent inner reservoirs, another model in which a similar behavior of the heat conduction in function of the particle masses occur, in order to show that it may be a general property, valid on various systems.

# Sumário

# Capítulo 1

# Introdução

A mecânica estatística tem como objetivo explicar propriedades macroscópicas de um sistema a partir da interação entre os seus constituintes microscópicos. Desenvolvida no fim do século XIX (com Boltzmann, Gibbs e Maxwell, entre seus principais fundadores), essa caracteriza muito bem sistemas em equilíbrio macroscópico: estados em que grandezas como temperatura, densidade, pressão e volume, não variam com o tempo. O tratamento de sistemas em equilíbrio termodinâmico é uma área bem fundamentada e com grande êxito na explicação de diversos fenômenos, tais como transições de fase [1]. A teoria de equilíbrio se fundamenta na hipótese ergódica. Essa hipótese diz que médias temporais, das grandezas desejadas, podem ser substituídas por médias em certos *ensembles* [1], permitindo a obtenção de propriedades macroscópicas de sistemas em equilíbrio, sem a necessidade de resolver a dinâmica microscópica de seus constituintes.

Nos fenômenos de não-equilíbrio estão ausentes princípios gerais como a hipótese ergódica. Contrastando com a mecânica estatística de equilíbrio, onde um estado é completamente caracterizado pela distribuição de Boltzmann-Gibbs, não é conhecida, até o momento, uma teoria que permita caracterizar estados estacionários de não-equilíbrio – supondo a existência e unicidade do mesmo, um problema ainda em aberto – de um sistema fora do equilíbrio termodinâmico.

Em particular, o entendimento das propriedades da condução de calor em sólidos, a partir de modelos microscópicos da matéria, é um problema fundamental que ainda desafia a física de não-equilibrio. Como exemplo, a derivação por primeiros princípios da lei de Fourier sobre a condução de calor é um problema em aberto. Apesar de ser válida para diversos sistemas físicos conhecidos, essa ainda é uma lei fenomenológica [2]. Enunciada em 1822 (Théorie analytique de la chaleur) por Jean Baptiste Joseph Fourier, a lei de Fourier diz que o fluxo de calor $\mathcal{F}(\mathbf{x}, t)$, no ponto $\mathbf{x}$ e tempo $t$, em um sistema é proporcional ao gradiente de temperatura $\nabla T(\mathbf{x}, t)$:

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}, t) = -\kappa(T, \mathbf{x}) \nabla T(\mathbf{x}, t) \ . \tag{1.1}$$

A constante de proporcionalidade $\kappa(T, \mathbf{x})$ é chamada de condutividade térmica.

Desde o pioneiro trabalho de Debye [3], a maior parte dos modelos microscópicos usados na descrição da condução de calor são sistemas de osciladores anarmônicos. Existem muitos trabalhos devotados ao tema, quase todos (no caso anarmônico) por meio de simulações computacionais, e algumas vezes, entre os interessantes resultados, contradições aparecem. Infelizmente, uma investigação analítica precisa é um problema muito difícil – como observado pelos autores de [4], [5]: *"a rigorous treatment of a non-linear system, even the proof of the conductivity coefficient, is out of reach of current mathematical techniques"*. Para superar tais dificuldades, modelos simplificados e métodos aproximativos têm sido considerados. Uma recente revisão é apresentada, por exemplo, na referência [6]. Para uma revisão sobre resultados numéricos veja [7].

Após anos de investigação, apesar da ignorância sobre questões fundamentais como as condições precisas para a lei de Fourier, muitas propriedades interessantes da condutividade térmica relacionadas ao controle do fluxo de calor, algumas vezes com promissoras aplicações experimentais, foram descobertas e analisadas. Por exemplo, a existência de retificação térmica [8, 9], fenômeno no qual a magnitude da corrente de calor varia quando ocorre inversão entre os banhos térmicos de um sistema. A retificação térmica é o ingrediente principal na construção de vários dispositivos nanométricos, como os diodos e transistores térmicos.

Nesta dissertação, tendo em mente a investigação analítica de propriedades da condutividade térmica com possíveis aplicações no mecanismo de controle do fluxo de calor, são apresentados estudos rigorosos em uma cadeia de osciladores harmônicos com massas alternadas e banhos térmicos apenas nas extremidades ( *"detailed analysis of simple models can introduce a new degree of understanding"*, Ruelle [10]). É inquestionavelmente importante, em qualquer modelo, conhecer a dependência da condutividade térmica em relação aos parâmetros do sistema, e o estudo de sistemas com potenciais locais ou massas das partículas desiguais é recorrente e de interesse físico. Por exemplo, sistemas com gradiente de massas são de interesse tanto teórico [11] quanto experimental [12]; modelos com distribuição de massas aleatório foram sempre estudados (um exemplo é o artigo [13] e referências contidas nesse).

Os estudos desta dissertação seguiram a abordagem apresentada por Casher e Lebowitz [14], e mostraram que, para a cadeia de massas alternadas, o fluxo de calor decai com o inverso do quadrado da diferença entre as massas, em contraste com a cadeia de partículas de mesma massa, onde esse decai com o inverso da massa. Precisamente, para a cadeia de massas alternadas, se uma das massas decresce como $m_1 \sim \epsilon$ ($\epsilon$ pequeno) e a outra cresce como $m_2 \sim 1/\epsilon$, então, o fluxo de calor $\mathcal{F}(2)$ satisfaz $\mathcal{F}(2) \sim \epsilon^2$. No sistema de massas idênticas, $\mathcal{F}(1) \sim 1/m$ [14]. Ou seja, esse estudo analítico mostra que: para tornar o fluxo de calor em uma cadeia de osciladores harmônicos pequeno, é mais eficiente tomar um sistema de massas alternadas e aumentar a massa de uma das partículas na mesma razão que a outra massa diminui, do que aumentar todas as massas do sistema.

O sistema de massas alternadas aqui estudado é harmônico e não obedece à lei de Fourier. Entretanto, comportamento similar é observado quando são acoplados aos sítios internos da cadeia banhos térmicos auto-consistentes [15]. Esse último, um modelo efetivo onde vale a lei de Fourier: os reservatórios estocásticos internos mimetizam interações anarmônicas desprezadas. Nesse trabalho anterior [15], os resultados foram obtidos usando uma abordagem desenvolvida em [16, 17], que envolve uma análise pertubativa rigorosa em primeira ordem para potenciais de interação fracos [18], uma restrição não presente nos resultados desta dissertação. Os comportamentos semelhantes indicam uma generalidade nessa propriedade da condutividade térmica.

O restante da dissertação está assim organizado. No capítulo 2 são descritos os modelos microscópicos, os reservatórios térmicos (e como foram modelados por ruídos estocásticos), e é calculada uma expressão para o fluxo de calor. No capítulo 3 são apresentados os resultados conhecidos sobre cadeias harmônicas: a fórmula geral para o fluxo; a obtenção da distribuição de Boltzmann-Gibbs, quando os banhos estão todos a uma mesma temperatura; sistemas com banhos apenas nas extremidades; e sistemas com banho auto-consistentes. Ainda no capítulo 3, é apresentado o resultado sobre o controle da condução de calor, o principal resultado dessa dissertação. A conclusão se encontra no capítulo 4, e o apêndice A contêm uma demonstração da existência e unicidade do estado estacionário para cadeias harmônicas.

# Capítulo 2

# Modelos microscópicos

Neste capítulo são descritos os modelos microscópicos utilizados nessa dissertação: redes de osciladores conectados a reservatórios térmicos e com interações entre os sítios. Esses são modelos padrão para sólidos usados desde os trabalhos de Debye [3]. Aqui, foram tratados redes unidimensionais com dinâmica hamiltoniana clássica e conservativa, e os reservatórios foram modelados por ruídos estocásticos. Desta forma, a dinâmica dos sistemas passa a ser regida por equações estocásticas, e uma expressão para o fluxo de calor dependendo apenas das funções de correlação é calculada.

## 2.1 Dinâmica

O sistema consiste de uma cadeia de $N$ osciladores (partículas); a massa e a posição da $j$-ésima partícula são representadas por $m_j$ e $q_j$ respectivamente. A cadeia está sobre a ação de um potencial externo $U$, e as partículas se interagem através de um potencial central $V$. Portanto, o hamiltoniano $\mathcal{H}$ é dado por:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \sum_{j\,=\,1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2m_j} + U(q_j)\right) + \frac{1}{2}\sum_{j\,=\,1}^{N}\sum_{k\,\neq\,j} V(q_j - q_k)\ . \tag{2.1}$$

O potencial externo (também chamado de potencial local) pode ser interpretado como uma forma de modelar a interação da cadeia com seu substrato. O potencial de interação pode ser de curto ou longo alcance. O uso de potenciais de curto alcance, em geral com interações apenas entre primeiros vizinhos, é justificável quando as forças de interação decaem rapidamente com a distância; o que não ocorre, por exemplo, com interação elétrica do tipo coulombiana, mas efeitos de blindagem podem justificar um modelo efetivo onde essa é tratada como de curto alcance.

Uma maneira de modelar os reservatórios térmicos seria acoplando à cadeia sistemas contendo um número arbitrário de partículas. As partículas da cadeia iriam interagir com as dos reservatórios através de colisões. Nesse modelo pode-se interpretar os reservatórios como tanques contendo um fluido em certa temperatura, dada por sua energia cinética. Adiciona-se à dinâmica uma força viscosa $-\zeta_j \dot{q}_j$ e uma outra força $F_{B_j}$, da qual apenas se conhece suas propriedades estatísticas.

A maneira de incorporar essas forças à dinâmica hamiltoniana é através do princípio de D'alembert [19], e desta forma

$$\begin{aligned} \mathrm{d}q_j &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}\mathrm{d}t = \frac{p_j}{m_j}\mathrm{d}t \ , \\ \mathrm{d}p_j &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j}\mathrm{d}t - \zeta_j p_j \mathrm{d}t + F_{B_j}\mathrm{d}t \ , \end{aligned} \tag{2.2}$$

onde $p_j$ é o momento associado a $q_j$. Já a força associada ao movimento browniano é muito bem modelada através de processos estocásticos; particularmente, processos de Wiener independentes $B_j$ (vide [20, 21]). Desta forma $\gamma_j^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}B_j$ modela de maneira precisa o comportamento de $F_{B_j}\mathrm{d}t$ na média[1], com $\gamma_j = 2m_j\zeta_j T_j$, onde $T_j$ é a temperatura do $j$-ésimo reservatório térmico.

### 2.1.1 Fluxo de calor

Para o cálculo do fluxo de calor em um sítio arbitrário da cadeia, define-se a partir do hamiltoniano (2.1) a energia de cada sítio $j$,

$$\mathcal{H}_j = \frac{p_j^2}{2m_j} + U(q_j) + \frac{1}{4}\sum_{k \neq j}[V(q_j - q_k) + V(q_k - q_j)] \ . \tag{2.3}$$

[1]Em todo texto é usado unidades de medida em que a constante de Boltzmann seja igual a um.

Definido assim, $\mathcal{H} = \sum_{j=1}^{N} \mathcal{H}_j$ e a energia de interação entre sítios é simetricamente dividida.

O fluxo de calor no $j$-ésimo sítio da cadeia é definido como a quantidade de energia que atravessa o sítio por unidade de tempo. Como a dinâmica é estocástica, devido à presença dos banhos térmicos, deve-se aplicar o cálculo de Itô para o cálculo do fluxo de calor. Segundo a fórmula de Itô, teorema 4.2.1 [20],

$$\mathrm{d}\mathcal{H}_j = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial q_i}\mathrm{d}q_i + \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial p_i}\mathrm{d}p_i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_j}{\partial {p_i}^2}\mathrm{d}{p_i}^2 \ . \tag{2.4}$$

Para obter esta expressão foi usado o fato do hamiltoniano ser independente do tempo, e as equações da dinâmica (2.2).

O primeiro termo da soma de (2.4) pode ser calculado derivando (2.3) em relação a $q_i$ e substituindo $\mathrm{d}q_i$ pela primeira expressão de (2.2):

$$\frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial q_i} = U'(q_j)\delta_{ij} + \frac{1}{4}\sum_{k \neq j}[V'(q_j - q_k) - V'(q_k - q_j)](\delta_{ij} - \delta_{ik}) \ \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial q_i}\mathrm{d}q_i &= \frac{p_j}{m_j}U'(q_j)\mathrm{d}t + \frac{1}{4}\sum_{k \neq j}\sum_{i=1}^{N}[V'(q_j - q_k) - V'(q_k - q_j)]\frac{p_i}{m_i}(\delta_{ij} - \delta_{ik})\mathrm{d}t \\ &= \frac{p_j}{m_j}U'(q_j)\mathrm{d}t + \frac{1}{4}\sum_{k \neq j}[V'(q_j - q_k) - V'(q_k - q_j)]\left(\frac{p_j}{m_j} - \frac{p_k}{m_k}\right)\mathrm{d}t. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Analogamente, o segundo termo é calculado derivando (2.3) em relação a $p_i$ e substituindo $\mathrm{d}p_i$ pela segunda expressão de (2.2):

$$\frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial p_i} = \frac{p_j}{m_j}\delta_{ij} \Rightarrow$$

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial p_i}\mathrm{d}p_i = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i}{m_i}\delta_{ij}\mathrm{d}p_i = \frac{p_j}{m_j}\mathrm{d}p_j \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial p_i}\mathrm{d}p_i &= -\frac{p_j}{m_j}\left(U'(q_j) + \frac{1}{2}\sum_{k \neq j}[V'(q_j - q_k) - V'(q_k - q_j)]\right)\mathrm{d}t \\ &\quad -\frac{\zeta_j {p_j}^2}{m_j}\mathrm{d}t + \left(\frac{2\zeta_j {p_j}^2 T_j}{m_j}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}B_j(t) \ . \end{aligned} \tag{2.6}$$

Por fim, o último termo é obtido calculando-se a derivada segunda de (2.3) em relação a $p_i$ e usando a relação $\mathrm{d}p_i^2 = 2\zeta_i m_i T_i \mathrm{d}t$ (obtida aplicando-se o teorema 4.2.1 [20]):

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}_j}{\partial {p_i}^2} = \frac{\delta_{ij}}{m_j} \Rightarrow$$

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_j}{\partial {p_i}^2} \mathrm{d}{p_i}^2 = 2\zeta_j T_j \mathrm{d}t \ . \tag{2.7}$$

Substituindo (2.5), (2.6), (2.7) em (2.4) chega-se em

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\mathcal{H}_j &= -\frac{1}{4} \sum_{k \neq j} [V'(q_j - q_k) - V'(q_k - q_j)] \left( \frac{p_j}{m_j} + \frac{p_k}{m_k} \right) \mathrm{d}t \\ &+ \zeta_j \left( T_j - \frac{{p_j}^2}{m_j} \right) \mathrm{d}t + \left( \frac{2\zeta_j {p_j}^2 T_j}{m_j} \right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{d}B_j(t) \ \Rightarrow \\ \mathcal{H}_j &= \mathcal{H}_j(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0) + \int_0^t \left( \frac{2\zeta_j {p_j}^2 T_j}{m_j} \right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{d}B_j(s) + \int_0^t \zeta_j \left( T_j - \frac{{p_j}^2}{m_j} \right) \mathrm{d}s \\ &- \int_0^t \frac{1}{4} \sum_{k \neq j} [V'(q_j - q_k) - V'(q_k - q_j)] \left( \frac{p_j}{m_j} + \frac{p_k}{m_k} \right) \mathrm{d}s \ . \end{aligned}$$

Como $\mathcal{H}_j$ é um processo de Itô, apenas a média do fluxo torna-se acessível. Usando, novamente, o teorema 4.2.1 [20], obtém-se

$$\frac{\mathrm{d}\langle \mathcal{H}_j \rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle \zeta_j \left( T_j - \frac{{p_j}^2}{m_j} \right) - \frac{1}{4} \sum_{k \neq j} [V'(q_j - q_k) - V'(q_k - q_j)] \left( \frac{p_j}{m_j} + \frac{p_k}{m_k} \right) \right\rangle \ . \tag{2.8}$$

Definindo

$$R_j = \zeta_j \left( T_j - \frac{{p_j}^2}{m_j} \right) \tag{2.9}$$

como o fluxo de energia entre o sítio $j$ e seu respectivo reservatório térmico, e

$$\mathcal{F}_{j\rightarrow} = \frac{1}{4} \sum_{k > j} [V'(q_j - q_k) - V'(q_k - q_j)] \left( \frac{p_j}{m_j} + \frac{p_k}{m_k} \right) \ ,$$

$$\mathcal{F}_{\rightarrow j} = \frac{1}{4} \sum_{k < j} [V'(q_k - q_j) - V'(q_j - q_k)] \left( \frac{p_j}{m_j} + \frac{p_k}{m_k} \right)$$

como o fluxo de energia do $j$-ésimo sítio da cadeia para os sítios $k > j$ e $k < j$ respectivamente, (2.8) se reescreve como

$$\frac{\mathrm{d}\langle \mathcal{H}_j \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle R_j \rangle - \langle \mathcal{F}_{j\rightarrow} \rangle + \langle \mathcal{F}_{\rightarrow j} \rangle \ . \tag{2.10}$$

# Capítulo 3

# Cadeias harmônicas

Este capítulo contém os resultados conhecidos sobre cadeias harmônicas: a fórmula geral para o fluxo; a obtenção da distribuição de Boltzmann-Gibbs, quando os banhos estão todos a uma mesma temperatura; cadeias periódicas com banhos apenas nas extremidades; e sistemas com banho auto-consistentes. Também é apresentado o resultado sobre o controle da condução de calor para a cadeia de massas alternadas e banho nas extremidades, o resultado original desta dissertação. Embora a abordagem usada aqui tenha sido desenvolvida por Casher e Lebowitz, ela foi apresentada em [14] de forma bastante sintética, nesta dissertação são descritos todos os detalhes e minúcias matemáticas, o que requer um trabalho considerável.

## 3.1 Solução geral

Considera-se aqui cadeias harmônicas, ou seja, sistemas com hamiltoniano

$$\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^\dagger\mathcal{M}^{-1}\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{q}^\dagger\mathcal{J}\mathbf{q}\ , \tag{3.1}$$

cuja dinâmica é dada por

$$\begin{cases} \mathrm{d}\mathbf{q} = \dfrac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{p}}\mathrm{d}t = \mathcal{M}^{-1}\mathbf{p}\mathrm{d}t \\ \\ \mathrm{d}\mathbf{p} = -\dfrac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{q}}\mathrm{d}t - \Lambda\mathbf{p}\mathrm{d}t + \sqrt{2\Lambda\mathcal{M}T}\ \mathrm{d}B \end{cases} , \tag{3.2}$$

onde: $T = \mathrm{diag}(T_1, ..., T_N) \neq 0$, com $T_i \geq 0$ ; $\Lambda = \mathrm{diag}(\zeta_1, ..., \zeta_N) \neq 0$, com $\zeta_i \geq 0$ ; $\mathcal{M} = \mathrm{diag}(m_1, ..., m_N)$ é positiva definida; $\mathcal{J} = -\omega^2\Delta + \Omega_0^2$ , com $\Omega_0 = \mathrm{diag}(\omega_1, ..., \omega_N) \geq 0$ e $-\Delta_{ij} = 2\delta_{ij} - \delta_{i+1,j} - \delta_{i-1,j}$.

Reescrevendo as equações com $\phi = \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}$ e $\mathrm{d}\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathrm{d}B \end{pmatrix}$,

$$\mathrm{d}\phi(t) = -\mathcal{A}\phi(t)\mathrm{d}t + \sigma\mathrm{d}\mathbf{B}(t) ,$$

onde $\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathcal{M}^{-1} \\ \mathcal{J} & \Lambda \end{pmatrix}$ e $\sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2T\Lambda\mathcal{M} \end{pmatrix}$.

$$\mathrm{d}(\mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\phi) = \mathcal{A}\mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\phi\mathrm{d}t + \mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\mathrm{d}\phi = (\mathcal{A}\mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\phi - \mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\mathcal{A}\phi)\mathrm{d}t + \mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\sigma\mathrm{d}\mathbf{B} ,$$

$[\mathrm{e}^{\mathcal{A}t}, \mathcal{A}] = 0 \ \Rightarrow$

$$\mathrm{d}(\mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\phi) = \mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\sigma\mathrm{d}\mathbf{B} \ \Rightarrow$$

$$\mathrm{e}^{\mathcal{A}t}\phi(t) - \phi(0) = \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \ \Rightarrow$$

$$\phi(t) = \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\phi(0) + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \ . \tag{3.3}$$

$$\langle\phi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \langle\phi_0\rangle + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \left\langle \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \right\rangle ,$$

mas $\left\langle \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \right\rangle = 0$ (teorema 3.2.1 [20]), então

$$\langle\phi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \langle\phi_0\rangle \ \Rightarrow$$

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}\langle\phi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = -\mathcal{A} \langle\phi(t)\rangle \\ \\ \langle\phi(0)\rangle = \langle\phi_0\rangle \end{cases} , \tag{3.4}$$

$$\begin{aligned} \phi(t)\phi^\dagger(t) \ &= \ \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\phi_0 \int_0^t \ \mathrm{d}\mathbf{B}^\dagger(s)\sigma^\dagger\mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger s}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\phi_0^\dagger\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} \\ &+ \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \int_0^t \ \mathrm{d}\mathbf{B}^\dagger(r)\sigma^\dagger\mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger r}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} \\ &+ \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\phi_0\phi_0^\dagger\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} , \end{aligned}$$

usando que $\sigma = \sigma^\dagger$ e o teorema 3.2.1 [20], obtém-se

$$\begin{aligned}\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t) \right\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \left\langle \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \int_0^t \ \mathrm{d}\mathbf{B}^\dagger(r)\sigma^\dagger \mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger r} \right\rangle \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} \\ &\quad + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \left\langle \phi_0 \phi_0^\dagger \right\rangle \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} \ .\end{aligned}$$

O valor médio $\left\langle \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \int_0^t \ \mathrm{d}\mathbf{B}^\dagger(r)\sigma^\dagger \mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger r} \right\rangle$ pode ser calculado com o auxílio do seguinte resultado:

**Proposição 1.** *Sejam* $f : \mathbb{R} \to \mathrm{M}(2N)$ *suave (o conjunto das matrizes* $2N \times 2N$ *é representado por* $\mathrm{M}(2N)$*), e* $\mathbf{B}$ *um processo de Wiener* $2N$*-dimensional. Então* $\left\langle \left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right) \left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right)^\dagger \right\rangle = \int_0^t f(s) f^\dagger(s) \ \mathrm{d}s$ .

*Demonstração:* Pelo colorário 3.18 [20]

$$\left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right) \left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right)^\dagger = \left(\lim_{n\to\infty} \sum_{x\,=\,0}^{n\,-\,1} f(s_x)\Delta\mathbf{B}_x\right) \left(\lim_{n\to\infty} \sum_{y\,=\,0}^{n\,-\,1} f(s_y)\Delta\mathbf{B}_y\right)^\dagger ,$$

com $s_z = zt/n$, $\Delta\mathbf{B}_z = \mathbf{B}(s_{z+1}) - \mathbf{B}(s_z)$, $z = x, y$.

$$\begin{aligned}\left[\left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right) \left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right)^\dagger\right]_{kl} &= \lim_{n\to\infty} \sum_{x,\,y\,=\,0}^{n\,-\,1} [f(s_x)\Delta\mathbf{B}_x]_k [f(s_y)\Delta\mathbf{B}_y]_l \\ &= \lim_{n\to\infty} \sum_{x,\,y\,=\,0}^{n\,-\,1} \sum_{i,\,j\,=\,1}^{2N} [f(s_x)]_{ki}[\Delta\mathbf{B}_x]_i [f(s_y)]_{lj}[\Delta\mathbf{B}_y]_j \ \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\left\langle \left[\left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right) \left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right)^\dagger\right]_{kl} \right\rangle =$$
$$\lim_{n\to\infty} \sum_{x,\,y\,=\,0}^{n\,-\,1} \sum_{i,\,j\,=\,1}^{2N} [f(s_x)]_{ki} [f(s_y)]_{lj} \left\langle [\Delta\mathbf{B}_x]_i [\Delta\mathbf{B}_y]_j \right\rangle \ ,$$

mas pelo lema da página 49 [21] $\langle [\Delta\mathbf{B}_x]_i [\Delta\mathbf{B}_y]_j \rangle = \Delta s_x \delta_{xy} \delta_{ij}$, portanto

$$\begin{aligned}\left\langle \left[\left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right) \left(\int_0^t f(s) \ \mathrm{d}\mathbf{B}(s)\right)^\dagger\right]_{kl} \right\rangle &= \lim_{n\to\infty} \sum_{x\,=\,0}^{n\,-\,1} \sum_{i\,=\,1}^{2N} [f(s_x)]_{ki} [f(s_x)]_{li} \Delta s_x \\ &= \int_0^t \sum_{i\,=\,1}^{2N} [f(s)]_{ki} [f^\dagger(s)]_{il} \ \mathrm{d}s \\ &= \int_0^t [f(s) f^\dagger(s)]_{kl} \ \mathrm{d}s \ . \qquad \blacksquare\end{aligned}$$

Usando a proposição 1, com $f(s) = \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma$,

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\left\langle \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma\ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \int_0^t \ \mathrm{d}\mathbf{B}^\dagger(r)\sigma^\dagger \mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger r}\right\rangle \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} &= \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\left(\int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma\sigma^\dagger \mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger s}\ \mathrm{d}s\right)\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} \\
&= \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}(s-t)}\sigma^2 \mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger (s-t)}\ \mathrm{d}s\ ,
\end{aligned}$$

e fazendo a mudança de coordenadas $r = t - s$,

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\left\langle \int_0^t \mathrm{e}^{\mathcal{A}s}\sigma\ \mathrm{d}\mathbf{B}(s) \int_0^t \ \mathrm{d}\mathbf{B}^\dagger(r)\sigma^\dagger \mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger r}\right\rangle \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} &= -\int_t^0 \mathrm{e}^{\mathcal{A}r}\sigma^2 \mathrm{e}^{\mathcal{A}^\dagger r}\ \mathrm{d}r \\
&= \int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\ \mathrm{d}s \qquad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle = \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\left\langle \phi_0\phi_0^\dagger\right\rangle \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} + \int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\ \mathrm{d}s\ . \tag{3.5}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle &= -\mathcal{A}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\left\langle \phi_0\phi_0^\dagger\right\rangle \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} - \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\left\langle \phi_0\phi_0^\dagger\right\rangle \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\mathcal{A}^\dagger \\
&\quad + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\ ,
\end{aligned}$$

substituindo (3.5) na equação acima,

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle &= -\mathcal{A}\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle - \left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle \mathcal{A}^\dagger + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s} \\
&\quad + \mathcal{A}\int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\ \mathrm{d}s + \int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\ \mathrm{d}s\mathcal{A}^\dagger \ \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle &= -\mathcal{A}\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle - \left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle \mathcal{A}^\dagger \\
&\quad + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s} - \int_0^t \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(\mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\right)\ \mathrm{d}s \ \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\left\{\begin{array}{l}
\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle = -\mathcal{A}\left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle - \left\langle \phi(t)\phi^\dagger(t)\right\rangle \mathcal{A}^\dagger + \sigma^2 \\
\\
\left\langle \phi(0)\phi^\dagger(0)\right\rangle = \left\langle \phi_0\phi_0^\dagger\right\rangle
\end{array}\right. . \tag{3.6}$$

Para estudar o comportamento assintótico do sistema (3.4), é necessário analisar a estabilidade da matriz $\mathcal{A}$.

$$\mathcal{A}\begin{pmatrix}\mathbf{q}\\ \mathbf{p}\end{pmatrix}=\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{q}\\ \mathbf{p}\end{pmatrix}\ \Rightarrow\ \begin{pmatrix}-\mathcal{M}^{-1}\mathbf{p}\\ \mathcal{J}\mathbf{q}+\Lambda\mathbf{p}\end{pmatrix}=\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{q}\\ \mathbf{p}\end{pmatrix}\ \Rightarrow$$

$$\begin{cases}\mathbf{p}=-\alpha\mathcal{M}\mathbf{q}\\ \\ \mathcal{J}\mathbf{q}+\Lambda\mathbf{p}=\alpha\mathbf{p}\end{cases}, \tag{3.7}$$

substituindo a primeira equação de (3.7) na segunda,

$$\begin{aligned}\mathcal{J}\mathbf{q}-\alpha\Lambda\mathcal{M}\mathbf{q}=-\alpha^2\mathcal{M}\mathbf{q}\ &\Rightarrow\ (\mathcal{J}-\alpha\Lambda\mathcal{M}+\alpha^2\mathcal{M})\mathbf{q}=0\ \Rightarrow\\ \mathbf{q}^\dagger(\mathcal{J}-\alpha\Lambda\mathcal{M}+\alpha^2\mathcal{M})\mathbf{q}\ &=\ 0\ \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\mathbf{q}^\dagger\mathcal{J}\mathbf{q}-\alpha\mathbf{q}^\dagger\Lambda\mathcal{M}\mathbf{q}+\alpha^2\mathbf{q}^\dagger\mathcal{M}\mathbf{q}=0\ , \tag{3.8}$$

mas por hipótese $\mathcal{M}$ é uma forma quadrática positiva definida, e para $\mathcal{J}$, basta lembrar que o laplaciano é positivo:

$$\begin{aligned}-\boldsymbol{v}^\dagger\Delta\boldsymbol{v}\ &=\ \sum_{i,\,j\,=\,1}^{N}v_j(2\delta_{ij}-\delta_{i+1,j}-\delta_{i-1,j})v_i\\ &=\ 2\sum_{j\,=\,1}^{N}v_j^2-\sum_{j\,=\,2}^{N}v_{j-1}v_j-\sum_{j\,=\,1}^{N\,-\,1}v_{j+1}v_j\\ &=\ 2\sum_{j\,=\,1}^{N}v_j^2-\sum_{j\,=\,2}^{N}v_{i+1}v_i-\sum_{j\,=\,1}^{N\,-\,1}v_{j+1}v_j\\ &=\ v_1^2+v_N^2+\sum_{i\,=\,1}^{N\,-\,1}(v_i^2+v_{i+1}^2)-2\sum_{i\,=\,1}^{N\,-\,1}v_iv_{i+1}\\ &=\ v_1^2+v_N^2+\sum_{i\,=\,1}^{N\,-\,1}(v_i^2-2v_iv_{i+1}+v_{i+1}^2)\\ &=\ v_1^2+v_N^2+\sum_{i\,=\,1}^{N\,-\,1}(v_i-v_{i+1})^2>0\ ,\end{aligned}$$

desde que $\boldsymbol{v}\neq 0$. Desta forma,

$$\alpha=\frac{\mathbf{q}^\dagger\Lambda\mathcal{M}\mathbf{q}\pm\sqrt{(\mathbf{q}^\dagger\Lambda\mathcal{M}\mathbf{q})^2-4(\mathbf{q}^\dagger\mathcal{M}\mathbf{q})(\mathbf{q}^\dagger\mathcal{J}\mathbf{q})}}{2\mathbf{q}^\dagger\mathcal{M}\mathbf{q}}\ , \tag{3.9}$$

assumindo que $\Lambda\mathcal{M}\mathbf{q} \neq 0$ (os modos normais de vibração da cadeia não admitem solução estática para todas as partículas acopladas aos reservatórios),

$$\mathrm{Re}\{\alpha\} = \frac{\mathbf{q}^\dagger \Lambda \mathcal{M} \mathbf{q}}{2\mathbf{q}^\dagger \mathcal{M} \mathbf{q}} > 0 \ .$$

Pelo o que foi mostrado acima, pode-se aplicar o teorema 22.1 da página 143 de [22] ao sistema (3.4). Como resultado $\lim_{t\to\infty} \langle \phi(t) \rangle = 0$ e

$$\left\langle \phi(\infty)\phi^\dagger(\infty) \right\rangle = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s} \sigma^2 \mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s} \, \mathrm{d}s \ . \tag{3.10}$$

Com o auxilio da teoria qualitativa de equações diferenciais ordinárias, mostra-se (apêndice A) que

$$\sigma^2 = \mathcal{A}\mathcal{X} + \mathcal{X}\mathcal{A}^\dagger \tag{3.11}$$

possui solução única, $\forall\ \sigma^2 \in \mathrm{M}(2N)$, e que esta é um ponto fixo assintoticamente estável do sistema (3.6); além disto $\mathcal{X} = \left\langle \phi(\infty)\phi^\dagger(\infty) \right\rangle$ é a matriz de covariância do estado estacionário do sistema (que por ser linear, segue uma distribuição gaussiana). Desta forma, toda informação do sistema pode ser extraída com o cálculo de $\left\langle \phi(\infty)\phi^\dagger(\infty) \right\rangle$, e para tal é necessário calcular[1] $\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}$.

Escrevendo

$$\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} = \begin{pmatrix} \mathfrak{D}(t) & \mathfrak{F}(t) \\ \mathfrak{E}(t) & \mathfrak{G}(t) \end{pmatrix} ,$$

como $\frac{\mathrm{d}\langle \phi(t) \rangle}{\mathrm{d}t} = -\mathcal{A} \langle \phi(t) \rangle \ \Rightarrow \langle \phi(t) \rangle = \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \langle \phi(0) \rangle \ \Rightarrow$

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathfrak{D}}(t) & \dot{\mathfrak{F}}(t) \\ \dot{\mathfrak{E}}(t) & \dot{\mathfrak{G}}(t) \end{pmatrix} \langle \phi(0) \rangle = - \begin{pmatrix} 0 & -\mathcal{M}^{-1} \\ \mathcal{J} & \Lambda \end{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} \langle \phi(0) \rangle \ ,$$

para qualquer $\langle \phi(0) \rangle \ \Rightarrow$

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathfrak{D}}(t) & \dot{\mathfrak{F}}(t) \\ \dot{\mathfrak{E}}(t) & \dot{\mathfrak{G}}(t) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & -\mathcal{M}^{-1} \\ \mathcal{J} & \Lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathfrak{D}(t) & \mathfrak{F}(t) \\ \mathfrak{E}(t) & \mathfrak{G}(t) \end{pmatrix} \ \Rightarrow$$

[1] $[\mathcal{A}, \mathcal{A}^\dagger] = 0 \Leftrightarrow \mathcal{J} = \mathcal{M}^{-1}$, portanto não é possível, em geral, diagonalizar $\mathcal{A}$ em uma base ortonormal.

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathfrak{D}}(t) & \dot{\mathfrak{F}}(t) \\ \dot{\mathfrak{E}}(t) & \dot{\mathfrak{G}}(t) \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \mathcal{M}^{-1}\mathfrak{E}(t) & \mathcal{M}^{-1}\mathfrak{G}(t) \\ -\mathcal{J}\mathfrak{D}(t) - \Lambda\mathfrak{E}(t) & -\mathcal{J}\mathfrak{F}(t) - \Lambda\mathfrak{G}(t) \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} \mathcal{M}\dot{\mathfrak{D}}(t) = \mathfrak{E}(t) \\ \\ \dot{\mathfrak{E}}(t) + \mathcal{J}\mathfrak{D}(t) + \Lambda\mathfrak{E}(t) = 0 \end{cases} \text{e} \begin{cases} \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t) = \mathfrak{G}(t) \\ \\ \dot{\mathfrak{G}}(t) + \mathcal{J}\mathfrak{F}(t) + \Lambda\mathfrak{G}(t) = 0 \end{cases},$$

como $\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} = I$ se $t = 0$ isto implica que $\mathfrak{D}(0) = I$, $\mathfrak{F}(0) = 0$, $\mathfrak{E}(0) = 0$ e $\mathfrak{G}(0) = I$, portanto

$$\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} = \begin{pmatrix} \mathfrak{D}(t) & \mathfrak{F}(t) \\ \mathcal{M}\dot{\mathfrak{D}}(t) & \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t) \end{pmatrix},$$

com

$$\begin{cases} \mathcal{M}\ddot{\mathfrak{D}}(t) + \Lambda\mathcal{M}\dot{\mathfrak{D}}(t) + \mathcal{J}\mathfrak{D}(t) = 0 \\ \\ \mathfrak{D}(0) = I \ , \ \dot{\mathfrak{D}}(0) = 0 \end{cases} \text{e} \begin{cases} \mathcal{M}\ddot{\mathfrak{F}}(t) + \Lambda\mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t) + \mathcal{J}\mathfrak{F}(t) = 0 \\ \\ \mathfrak{F}(0) = 0 \ , \ \dot{\mathfrak{F}}(0) = \mathcal{M}^{-1} \end{cases}.$$

Agora calculando $\left\langle \phi^\dagger(\infty)\phi(\infty) \right\rangle = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t$,

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} &= \begin{pmatrix} \mathfrak{D}(t) & \mathfrak{F}(t) \\ \mathcal{M}\dot{\mathfrak{D}}(t) & \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2\mathcal{M}\Lambda T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathfrak{D}^\dagger(t) & \dot{\mathfrak{D}}^\dagger(t)\mathcal{M} \\ \mathfrak{F}^\dagger(t) & \dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t)\mathcal{M} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathfrak{D}(t) & \mathfrak{F}(t) \\ \mathcal{M}\dot{\mathfrak{D}}(t) & \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2\mathcal{M}\Lambda T\mathfrak{F}^\dagger(t) & 2\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t)\mathcal{M} \end{pmatrix} \\ &= 2\begin{pmatrix} \mathfrak{F}(t)\mathcal{M}\Lambda T\mathfrak{F}^\dagger(t) & \mathfrak{F}(t)\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t) \\ \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\mathcal{M}\Lambda T\mathfrak{F}^\dagger(t) & \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t)\mathcal{M} \end{pmatrix} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\left\langle \phi^\dagger(\infty)\phi(\infty) \right\rangle = 2\int_0^\infty \begin{pmatrix} \mathfrak{F}(t)\mathcal{M}\Lambda T\mathfrak{F}^\dagger(t) & \mathfrak{F}(t)\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t) \\ \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\mathcal{M}\Lambda T\mathfrak{F}^\dagger(t) & \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t)\mathcal{M} \end{pmatrix} \mathrm{d}t \ , \quad (3.12)$$

logo, basta apenas resolver

$$\mathcal{M}\ddot{\mathfrak{F}} + \mathcal{M}\Lambda\dot{\mathfrak{F}} + \mathcal{J}\mathfrak{F} = 0 \ , \ \mathfrak{F}(0) = 0 \text{ e } \dot{\mathfrak{F}}(0) = \mathcal{M}^{-1} \ . \quad (3.13)$$

O sistema (3.13) será resolvido através do método da transformada de Fourier: definindo

$$\widetilde{\mathfrak{F}}(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\nu t}\mathfrak{F}(t)\ \mathrm{d}t$$

como a transformada de Fourier de $\mathfrak{F}(t)$; supondo que $\mathfrak{F}(t) = \dot{\mathfrak{F}}(t) = \ddot{\mathfrak{F}}(t) = 0$ se $t < 0$ (como se a dinâmica do sistema fosse "ligada" em $t = 0$) $\Rightarrow$

$$\widetilde{\mathcal{J}\mathfrak{F}}(\nu) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{J}\mathfrak{F}(t)\ \mathrm{d}t = \mathcal{J}\widetilde{\mathfrak{F}}(\nu)$$

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathcal{M}\Lambda\dot{\mathfrak{F}}}(\nu) &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\Lambda\dot{\mathfrak{F}}(t)\ \mathrm{d}t \\ &= \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\Lambda\mathfrak{F}(t)\Big|_0^\infty - i\nu\int_0^\infty \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\Lambda\mathfrak{F}(t)\ \mathrm{d}t\ ;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathcal{M}\ddot{\mathfrak{F}}}(\nu) &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\ddot{\mathfrak{F}}(t)\ \mathrm{d}t \\ &= \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\Big|_0^\infty - i\nu\int_0^\infty \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\ \mathrm{d}t \\ &= \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\Big|_0^\infty - i\nu\mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\mathfrak{F}(t)\Big|_0^\infty - \nu^2\int_0^\infty \mathrm{e}^{i\nu t}\mathcal{M}\mathfrak{F}(t)\ \mathrm{d}t\ ,\end{aligned}$$

mas como $\lim_{t\to\infty} \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} = 0\ \Rightarrow \lim_{t\to\infty}\mathfrak{F}(t) = 0$ e $\lim_{t\to\infty}\dot{\mathfrak{F}}(t) = 0 \Rightarrow$

$$(\mathcal{J} - \nu^2\mathcal{M} - i\nu\mathcal{M}\Lambda)\widetilde{\mathfrak{F}}(\nu) = I\ \Rightarrow$$

$$\widetilde{\mathfrak{F}}(\nu) = (\mathcal{J} - \nu^2\mathcal{M} - i\nu\mathcal{M}\Lambda)^{-1} = Z^{-1}(\nu)\ . \tag{3.14}$$

Tomando a transformada inversa de (3.14),

$$\mathfrak{F}(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{e}^{-i\nu t}Z^{-1}(\nu)\ \mathrm{d}\nu\ ,\ t \geq 0\ .$$

Para $t < 0$, definindo $s = |t|$ tem-se $t = -s$, portanto

$$\mathfrak{F}(-s) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{e}^{i\nu s}Z^{-1}(\nu)\ \mathrm{d}\nu\ ,$$

como a exponencial é analítica em $\mathbb{C}$, integrando em um semicírculo de raio $R$ no plano superior tem-se

$$\mathfrak{F}(-s) = \lim_{R\to\infty}\frac{-1}{2\pi}\int_0^\pi \exp(isR\mathrm{e}^{i\theta})Z^{-1}(R\mathrm{e}^{i\theta})iR\mathrm{e}^{i\theta}\ \mathrm{d}\theta\ ,$$

se $Z^{-1}(\nu)$ também for analítica no plano superior de $\mathbb{C}$. De fato, os zeros de $Z(\nu)$ ocorrem no plano inferior de $\mathbb{C}$: por (3.8)

$$\mathbf{q}^\dagger Z(-i\alpha)\mathbf{q} = \mathbf{q}^\dagger\mathcal{J}\mathbf{q} - \alpha\mathbf{q}^\dagger\Lambda\mathcal{M}\mathbf{q} + \alpha^2\mathbf{q}^\dagger\mathcal{M}\mathbf{q} = 0\ ,$$

e devido a (3.9), assumindo $\Lambda\mathcal{M}\mathbf{q} \neq 0$, $\mathrm{Re}\{\alpha\} > 0 \;\Rightarrow\; Z(\nu) = 0$ somente quando $\nu = \mathrm{Im}\{\alpha\} - i\mathrm{Re}\{\alpha\}$, ou seja na parte inferior de $\mathbb{C}$.

Por (3.14)

$$
\begin{aligned}
Z^{-1}(\nu) &= \left[-\nu^2\mathcal{M}\left(I + \frac{i\mathcal{M}\Lambda}{\nu} - \frac{\mathcal{J}}{\nu^2}\right)\right]^{-1} \\
&= \left(I - \left[\frac{\mathcal{J}}{\nu^2} - \frac{i\mathcal{M}\Lambda}{\nu}\right]\right)^{-1}\left(\frac{-\mathcal{M}^{-1}}{\nu^2}\right) ,
\end{aligned}
$$

se $|\nu|$ é suficientemente grande, $\left\|\frac{\mathcal{J}}{\nu^2} - \frac{i\mathcal{M}\Lambda}{\nu}\right\| < 1$, e desta maneira pode-se usar que $(I - \mathcal{W})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{W}^n$ (válida quando $\|\mathcal{W}\| < 1$; [23] página 99) $\Rightarrow$

$$
Z^{-1}(\nu) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\mathcal{J}}{\nu^2} - \frac{i\mathcal{M}\Lambda}{\nu}\right)^n\left(\frac{-\mathcal{M}^{-1}}{\nu^2}\right) , \tag{3.15}
$$

assim

$$
\begin{aligned}
|\mathfrak{F}(-s)| &\leq \lim_{R\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}|iR\mathrm{e}^{i\theta}|\left\|Z^{-1}(R\mathrm{e}^{i\theta})\right\| \mathrm{d}\theta \\
&\leq \lim_{R\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{|\mathrm{e}^{-i2\theta}|}{R^2}|iR\mathrm{e}^{i\theta}|\sum_{n=0}^{\infty}\left\|\frac{\mathrm{e}^{2i\theta}\mathcal{J}}{R^2} - \frac{i\mathrm{e}^{-i\theta}\mathcal{M}\Lambda}{R}\right\|^n\mathcal{M}^{-1}\,\mathrm{d}\theta \\
&\leq \lim_{R\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{R^{n+1}}\left\|\frac{\mathrm{e}^{2i\theta}\mathcal{J}}{R} - i\mathrm{e}^{-i\theta}\mathcal{M}\Lambda\right\|^n\mathcal{M}^{-1}\,\mathrm{d}\theta \\
&\leq \frac{1}{2\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\int_0^{\pi}\lim_{R\to\infty}\frac{1}{R^{n+1}}\left\|\frac{\mathrm{e}^{2i\theta}\mathcal{J}}{R} - i\mathrm{e}^{-i\theta}\mathcal{M}\Lambda\right\|^n\mathcal{M}^{-1}\,\mathrm{d}\theta \leq 0 ,
\end{aligned}
$$

portanto

$$
\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-i\nu t}Z^{-1}(\nu)\,\mathrm{d}\nu = \begin{cases}\mathfrak{F}(t) \ , \ t \geq 0 \\ 0 \ , \ t \leq 0\end{cases} ,
$$

e vale então que $\dot{\mathfrak{F}}(t) = 0$ se $t < 0$ e

$$
\begin{aligned}
\dot{\mathfrak{F}}(t) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\mathrm{e}^{-i\nu t}}{\mathrm{d}t}Z^{-1}(\nu)\,\mathrm{d}\nu \\
&= \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-i\nu t}Z^{-1}(\nu)\nu\,\mathrm{d}\nu \ , \ t > 0 .
\end{aligned}
$$

Com tudo o que foi mostrado acima, a integral em (3.12) pode ser estendida à toda reta,

$$\left\langle \phi^\dagger(\infty)\phi(\infty) \right\rangle = 2\int_{-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} \mathfrak{F}(t)\mathcal{M}\Lambda T\mathfrak{F}^\dagger(t) & \mathfrak{F}(t)\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t) \\ \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\mathcal{M}\Lambda T\mathfrak{F}^\dagger(t) & \mathcal{M}\dot{\mathfrak{F}}(t)\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t)\mathcal{M} \end{pmatrix} \mathrm{d}t \ , \ \mathrm{e}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}^{-1}\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty) \right\rangle \mathcal{M}^{-1} &= 2\int_{-\infty}^{\infty} \dot{\mathfrak{F}}(t)\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t)\ \mathrm{d}t \\ &= \frac{1}{2\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-i\nu t}Z^{-1}(\nu)\nu\ \mathrm{d}\nu\mathcal{M}\Lambda T\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\eta t}Z^{-1}(-\eta)\eta\ \mathrm{d}\eta\ \mathrm{d}t \ , \end{aligned}$$

onde foi usado que

$$(Z^{-1}(\nu))^\dagger = (Z^\dagger(\nu))^{-1} = (\mathcal{J}^\dagger - \nu^2\mathcal{M}^\dagger + i\nu\mathcal{M}^\dagger\Lambda^\dagger)^{-1} = Z^{-1}(-\nu) \ ,$$

mas reparando que

$$\delta(\nu-\eta) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-i(\nu-\eta)t}\ \mathrm{d}t \ \Rightarrow$$

$$\mathcal{M}^{-1}\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty) \right\rangle \mathcal{M}^{-1} = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\nu\eta\mathcal{M}\Lambda TZ^{-1}(-\eta)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-i(\nu-\eta)t}}{2\pi}\ \mathrm{d}t\ \mathrm{d}\nu\ \mathrm{d}\eta \ \Rightarrow$$

$$\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty) \right\rangle = \frac{\mathcal{M}}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\mathcal{M}\Lambda TZ^{-1}(-\nu)\nu^2\ \mathrm{d}\nu\mathcal{M} \ . \tag{3.16}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{q}^\dagger(\infty)\mathbf{q}(\infty) \right\rangle &= 2\int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{F}(t)\mathcal{M}\Lambda T\mathfrak{F}^\dagger(t)\ \mathrm{d}t \\ &= \frac{1}{2\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-i\nu t}Z^{-1}(\nu)\ \mathrm{d}\nu\mathcal{M}\Lambda T\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\eta t}Z^{-1}(-\eta)\ \mathrm{d}\eta\ \mathrm{d}t \\ &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\mathcal{M}\Lambda TZ^{-1}(-\eta)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-i(\nu-\eta)t}}{2\pi}\ \mathrm{d}t\ \mathrm{d}\nu\ \mathrm{d}\eta \\ &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\mathcal{M}\Lambda TZ^{-1}(-\nu)\ \mathrm{d}\nu \ . \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{q}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty) \right\rangle &= 2\int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{F}(t)\mathcal{M}\Lambda T\dot{\mathfrak{F}}^\dagger(t)\ \mathrm{d}t\mathcal{M} \\ &= -\frac{1}{2\pi^2 i}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-i\nu t}Z^{-1}(\nu)\ \mathrm{d}\nu\mathcal{M}\Lambda T\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\eta t}Z^{-1}(-\eta)\eta\ \mathrm{d}\eta\ \mathrm{d}t\mathcal{M} \\ &= -\frac{1}{i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\mathcal{M}\Lambda TZ^{-1}(-\eta)\eta\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-i(\nu-\eta)t}}{2\pi}\ \mathrm{d}t\ \mathrm{d}\nu\ \mathrm{d}\eta\mathcal{M} \\ &= \frac{i}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\mathcal{M}\Lambda TZ^{-1}(-\nu)\nu\ \mathrm{d}\nu\mathcal{M} \ . \end{aligned}$$

De (3.14),

$$-\nu\Lambda\mathcal{M} = \mathrm{Im}\{Z(\nu)\} = \frac{Z(\nu) - Z(-\nu)}{2i} = \mathrm{Re}\{-iZ(\nu)\}\ ,$$

substituindo em (3.16) no caso particular em que $T$ é diagonal,

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}^{-1}\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty)\right\rangle \mathcal{M}^{-1} &= \frac{T}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)[Z(-\nu) - Z(\nu)]Z^{-1}(-\nu)\nu\ \mathrm{d}\nu \\
&= \frac{T}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} [Z^{-1}(\nu) - Z^{-1}(-\nu)]\nu\ \mathrm{d}\nu \\
&= \frac{T}{\pi}\ \mathrm{Im}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\nu\ \mathrm{d}\nu\right\} \\
&= 2T\ \mathrm{Re}\left\{\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\nu\ \mathrm{d}\nu\right\}\ ,
\end{aligned}$$

integrando em um semicírculo de raio $R$ no plano superior de $\mathbb{C}$, por ser $Z^{-1}$ analítica nessa região e usando (3.15),

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}^{-1}\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty)\right\rangle \mathcal{M}^{-1} &= 2T\ \mathrm{Re}\left\{\lim_{R\to\infty}\frac{-1}{2\pi}\int_0^{\pi} Z^{-1}(R\mathrm{e}^{i\theta})R^2\mathrm{e}^{2i\theta}\ \mathrm{d}\theta\right\} \\
&= 2T\ \mathrm{Re}\left\{\lim_{R\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\mathcal{J}}{R^2\mathrm{e}^{2i\theta}} - \frac{i\mathcal{M}\Lambda}{R\mathrm{e}^{i\theta}}\right)^n \mathrm{d}\theta\right\}\mathcal{M}^{-1} \\
&= T\mathcal{M}^{-1}\ \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty)\right\rangle = \mathcal{M}T\ \Rightarrow$$

$$\frac{\mathcal{M}}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\mathcal{M}\Lambda Z^{-1}(-\nu)\nu^2\ \mathrm{d}\nu = I\ . \tag{3.17}$$

Repetindo o mesmo raciocínio para $\left\langle \mathbf{q}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty)\right\rangle$ tem-se,

$$\begin{aligned}
\left\langle \mathbf{q}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty)\right\rangle &= \frac{T}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)[Z(-\nu) - Z(\nu)]Z^{-1}(-\nu)\ \mathrm{d}\nu\mathcal{M} \\
&= \frac{T}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} [Z^{-1}(\nu) - Z^{-1}(-\nu)]\ \mathrm{d}\nu\mathcal{M} \\
&= \frac{iT}{\pi}\ \mathrm{Im}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} Z^{-1}(\nu)\ \mathrm{d}\nu\right\}\mathcal{M} \\
&= \frac{iT}{\pi}\ \mathrm{Im}\left\{-\lim_{R\to\infty}\int_0^{\pi} Z^{-1}(R\mathrm{e}^{i\theta})iR\mathrm{e}^{i\theta}\ \mathrm{d}\theta\right\}\mathcal{M} \\
&= \frac{iT}{\pi}\ \mathrm{Im}\left\{-\lim_{R\to\infty}\int_0^{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\mathcal{J}}{R^2\mathrm{e}^{2i\theta}} - \frac{i\mathcal{M}\Lambda}{R\mathrm{e}^{i\theta}}\right)^n \frac{i\mathrm{e}^{-i\theta}}{R}\ \mathrm{d}\theta\right\} \\
&= 0\ .
\end{aligned}$$

Para $\left\langle \mathbf{q}^\dagger(\infty)\mathbf{q}(\infty)\right\rangle$ deve-se tomar cuidado com a singularidade que existe na origem,

$$\begin{aligned}
\left\langle \mathbf{q}^\dagger(\infty)\mathbf{q}(\infty)\right\rangle &= \frac{T}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{Z^{-1}(\nu)[Z(-\nu)-Z(\nu)]Z^{-1}(-\nu)}{\nu}\,\mathrm{d}\nu \\
&= \frac{T}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{[Z^{-1}(\nu)-Z^{-1}(-\nu)]}{\nu}\,\mathrm{d}\nu \\
&= \frac{T}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{Z^{-1}(\nu)}{\nu}\,\mathrm{d}\nu\right\} ,
\end{aligned}$$

integrando em uma região anelar de raio externo $R$ e interno $\epsilon$, no plano superior de $\mathbb{C}$; e reescrevendo (3.14)

$$Z^{-1}(\nu) = \mathcal{J}^{-1}(I - \nu^2\mathcal{J}^{-1}\mathcal{M} - i\nu\mathcal{J}^{-1}\mathcal{M}\Lambda)^{-1} ,$$

se $|\nu|$ for suficientemente pequeno $\|\nu^2\mathcal{J}^{-1}\mathcal{M} + i\nu\mathcal{J}^{-1}\mathcal{M}\Lambda\| < 1$ o que implica

$$Z^{-1}(\nu) = \mathcal{J}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}(\nu^2\mathcal{J}^{-1}\mathcal{M} + i\nu\mathcal{J}^{-1}\mathcal{M}\Lambda)^n ,$$

assim:

$$\begin{aligned}
\left\langle \mathbf{q}^\dagger(\infty)\mathbf{q}(\infty)\right\rangle &= \frac{T}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{\lim_{\epsilon\to 0} i\int_0^{\pi} Z^{-1}(\epsilon \mathrm{e}^{i\varphi})\,\mathrm{d}\varphi - \lim_{R\to\infty} i\int_0^{\pi} Z^{-1}(R\mathrm{e}^{i\theta})\,\mathrm{d}\theta\right\} \\
&= \frac{T}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{ i\mathcal{J}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\int_0^{\pi}\lim_{\epsilon\to 0}(\epsilon^2\mathrm{e}^{2i\varphi}\mathcal{J}^{-1}\mathcal{M} + i\epsilon\mathrm{e}^{i\varphi}\mathcal{J}^{-1}\mathcal{M}\Lambda)^n\,\mathrm{d}\varphi \right. \\
&\quad \left. + \sum_{n=0}^{\infty}\int_0^{\pi}\lim_{R\to\infty}\left(\frac{\mathcal{J}}{R^2\mathrm{e}^{2i\theta}} - \frac{i\mathcal{M}\Lambda}{R\mathrm{e}^{i\theta}}\right)^n \frac{\mathrm{e}^{-2i\theta}}{R^2}\,\mathrm{d}\theta\mathcal{M}^{-1}\right\} \\
&= \frac{T}{\pi}\,\mathrm{Im}\{i\mathcal{J}^{-1}\pi\} = T\mathcal{J}^{-1} .
\end{aligned}$$

Como esperado, quando o perfil de temperatura dos reservatórios é constante obtem-se a distribuição de Boltzmann-Gibbs, com covariância

$$\left\langle \phi^\dagger(\infty)\phi(\infty)\right\rangle = \begin{pmatrix} \mathcal{J}^{-1}T & 0 \\ 0 & \mathcal{M}T \end{pmatrix} .$$

No estado estacionário, em média, a quantidade de energia que entra em um sítio é igual à quantidade de energia que sai do mesmo, ou seja, $\frac{\mathrm{d}\langle\mathcal{H}_l\rangle}{\mathrm{d}t}(\infty) = 0$, logo por (2.10) e (2.9):

$$0 = \zeta_l T_l - \frac{\zeta_l}{m_l}\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty)\right\rangle_{ll} - \langle \mathcal{F}_{l\to} - \mathcal{F}_{\to l}\rangle ,$$

e fluxo de calor do sistema no sítio $l$ no estado estacionário é dado por

$$\langle \mathcal{F}_{\to l} - \mathcal{F}_{l\to} \rangle = \zeta_l T_l - \frac{\zeta_l}{m_l} \left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty) \right\rangle_{ll} \ .$$

Para obter o fluxo no estado estacionário basta calcular para todo $l$ $\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty) \right\rangle_{ll}$,

$$\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty) \right\rangle_{ll} = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [\mathcal{M}Z^{-1}(\nu)]_{lj} [\mathcal{M}\Lambda T Z^{-1}(-\nu)\mathcal{M}]_{jl} \nu^2 \ \mathrm{d}\nu \ ;$$

mas

$$[\mathcal{M}Z^{-1}(\nu)]_{lj} = \sum_{k=1}^{N} [\mathcal{M}]_l k [Z^{-1}(\nu)]_{kj} = m_l [Z^{-1}(\nu)]_{lj} \ ,$$

$$[\mathcal{M}\Lambda T Z^{-1}(-\nu)\mathcal{M}]_{jl} = m_j \zeta_j T_j [Z^{-1}(-\nu)\mathcal{M}]_{jl} = m_j \zeta_j T_j [Z^{-1}(-\nu)]_{jl} m_l \ ,$$

e como $Z^{-1}(-\nu) = (Z^{-1}(\nu))^\dagger$ isto implica que $[Z^{-1}(-\nu)]_{jl} = [Z^{-1}(\nu)]^*_{lj}$, portanto

$$\left\langle \mathbf{p}^\dagger(\infty)\mathbf{p}(\infty) \right\rangle_{ll} = \sum_{j=1}^{N} \frac{T_j m_j \zeta_j m_l^2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |Z^{-1}(\nu)_{lj}|^2 \nu^2 \ \mathrm{d}\nu \ .$$

Desta maneira

$$\langle \mathcal{F}_{\to l} - \mathcal{F}_{l\to} \rangle = \zeta_l T_l - \zeta_l m_l \sum_{j=1}^{N} \frac{T_j m_j \zeta_j m_l^2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |Z^{-1}(\nu)_{lj}|^2 \nu^2 \ \mathrm{d}\nu \ ,$$

mas usando (3.17),

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [\mathcal{M}Z^{-1}(\nu)]_{lj} [\mathcal{M}\Lambda Z^{-1}(-\nu)\mathcal{M}]_{jl} \nu^2 \ \mathrm{d}\nu \\ &= \sum_{j=1}^{N} \frac{m_l m_j \zeta_j}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |Z^{-1}(\nu)_{lj}|^2 \nu^2 \ \mathrm{d}\nu \ \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle \mathcal{F}_{\to l} - \mathcal{F}_{l\to} \rangle = \sum_{j=1}^{N} \frac{(T_l - T_j)\zeta_l m_l m_j \zeta_j}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |Z^{-1}(\nu)_{lj}|^2 \nu^2 \ \mathrm{d}\nu \ .$$

O elemento $Z^{-1}(\nu)_{lj}$ pode ser reescrito com o uso de cofatores, [24] página 272,

$$Z^{-1}(\nu)_{lj} = \frac{\det(Z(\nu)[l;j])}{\det(Z(\nu))} \ ,$$

definindo $C_{lj}(\nu) = \det(Z(\nu)[l;j])$ tem-se

$$|Z^{-1}(\nu)_{lj}|^2 = \frac{|C_{lj}(\nu)|^2}{|\det(Z(\nu))|^2} \ .$$

Considera-se a partir de agora que a cadeia contém $A$ partículas e está acoplada apenas com os banhos das extremidades, $\Lambda_{ij} = \delta_{ij}(\zeta_1\delta_{i1} + \zeta_A\delta_{iA})$, nomeia-se $T_1 = T_L$ e $T_A = T_R$; com isso, o fluxo de calor na cadeia, $\mathcal{F}_A$, se expressa como:

$$\mathcal{F}_A = \langle \mathcal{F}_{\to 1} - \mathcal{F}_{1\to} \rangle = \langle \mathcal{F}_{\to A} - \mathcal{F}_{A\to} \rangle = \frac{(T_L - T_R)\zeta_1\zeta_A m_1 m_A}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|C_{1A}(\nu)|^2}{|\det(Z(\nu))|^2} \nu^2 \, d\nu \ . \tag{3.18}$$

$$C_{1A}(\nu) = \det((\mathcal{J} - \nu^2\mathcal{M} - i\nu\Lambda\mathcal{M})[1;A]) =$$

$$\det \begin{pmatrix} -\omega^2 & 2\omega^2 + \omega_2^2 - \nu^2 m_2 & -\omega^2 & \cdots & 0 \\ 0 & -\omega^2 & 2\omega^2 + \omega_3^2 - \nu^2 m_3 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -\omega^2 \\ 0 & 0 & \cdots & -\omega^2 & 2\omega^2 + \omega_{A-1}^2 - \nu^2 m_{A-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\omega^2 \end{pmatrix}$$

$$= (-\omega^2)^{A-1} \ \Rightarrow$$

$$|C_{1A}(\nu)|^2 = \omega^{4(A-1)} \ . \tag{3.19}$$

Calculando $\det Z(\nu)$.

$$[Z(\nu)]_{ij} = \begin{cases} \mathcal{J}_{11} - \nu^2\mathcal{M}_{11} - i\nu m_1\zeta_1 \\ \mathcal{J}_{AA} - \nu^2\mathcal{M}_{AA} - i\nu m_A\zeta_A \\ \mathcal{J}_{ij} - \nu^2\mathcal{M}_{ij} \quad i,j \neq 1,1 \text{ ou } A,A \end{cases} ,$$

por conveniência se define $\mathcal{B}(\nu) = \mathcal{J} - \nu^2\mathcal{M}$, logo $Z(\nu) = \mathcal{B}(\nu) - i\nu\mathcal{M}\Lambda$.

$$\det Z(\nu) = \sum_{j=1}^{A} (-1)^{j+A} Z(\nu)_{j,A} \det(Z(\nu)[j;A]) \ ,$$

$Z(\nu)[1;A] = \mathcal{B}(\nu)[1;A]$, e se $j \neq A$ então $Z(\nu)_{j,A} = \mathcal{B}(\nu)_{j,A}$ e $Z(\nu)_{AA} = \mathcal{B}(\nu)_{A,A} - i\nu m_A\zeta_A$, portanto

$$\begin{aligned} \det Z \ &= \ (-1)^{1+A}\mathcal{B}_{1,A}\det(\mathcal{B}[1;A]) + \sum_{j=2}^{A-1}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\det(Z[j;A]) \\ &\quad + (-1)^{2A}(\mathcal{B}_{A,A} - i\nu\zeta_A m_A)\det(Z[A;A]) \ . \end{aligned}$$

Para $j \neq 1, A$ vale

$$\begin{aligned}
\det(Z[j;A]) &= \sum_{k=1}^{j-1}(-1)^{1+k}[Z[j;A]]_{k,1}\det((Z[j;A])[k;1]) \\
&\quad + \sum_{k=j+1}^{A}(-1)^{K}[Z[j;A]]_{k-1,1}\det((Z[j;A])[k-1;1]) \\
&= (-1)^2(\mathcal{B}_{1,1} - i\nu\zeta_1 m_1)\det((Z[j;A])[1;1]) \\
&\quad + \sum_{k=2}^{j-1}(-1)^{1+k}\mathcal{B}_{k,1}\det((Z[j;A])[k;1]) \\
&\quad + \sum_{k=j+1}^{A}(-1)^{k}\mathcal{B}_{k,1}\det((Z[j;A])[k-1;1]) \ ,
\end{aligned}$$

onde foi usado que $((Z[j;A])[1;1])_{1,1} = \mathcal{B}_{1,1} - i\nu\zeta_1 m_1$ e $((Z[j;A])[1;1])_{k,1} = \mathcal{B}_{k,1}$ se $k < j$, $((Z[j;A])[1;1])_{k-1,1} = \mathcal{B}_{k,1}$ se $k > j$.

$$\begin{aligned}
\det(Z[A;A]) &= \sum_{k=1}^{A-1}(-1)^{1+k}[Z[A;A]]_{k,1}\det((Z[A;A])[k;1]) \\
&= (\mathcal{B}_{1,1} - i\nu\zeta_1 m_1)\det((\mathcal{B}[A;A])[1;1]) \\
&\quad + \sum_{k=2}^{A-1}(-1)^{1+k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[A;A])[k;1]) \ .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\det Z &= (-1)^{1+A}\mathcal{B}_{1,A}\det(\mathcal{B}[1;A]) \\
&\quad + (\mathcal{B}_{A,A} - i\nu\zeta_A m_A)(\mathcal{B}_{1,1} - i\nu\zeta_1 m_1)\det((\mathcal{B}[A;A])[1;1]) \\
&\quad + (\mathcal{B}_{A,A} - i\nu\zeta_A m_A)\sum_{k=2}^{A-1}(-1)^{1+k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[A;A])[k;1]) \\
&\quad + \sum_{j=2}^{A-1}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\left\{\begin{array}{l} \displaystyle\sum_{k=2}^{j-1}(-1)^{1+k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[k;1]) \\ \displaystyle\quad + \sum_{k=j+1}^{A}(-1)^{k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[k-1;1]) \end{array}\right\} \\
&\quad + \sum_{j=2}^{A-1}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}(\mathcal{B}_{1,1} - i\nu\zeta_1 m_1)\det((\mathcal{B}[j;A])[1;1]) \ .
\end{aligned}$$

Define-se $K_{j,l}(\nu)$ como o determinante da matriz $(\mathcal{J} - \nu^2\mathcal{M})$, de tamanho $(l-j) \times (l-j)$, para uma cadeia particular que começa no sítio $j$ e termina no sítio $l$; $\mathcal{M}$,nesse caso, sendo a matriz diagonal dado pelas massas das partículas $(m_j, m_{j+1}, \ldots, m_l)$; $\mathcal{J}$ é a matriz de interação entre as partículas (no caso de uma cadeia que começa no sítio $j$ e termina no sítio $l$, como dito).

Por definição,

$$\begin{aligned}
K_{1,A} &= \det\mathcal{B} = \sum_{j=1}^{A}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\det(\mathcal{B}[j;A]) \\
&= \sum_{j=1}^{A}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\left\{\begin{array}{l} \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1}(-1)^{1+k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[k;1]) \\ \displaystyle\quad + \sum_{k=j+1}^{A}(-1)^{k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[k-1;1]) \end{array}\right\} \\
&= (-1)^{1+A}\mathcal{B}_{1,A}\sum_{k=2}^{A}(-1)^{k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[1;A])[k-1;1]) \\
&\quad + (-1)^{2A}\mathcal{B}_{A,A}\sum_{k=1}^{A-1}(-1)^{k+1}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[A;A])[k;1]) \\
&\quad + \sum_{j=2}^{A-1}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\left\{\begin{array}{l} \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1}(-1)^{1+k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[k;1]) \\ \displaystyle\quad + \sum_{k=j+1}^{A}(-1)^{k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[k-1;1]) \end{array}\right\},
\end{aligned}$$

mas $(\mathcal{B}[1;A])_{j-1,1} = \mathcal{B}_{j,1}$ e

$$\det(\mathcal{B}[1;A]) = \sum_{j=2}^{A}(-1)^{j}(\mathcal{B}[1;A])_{j-1,1}\det((\mathcal{B}[1;A])[j-1;1]) \ \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
K_{1,A} &= (-1)^{1+A}\mathcal{B}_{1,A}\det(\mathcal{B}[1;A]) + \mathcal{B}_{A,A}\mathcal{B}_{1,1}\det((\mathcal{B}[A;A])[1;1]) \\
&\quad + \mathcal{B}_{A,A}\sum_{k=2}^{A-1}(-1)^{k+1}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[A;A])[k;1]) \\
&\quad + \sum_{j=2}^{A-1}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\mathcal{B}_{1,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[1;1]) \\
&\quad + \sum_{j=2}^{A-1}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\left\{\begin{array}{l} \displaystyle\sum_{k=2}^{j-1}(-1)^{1+k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[k;1]) \\ \displaystyle\quad + \sum_{k=j+1}^{A}(-1)^{k}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[j;A])[k-1;1]) \end{array}\right\}.
\end{aligned}$$

Observando que $K_{2,A-1} = \det((\mathcal{B}[A;A])[1;1])$ e que

$$K_{1,A-1} = \det(\mathcal{B}[A;A]) = \sum_{k\,=\,1}^{A\,-\,1} (-1)^{k+1}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[A;A])[k;1]) \;\;\Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
\det Z \;\; &= \;\; K_{1,A} - (\nu^2\zeta_1\zeta_A m_1 m_A + i\nu\zeta_A m_A\mathcal{B}_{1,1} + i\nu\zeta_1 m_1\mathcal{B}_{A,A})K_{2,A-1} \\
&\quad -i\nu\zeta_A m_A \sum_{k\,=\,2}^{A\,-\,1}(-1)^{k+1}\mathcal{B}_{k,1}\det((\mathcal{B}[A;A])[k;1]) \\
&\quad -i\nu\zeta_1 m_1 \sum_{k\,=\,2}^{A\,-\,1}(-1)^{k+A}\mathcal{B}_{k,A}\det((\mathcal{B}[k;A])[1;1]) \\
&= \;\; K_{1,A} - (\nu^2\zeta_1 m_1\zeta_A m_A + i\nu\zeta_1 m_1\mathcal{B}_{A,A})K_{2,A-1} - i\nu\zeta_A m_A K_{1,A-1} \\
&\quad -i\nu\zeta_1 m_1 \sum_{k\,=\,2}^{A\,-\,1}(-1)^{k+A}\mathcal{B}_{k,A}\det((\mathcal{B}[k;A])[1;1]) \;.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_{2,A} \;\; &= \;\; \det(\mathcal{B}[1;1]) = \sum_{j\,=\,2}^{A}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\det((\mathcal{B}[1;1])[j;A]) \\
&= \;\; (-1)^{2A}\mathcal{B}_{A,A}\det((\mathcal{B}[1;1])[A;A]) \\
&\quad\;\; + \sum_{j\,=\,2}^{A\,-\,1}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\det((\mathcal{B}[1;1])[j;A]) \\
&= \;\; \mathcal{B}_{A,A}K_{2,A-1} + \sum_{j\,=\,2}^{A\,-\,1}(-1)^{j+A}\mathcal{B}_{j,A}\det((\mathcal{B}[j;A])[1;1]) \;.
\end{aligned}$$

$$\det Z(\nu) = K_{1,A} - \nu^2\zeta_1 m_1\zeta_A m_A K_{2,A-1} - i\nu\zeta_A m_A K_{1,A-1} - i\nu\zeta_1 m_1 K_{2,A} \;\;\Rightarrow$$

$$|\det Z(\nu)|^2 = (K_{1,A} - \nu^2\zeta_1 m_1\zeta_A m_A K_{2,A-1})^2 + (\nu\zeta_A m_A K_{1,A-1} + \nu\zeta_1 m_1 K_{2,A})^2 \;. \quad (3.20)$$

Desenvolvendo o determinante $K_{j,A}(\nu)$ na última coluna tem-se dois termos: um multiplicando o elemento $(\mathcal{J} - \nu^2\mathcal{M})_{A-1,A}$, e outro multiplicando $(\mathcal{J} - \nu^2\mathcal{M})_{A,A}$. O primeiro termo pode ser desenvolvido na última linha, fornecendo $K_{j,A-2}(\nu)$, enquanto o segundo termo é $K_{j,A-1}(\nu)$;

$$K_{j,A} = h_A K_{j,A-1} - \omega^4 K_{j,A-2} \;, \qquad (3.21)$$

onde $h_i = (2\omega^2 + \omega_i^2 - \nu^2 m_i)$.

$$\begin{cases} K_{1,A}K_{2,A-1} = h_A K_{1,A-1}K_{2,A-1} - \omega^4 K_{1,A-2}K_{2,A-1} \\ K_{1,A-1}K_{2,A} = h_A K_{1,A-1}K_{2,A-1} - \omega^4 K_{1,A-1}K_{2,A-2} \end{cases} \Rightarrow$$

$$K_{1,A}K_{2,A-1} - K_{1,A-1}K_{2,A} = \omega^4(K_{1,A-1}K_{2,A-2} - K_{1,A-2}K_{2,A-1}) \Rightarrow$$

por recorrência

$$K_{1,A}K_{2,A-1} - K_{1,A-1}K_{2,A} = \omega^{4(A-1)}(K_{1,1}K_{2,0} - K_{1,0}K_{2,1}) \ .$$

Por definição, $K_{1,1} = h_1$ e $K_{2,2} = h_2$;

$$K_{1,2} = \det \begin{pmatrix} h_1 & -\omega^2 \\ -\omega^2 & h_2 \end{pmatrix} = h_1 h_2 - \omega^4 \ ,$$

mas

$$K_{1,2} = h_2 K_{1,1} - \omega^4 K_{1,0} \ \Rightarrow \ K_{1,0} = 1 \ ;$$

$$K_{2,2} = h_2 K_{2,1} - \omega^4 K_{2,0} \ \Rightarrow \ K_{2,1} = 1 \text{ e } K_{2,0} = 0 \ ,$$

portanto

$$K_{1,A}K_{2,A-1} - K_{1,A-1}K_{2,A} = -\omega^{4(A-1)} \ . \tag{3.22}$$

Desta forma, o termo cruzado em (3.20) pode ser eliminado usando (3.22), e substituindo (3.19) e (3.20) em (3.18),

$$\mathcal{F}_A = \frac{(T_L - T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_A m_A \omega^{4(A-1)}}{\pi} \times$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\nu^2 \mathrm{d}\nu}{2\zeta_1 m_1 \zeta_A m_A \omega^{4(A-1)}\nu^2 + (K_{1,A}^2 + \nu^2\zeta_A^2 m_A^2 K_{1,A-1}^2) + \nu^2\zeta_1^2 m_1^2(K_{2,A}^2 + \nu^2\zeta_A^2 m_A^2 K_{2,A-1}^2)} \ .$$

Fazendo a mudança de variáveis definida por $\breve{\mathbf{q}} = \omega\mathbf{q}$ e $\breve{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/\omega$ e reescalando a massa do sistema, $\breve{\mathcal{M}} = \mathcal{M}/\omega^2$, as equações da dinâmica (3.2) são mapeadas em

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\breve{\mathbf{q}} &= \omega \mathrm{d}\mathbf{q} = \omega\mathcal{M}^{-1}\mathbf{p}\mathrm{d}t = \omega^2\mathcal{M}^{-1}\breve{\mathbf{p}}\mathrm{d}t = \breve{\mathcal{M}}^{-1}\breve{\mathbf{p}}\mathrm{d}t \ , \\ \mathrm{d}\breve{\mathbf{p}} &= \omega^{-1}\mathrm{d}\mathbf{p} = -(\omega^{-1}\mathcal{J}\mathbf{q} + \Lambda\breve{\mathbf{p}})\mathrm{d}t + \sqrt{2\omega^{-2}\mathcal{M}\Lambda T}\mathrm{d}B \\ &= -(\omega^{-2}\mathcal{J}\breve{\mathbf{q}} + \Lambda\breve{\mathbf{p}})\mathrm{d}t + \sqrt{2\breve{\mathcal{M}}\Lambda T}\mathrm{d}B \\ &= -([\omega^{-2}\Omega_0^2 - \Delta]\breve{\mathbf{q}} + \Lambda\breve{\mathbf{p}})\mathrm{d}t + \sqrt{2\breve{\mathcal{M}}\Lambda T}\mathrm{d}B \ , \end{aligned}$$

definindo $\breve{\mathcal{J}} = \omega^{-2}\Omega_0^2 - \Delta$, ao invés de escolher $\omega = 1$ é equivalente tomar o sistema com massa $\breve{\mathcal{M}}$ e interação $\breve{\mathcal{J}}$. Em diante será considerado o sistema com $\omega = 1$, e por motivos que serão esclarecidos na próxima subseção, $\Omega_0 = \omega_0 I$, ou seja, $\mathcal{J} = -\Delta + \omega_0^2 I$.

Denominando $Z_A$ o determinante de $Z$, tem-se

$$\mathcal{F}_A = \frac{(T_L - T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_A m_A}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2} \, \mathrm{d}\nu \; . \tag{3.23}$$

### 3.1.1 Cadeias periódicas com banhos apenas nas extremidades

Agora será feita uma análise para o caso de uma cadeia periódica cuja a célula unitária contêm $C$ partículas de massas $m_1$, $m_2$, ..., $m_C$, e valendo $m_i = m_{C+i}$. A cadeia possui $N$ células desta, assim o número total de partículas é $A = NC$. Mostra-se nesta seção, obtendo o fluxo de calor no limite termodinâmico, que esse sistema não satisfaz a lei de Fourier (1.1), e além disto é apresentado o comportamento qualitativo do fluxo em relação à constante dissipativa $\zeta$.

Primeiramente, a relação de recorrência (3.21) pode ser escrita de maneira matricial:

$$\begin{pmatrix} h_A & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{1,A-1} & -K_{2,A-1} \\ K_{1,A-2} & -K_{2,A-2} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} h_A K_{1,A-1} - K_{1,A-2} & -[h_A K_{2,A-1} - K_{2,A-2}] \\ K_{1,A-1} & -K_{2,A-1} \end{pmatrix} ,$$

mas $K_{j,A} = h_A K_{j,A-1} - K_{j,A-2}$ e definindo $Q_A = \begin{pmatrix} K_{1,A} & -K_{2,A} \\ K_{1,A-1} & -K_{2,A-1} \end{pmatrix} \Rightarrow$

$$Q_A = \begin{pmatrix} h_A & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} Q_{A-1} \; . \tag{3.24}$$

Esta última relação (3.24) é importante, já que $|Z_A|^2$ (denominador no integrando de

(3.23)) pode ser escrito como

$$Z_A = \begin{pmatrix} 1 & -i\zeta_A m_A \nu \end{pmatrix} Q_A \begin{pmatrix} 1 \\ i\zeta_1 m_1 \nu \end{pmatrix} , \tag{3.25}$$

pois

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -i\zeta_A m_A \nu \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} K_{1,A} & -K_{2,A} \\ K_{1,A-1} & -K_{2,A-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i\zeta_1 m_1 \nu \end{pmatrix}$$
$$= \begin{matrix} K_{1,A} - i\zeta_A m_A \nu K_{1,A-1} \\ -i\zeta_1 m_1 \nu K_{2,A} - \zeta_A m_A \zeta_1 m_1 \nu^2 K_{2,A-1} \end{matrix} .$$

A relação (3.24) pode ser simplificada: por recorrência e usando $h_1 = h_C$,

$$Q_A = \begin{pmatrix} h_C & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{C-1} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} h_1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} Q_{A-C} ,$$

mas $A = NC \Rightarrow$

$$Q_{NC} = \begin{pmatrix} h_C & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} h_1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} Q_{(N-1)C} ,$$

e como

$$Q_C = \begin{pmatrix} h_C & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} h_1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$$
$$Q_A = (Q_C)^N .$$

Reparando que

$$\det Q_C = \begin{bmatrix} K_{1,A} & -K_{2,A} \\ K_{1,A-1} & -K_{2,A-1} \end{bmatrix} = -K_{1,C}K_{2,C-1} + K_{1,C-1}K_{2,C} = 1 > 0 ,$$

faz razão evocar a seguinte proposição, que fornece uma expressão mais útil para $Q_A$:

**Proposição 2.** *Seja* $\mathcal{W} = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix}$ *uma matriz real,* $w_{ij} \in \mathbb{R}$*, com determinante positivo,* $\det\mathcal{W} = w_{11}w_{22} - w_{12}w_{21} > 0$*. Os autovalores de* $\mathcal{W}$*,* $\varpi_+$ *e* $\varpi_-$*, são* *da forma* $|\varpi_\pm| = (\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\mp i\theta}$, *onde* $\cos\theta = \dfrac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}}$ *e* $\varpi_\pm > 0 \;\Leftrightarrow\; \mathrm{tr} > 0$. *Além disto,*

$$\mathcal{W}^n = (\det\mathcal{W})^{\frac{n-1}{2}}\frac{\sin n\theta}{\sin\theta}\mathcal{W} + (\det\mathcal{W})^{\frac{n}{2}}\left(\cos n\theta - \frac{\sin n\theta\cos\theta}{\sin\theta}\right) I\ .$$

*Demonstração:*

$$0 = \det(\mathcal{W} - \varpi I) = (w_{11} - \varpi)(w_{22} - \varpi) - w_{12}w_{21} = \det\mathcal{W} - \varpi\mathrm{tr}\mathcal{W} + \varpi^2 \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
\varpi_\pm &= \frac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2} \pm \frac{\sqrt{(\mathrm{tr}\mathcal{W})^2 - 4\det\mathcal{W}}}{2} = \frac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2} \pm \sqrt{(\frac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2})^2 - \det\mathcal{W}} \\
&= (\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}} \pm \sqrt{\left[\frac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}}\right]^2 - 1}\right)\ ,
\end{aligned}$$

então se $\left|\dfrac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}}\right| < 1 \;\Rightarrow$

$$\varpi_\pm = (\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}} \pm i\sqrt{1 - \left[\frac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}}\right]^2}\right)\ ,$$

e como $\dfrac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}} \in \mathbb{R}$ existe $\theta \in \mathbb{R}$ tal que $\cos\theta = \dfrac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}} \;\Rightarrow$

$$\varpi_\pm = (\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}\left[\cos\theta \pm i\sqrt{1 - \cos^2\theta}\right] = (\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\mp i\theta}\ .$$

Se $\left|\dfrac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}}\right| \geq 1 \;\Rightarrow\; \varpi_\pm \in (-\mathrm{tr}\mathcal{W},\ \mathrm{tr}\mathcal{W})$, portanto existe $\vartheta \in \mathbb{R}$ tal que $|\varpi_+| = (\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\vartheta}$, e como $\det\mathcal{W} = \varpi_+\varpi_- \;\Rightarrow\; |\varpi_-| = (\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\vartheta}$ e definindo $\theta = i\vartheta \;\Rightarrow$ $\varpi_\pm = (\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\mp i\theta}$. Por valer $\varpi_\pm = \dfrac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2} \pm \sqrt{(\dfrac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2})^2 - \det\mathcal{W}}$, $\varpi_\pm > 0 \;\Leftrightarrow\; \mathrm{tr} > 0$, e quando $\dfrac{\mathrm{tr}\mathcal{W}}{2(\det\mathcal{W})^{\frac{1}{2}}} = 1$ isto implica $\vartheta = 0$.

Por indução será provado que

$$\mathcal{W}^n = \begin{pmatrix} [w_{11}E_{n-1}(\mathrm{tr}\mathcal{W},\det\mathcal{W}) - \det\mathcal{W}E_{n-2}(\mathrm{tr}\mathcal{W},\det\mathcal{W})] & w_{12}E_{n-1}(\mathrm{tr}\mathcal{W},\det\mathcal{W}) \\ w_{21}E_{n-1}(\mathrm{tr}\mathcal{W},\det\mathcal{W}) & [w_{22}E_{n-1}(\mathrm{tr}\mathcal{W},\det\mathcal{W}) - \det\mathcal{W}E_{n-2}(\mathrm{tr}\mathcal{W},\det\mathcal{W})] \end{pmatrix}\ ,$$

onde $E_n(x,\alpha)$ é um polinômio de Dickson do segundo tipo [25], definido por

$$\begin{cases} E_n(x,\alpha) = xE_{n-1}(x,\alpha) - \alpha E_{n-2}(x,\alpha) \ , \ n \geq 0 \\ \\ E_{-2}(x,\alpha) = -1/\alpha \text{ e } E_{-1}(x,\alpha) = 0 \ , \ \alpha \neq 0 \end{cases} .$$

De fato, se $n = 0$, como $E_{-1}(\text{tr}\mathcal{W}, \det\mathcal{W}) = 0$ e $E_{-2}(\text{tr}\mathcal{W}, \det\mathcal{W}) = -1/\det\mathcal{W}$, assim vale a relação. Supondo válida para $n$, tem-se para $n+1$ que

$$\mathcal{W}^{n+1} = \begin{pmatrix} [w_{11}E_{n-1} - \det\mathcal{W}E_{n-2}] & w_{12}E_{n-1} \\ w_{21}E_{n-1} & [w_{22}E_{n-1} - \det\mathcal{W}E_{n-2}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} [w_{11}^2E_{n-1} - w_{11}\det\mathcal{W}E_{n-2} + w_{12}w_{21}E_{n-1}] & [w_{11}w_{12}E_{n-1} - w_{12}\det\mathcal{W}E_{n-2} + w_{22}w_{12}E_{n-1}] \\ w_{11}w_{21}E_{n-1} - w_{21}\det\mathcal{W}E_{n-2} + w_{22}w_{21}E_{n-1} & [w_{22}^2E_{n-1} - w_{22}\det\mathcal{W}E_{n-2} + w_{12}w_{21}E_{n-1}] \end{pmatrix} .$$

Observando que $w_{ii}^2 + w_{12}w_{21} = w_{ii}\text{tr}\mathcal{W} - \det\mathcal{W} \ \Rightarrow$

$$\mathcal{W}^{n+1} = \begin{pmatrix} (w_{11}\text{tr}\mathcal{W} - \det\mathcal{W})E_{n-1} - w_{11}\det\mathcal{W}E_{n-2} & w_{12}\text{tr}\mathcal{W}E_{n-1} - w_{12}\det\mathcal{W}E_{n-2} \\ w_{12}\text{tr}\mathcal{W}E_{n-1} - w_{12}\det\mathcal{W}E_{n-2} & (w_{22}\text{tr}\mathcal{W} - \det\mathcal{W})E_{n-1} - w_{22}\det\mathcal{W}E_{n-2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} [w_{11}E_n - \det\mathcal{W}E_{n-1}] & w_{12}E_n \\ w_{21}E_n & [w_{22}E_n - \det\mathcal{W}E_{n-1}] \end{pmatrix} ,$$

valendo a fórmula para todo $n \geq 0$. A expressão acima pode ser reescrita como

$$\mathcal{W}^n = E_{n-1}(\text{tr}\mathcal{W}, \det\mathcal{W}) - \mathcal{W}\det\mathcal{W}E_{n-2}(\text{tr}\mathcal{W}, \det\mathcal{W})I \ ,$$

e usando a relação entre os polinômios de Dickson do segundo tipo e os de Chebyshev do segundo tipo [25], $E_n(2x\alpha, \alpha^2) = \alpha^n U_n(x)$, com $x = \cos\theta$ e $\alpha = \det\mathcal{W}$; e que

$$U_{n-1}(\cos\theta) = \frac{\sin n\theta}{\sin\theta} \ , \quad \text{e } U_{n-2}(\cos\theta) = \frac{\sin n\theta \cos\theta}{\sin\theta} - \cos n\theta \ ,$$

chega-se em

$$\mathcal{W}^n = (\det\mathcal{W})^{\frac{n-1}{2}} \frac{\sin n\theta}{\sin\theta}\mathcal{W} + (\det\mathcal{W})^{\frac{n}{2}} \left(\cos n\theta - \frac{\sin n\theta\cos\theta}{\sin\theta}\right) I \ .$$

■

Usando a proposição 2 para $Q_A = (Q_C)^N$ em (3.25) tem-se

$$Z_A = \frac{\sin Nq}{\sin q} Z_C + [1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2] \left( \cos Nq - \frac{\sin Nq \cos q}{\sin q} \right) \Rightarrow$$

$$Z_A = (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2) \cos Nq - \left( \frac{\sin Nq}{\sin q} \right) [Z_C - \cos q(1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2)] \ , \quad (3.26)$$

onde

$$Z_C = \begin{pmatrix} 1 & -i\zeta_C m_C \nu \end{pmatrix} Q_C \begin{pmatrix} 1 \\ i\zeta_1 m_1 \nu \end{pmatrix} .$$

substituindo (3.26) em

$$\mathcal{F}_A = \mathcal{F}(N, C) = \frac{(T_L - T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2} \, \mathrm{d}\nu \ \Rightarrow \qquad (3.27)$$

$$\mathcal{F}(N, C) = \frac{(T_L - T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \times$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\nu^2 \ \mathrm{d}\nu}{\left| (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2) \cos Nq - \left( \frac{\sin Nq}{\sin q} \right) [Z_C - \cos q(1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2)] \right|^2} .$$

Como $Q_C$ é uma matriz real com $\det Q_C = 1$, pela proposição 2, seus autovalores são da forma $\mathrm{e}^{\pm iq}$, com $q$ imaginário puro ou real. Se $|\mathrm{tr} Q_C/2| \leq 1 \ \Rightarrow \ q \in \mathbb{R}$, mas $\mathrm{tr} Q_C = \mathrm{e}^{+iq} + \mathrm{e}^{-iq} = 2\cos q$, assim $|\cos q| \leq 1$. O intuito agora é mostrar que se $q = ip$, $p \in \mathbb{R}$, então $\lim_{N\to\infty} |Z_A(\nu)|^2 = \infty$; desta forma, apenas valores de $\nu$ tais que $|\mathrm{tr} Q_C(\nu)| \leq 2$ contribuem para a integral em $\mathcal{F}(\infty, C)$. De fato, $\cos Nq = \cosh Np$ e $\sin Nq = i \sinh Np \ \Rightarrow$

$$Z_A = (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2) \cosh Np + \left( \frac{\sinh Np}{\sinh p} \right) [Z_C - (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2) \cosh p] \ \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} |Z_A|^2 = {} & (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2)^2 \cosh^2 Np \\ & + 2(1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2) \left[ \frac{Z_C - (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2) \cosh p}{\sinh p} \right] \cosh Np \sinh Np \\ & + \sinh^2 Np \left[ \frac{Z_C - (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2) \cosh p}{\sinh p} \right]^2 . \end{aligned}$$

Por $(a-b)^2 \geq 0 \ \Rightarrow \ a^2 + b^2 \geq 2ab$ e $\cosh^2 Np \to \infty$ $\sinh^2 Np \to \infty$, então se $p < 0$ ainda sim $|Z_A|^2 \to \infty$ exponencialmente. Logo, $\mathcal{F}(N, C) \to 0$ se a integral é restrita às regiões de $\nu$ onde $q \in \mathbb{C} - \mathbb{R}$.

O que falta é garantir um intervalo onde $\nu$ é tal que vale $|\mathrm{tr}Q_C| \leq 2$. Se fosse verdade $\mathrm{tr}Q_C(0) = 2$, então mostrando que a derivada de $\mathrm{tr}Q_C$ é negativa em $\nu = 0$ é garantido a existência do intervalo.

$$Q_C(\nu) = \begin{pmatrix} h_C(\nu) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} h_1(\nu) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$h_i(\nu) = 2 + \omega_0^2 - \nu^2 m_i \;\Rightarrow$

$$Q_C(0) = \begin{pmatrix} 2+\omega_0^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^C .$$

Usando novamente a proposição 2 para $Q_C(0)$, $\mathrm{tr}Q_C(0) = 2 + \omega_0^2$, pode-se escrever

$$Q_C(0) = \begin{pmatrix} E_C(2+\omega_0^2, 1) & -E_{C-1}(2+\omega_0^2, 1) \\ E_{C-1}(2+\omega_0^2, 1) & -E_{C-2}(2+\omega_0^2, 1) \end{pmatrix}^C .$$

Desta forma $\mathrm{tr}Q_C(0) = E_C(2+\omega_0^2, 1) - E_{C-2}(2+\omega_0^2, 1) \;\Rightarrow\; \mathrm{tr}Q_C(0) = 2 + \mathrm{Pol}_C(\omega_0^2)$, onde $\mathrm{Pol}_C$ é um polinômio de grau $C$, e isto dificulta a análise da região $|\mathrm{tr}Q_C(\nu)| \leq 2$; caso o potencial local varie, não vale $h_1 = h_C$ e nem a proposição 2 pode ser usada desta forma, dificultando ainda mais. A partir de agora a análise será restrita ao caso de $\omega_0 = 0$; considerando $\omega_0 \neq 0$ as expressões obtidas adiante se tornam formais, já que não será provada a existência de um intervalo onde vale $|\mathrm{tr}Q_C(\nu)| \leq 2$ nesse caso.

$$Q_C(\nu) = \begin{pmatrix} 2 - m_C\nu^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} 2 - m_1\nu^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$Q_C(0) = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^C .$$

Se $C = 1$, $Q_C(0) = \begin{pmatrix} C+1 & -C \\ C & -C+1 \end{pmatrix}$, suponha que se $C = N$ vale, então para

$C = N + 1$,

$$\begin{aligned}
Q_{N+1}(0) &= \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{N+1} = \begin{pmatrix} N+1 & -N \\ N & -N+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2(N+1) - N & -N-1 \\ 2N - N + 1 & -N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N+2 & -N-1 \\ N+1 & -N \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (N+1)+1 & -(N+1) \\ N+1 & -(N+1)+1 \end{pmatrix} ,
\end{aligned}$$

portanto vale para todo $C$ que $Q_C(0) = \begin{pmatrix} C+1 & -C \\ C & -C+1 \end{pmatrix}$. Assim $\mathrm{tr}Q_C(0) = 2$ e de maneira geral $\mathrm{tr}Q_C(\nu) = K_{1,C} - K_{2,C-1}$. Se $C = 1$, $K_{1,1} = 2 - m_1\nu^2 \ \Rightarrow$

$$K_{1,C} = C + 1 + \mathcal{O}(\nu^2) \text{ e } - K_{2,C-1} = -C + 1 + \mathcal{O}(\nu^2) \ . \tag{3.28}$$

Suponha válida para $C = N$, então

$$\begin{aligned}
K_{1,N+1} &= (2 - m_{N+1}\nu^2)K_{1,N} - K_{1,N-1} \\
&= (2 - m_{N+1}\nu^2)[N + 1 + \mathcal{O}(\nu^2)] - [N - 1 + 1 + \mathcal{O}(\nu^2)] \\
&= 2(N+1) + \mathcal{O}(\nu^2) - N = (N+1) + 1 + \mathcal{O}(\nu^2) \ \text{ e}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-K_{2,N} &= -(2 - m_N\nu^2)K_{2,N-1} + K_{2,N-2} \\
&= (2 - m_N\nu^2)[-N + 1 + \mathcal{O}(\nu^2)] + (N-1) - 1 + \mathcal{O}(\nu^2) \\
&= -2N + 2 + \mathcal{O}(\nu^2) + N - 2 \\
&= -N + \mathcal{O}(\nu^2) = -(N+1) + 1 + \mathcal{O}(\nu^2) \ ,
\end{aligned}$$

logo vale (3.28) para todo $C$.

Se $C = 1$, $\mathrm{tr}Q_C(\nu) = 2 - m_C\nu^2$; suponha que se $C \leq N$ vale

$$\mathrm{tr}Q_C(\nu) = 2 - \nu^2 C \sum_{j=1}^{C} m_j + \mathcal{O}(\nu^4) \ .$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}Q_{N+1}(\nu) &= K_{1,N+1} - K_{2,N} \\
&= (2 - m_{N+1}\nu^2)K_{1,N} - (2 - m_N\nu^2)K_{2,N-1} - K_{1,N-1} + K_{2,N-2} \\
&= (2 - m_{N+1}\nu^2)K_{1,N} - (2 - m_N\nu^2)K_{2,N-1} - \mathrm{tr}Q_{N-1}(\nu) \\
&= 2(K_{1,N} - K_{2,N-1}) - \nu^2(m_{N+1}K_{1,N} - m_N K_{2,N-1}) - \mathrm{tr}Q_{N-1}(\nu) \\
&= 2\mathrm{tr}Q_N(\nu) - \mathrm{tr}Q_{N-1}(\nu) - \nu^2[m_{N+1}(N+1) - m_N(-N+1) + \mathcal{O}(\nu^2)] \\
&= 2\mathrm{tr}Q_N(\nu) - \mathrm{tr}Q_{N-1}(\nu) - \nu^2 m_{N+1}(N+1) + \nu^2 m_N(-N+1) + \mathcal{O}(\nu^4) \\
&= 4 - 2\nu^2(N)\sum_{j=1}^{N} m_j - 2 + \nu^2(N-1)\sum_{j=1}^{N-1} m_j \\
&\quad - \nu^2 m_{N+1}(N+1) + \nu^2 m_N(-N+1) + \mathcal{O}(\nu^4) \\
&= 2 - 2\nu^2(N)\sum_{j=1}^{N} m_j + \nu^2(N-1)\sum_{j=1}^{N} m_j - \nu^2 m_{N+1}(N+1) + \mathcal{O}(\nu^4) \\
&= 2 - \nu^2(N)\sum_{j=1}^{N} m_j - \nu^2\sum_{j=1}^{N} m_j - \nu^2 m_{N+1}N - \nu^2 m_{N+1} + \mathcal{O}(\nu^4) \\
&= 2 - \nu^2(N+1)\sum_{j=1}^{N+1} m_j + \mathcal{O}(\nu^4) \ .
\end{aligned}
$$

Portanto, como $\mathrm{tr}Q_C(0) = 2$, $\frac{\mathrm{dtr}Q_C}{\mathrm{d}\nu^2}(0) < 0$ e $\mathrm{tr}Q_C(\nu)$ é suave como função de $\nu^2$, próximo de zero $|\mathrm{tr}Q_C(\nu)| \leq 2$.

Foi mostrado que na região em que $\nu$ satisfaz $q \in \mathbb{C} - \mathbb{R}$ a integral $\mathcal{F}(\infty, C)$ vai a zero, mas precisa-se mostrar que quando $q \in \mathbb{R}$ a integral existe.

Definindo

$$
a = Z_C - (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2)\cos q \ , \quad b = (1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2)\sin q \ ;
$$

$\phi$ e $r$ por

$$
r\cos\phi = \frac{(ab^* + a^*b)}{|a|^2 + |b|^2} \ , \quad r\sin\phi = \frac{|b|^2 - |a|^2}{|a|^2 + |b|^2} \ ;
$$

observa-se que

$$
\begin{aligned}
|Z_A(\nu)|^2 &= \frac{|a|^2 \sin^2 Nq + |b|^2 \cos^2 Nq + \sin Nq \cos Nq (ab^* + a^* b)}{\sin^2 q} \\
&= \frac{1}{2\sin^2 q} \left\{ \begin{array}{c} (|a|^2 + |b|^2 + |a|^2 - |b|^2) \sin^2 Nq + (|b|^2 + |a|^2 + |b|^2 - |a|^2) \cos^2 Nq \\ +2 \sin Nq \cos Nq (ab^* + a^* b) \end{array} \right\} \\
&= \frac{1}{2\sin^2 q} \left\{ \begin{array}{c} [\cos^2 Nq + \sin^2 Nq](|a|^2 + |b|^2) + [\cos^2 Nq - \sin^2 Nq](|a|^2 - |b|^2) \\ +2 \sin Nq \cos Nq (ab^* + a^* b) \end{array} \right\} \\
&= \frac{(|a|^2 + |b|^2)}{2\sin^2 q} \left\{ 1 + [\cos^2 Nq - \sin^2 Nq] \frac{(|a|^2 - |b|^2)}{(|a|^2 + |b|^2)} + 2 \sin Nq \cos Nq \frac{(ab^* + a^* b)}{(|a|^2 + |b|^2)} \right\} \\
&= (|a|^2 + |b|^2) \frac{[1 + (\cos^2 Nq - \sin^2 Nq) r \sin\phi + 2 \sin Nq \cos Nq \; r \cos\phi]}{2 \sin^2 q} \\
&= (|a|^2 + |b|^2) \frac{[1 + \cos 2Nq \; r \sin\phi + \sin 2Nq \; r \cos\phi]}{2 \sin^2 q} \\
&= (|a|^2 + |b|^2) \frac{[1 + r \sin(2Nq + \phi)]}{2 \sin^2 q} \ . \qquad (3.29)
\end{aligned}
$$

Substituindo então (3.29) em (3.27),

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}(N, C) &= \frac{(T_L - T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2} \, \mathrm{d}\nu \\
&= \frac{(T_L - T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\nu^2 \sin^2 q \, \mathrm{d}\nu}{(|a|^2 + |b|^2)[1 + r \sin(2Nq + \phi)]} \ .
\end{aligned}
$$

Como na região fora de $\mathfrak{N}_C = \{\nu \in \mathbb{R}; \mathrm{tr} Q_C(\nu) \in [-2, 2]\}$ vale que

$$
\int_{\mathbb{R} \, - \, \mathfrak{N}_C} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2} \, \mathrm{d}\nu \to 0 \ ,
$$

pode-se considerar a integral apenas na região $\mathfrak{N}_C$. A mudança de coordenadas $\nu \to q$, $\mathrm{tr} Q_C(\nu) = 2 \cos q$, leva[2] a região de integração em $[-C\pi, C\pi]$,

$$
\begin{aligned}
\int_{\mathfrak{N}_C} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2} \, \mathrm{d}\nu &= \int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{\nu^2(q) \frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}q}(q)}{|Z_A(q)|^2} \, \mathrm{d}q \\
&= \int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{2\nu^2 \frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}q} \sin^2 q}{(|a|^2 + |b|^2)[1 + r \sin(2Nq + \phi)]} \, \mathrm{d}q \ . \qquad (3.30)
\end{aligned}
$$

Para o cálculo do limite quando $N \to \infty$, é usada a seguinte proposição:

[2]Nas raízes de $\mathrm{tr} Q_C(\nu) \pm 2$ vale $\cos q = \pm 1$, logo o angulo $q$ varreria o círculo $C$ vezes caso todas as raízes, considerando a variável $\nu^2$, fossem não negativas. Isto não foi demonstrado, mas é facilmente verificável nos exemplos tratados nesta dissertação, $C = 1, 2$.

**Proposição 3.** *Sejam $f, g : [-C\pi, C\pi] \to \mathbb{R}$ com $|g| < 1$, ambas funções suaves, então*

$$\lim_{N\to\infty} \int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{f(x)}{1 + g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x = \int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{f(x)}{\sqrt{1 - g^2(x)}}\ \mathrm{d}x\ .$$

*Demonstração:* Como $|g(x)| < 1$, $1/[1 + g(x)\sin 2Nx]$ pode ser pontualmente expandido em

$$\frac{1}{1 + g(x)\sin 2Nx} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k g^2(x) \sin^k 2Nx\ .$$

Globalmente esta expressão é válida, pois a cota em $g(x)\sin 2Nx$ é global, portanto a convergência é uniforme e vale ainda

$$\int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{f(x)}{1 + g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{\infty} \int_{-C\pi}^{C\pi} f(x)(-1)^k g^2(x) \sin^k 2Nx\ \mathrm{d}x\ .$$

Particionando o intervalo de integração,

$$\begin{aligned}
&\int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{f(x)}{1 + g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x = \\
&= \int_{0}^{C\pi} \frac{f(x)}{1 + g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x + \int_{-C\pi}^{0} \frac{f(x)}{1 + g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x \\
&= \sum_{j=0}^{N-1} \int_{\frac{jC\pi}{N}}^{\frac{(j+1)C\pi}{N}} \frac{f(x)}{1 + g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x - \sum_{j=0}^{N-1} \int_{-\frac{jC\pi}{N}}^{-\frac{(j+1)C\pi}{N}} \frac{f(x)}{1 + g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{N-1} \int_{\frac{jC\pi}{N}}^{\frac{(j+1)C\pi}{N}} G_k(x) \sin^k 2Nx\ \mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{N-1} \int_{-\frac{jC\pi}{N}}^{-\frac{(j+1)C\pi}{N}} G_k(x) \sin^k 2Nx\ \mathrm{d}x\ ,
\end{aligned} \tag{3.31}$$

onde $G_k(x) = f(x)(-1)^k g^k(x)$.

Pondo $y = 2Nx$, $\mathrm{d}x/2N = \mathrm{d}y$ então

$$\int_{0}^{C\pi} \frac{f(x)}{1 + g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{2N} \int_{jC2\pi}^{(j+1)C2\pi} G_k\left(\frac{y}{2N}\right) \sin^k y\ \mathrm{d}y\ ,$$

aproximando $f$ e $g$ linearmente no ponto $jC2\pi$ tem-se

$$G_k\left(\frac{y}{2N}\right) = G_k\left(\frac{jC\pi}{N}\right) + G_k'\left(\frac{jC\pi}{N}\right) \frac{[y - jC2\pi]}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{y^2}{N^2}\right) \Rightarrow$$

$$
\begin{aligned}
&\int_0^{C\pi} \frac{f(x)}{1+g(x)\sin 2Nx}\ \mathrm{d}x = \\
&\quad = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{N-1}\left(\frac{G_k(jC\pi/N)}{2N}\int_{jC2\pi}^{(j+1)C2\pi}\sin^k y\ \mathrm{d}y + \right.\\
&\qquad \left.\frac{G_k'(jC\pi/N)}{2N^2}\int_{jC2\pi}^{(j+1)C2\pi}[y-jC2\pi]\sin^k y\ \mathrm{d}y + \mathcal{O}\left(\frac{y^2}{N^2}\right)\right)\\
&\quad = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{G_k(jC\pi/N)}{2N}\int_{jC2\pi}^{(j+1)C2\pi}\sin^k y\ \mathrm{d}y + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right)\ .
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\int_{jC2\pi}^{(j+1)C2\pi}\sin^k y\ \mathrm{d}y &= C\int_0^{2\pi}\sin^k y\ \mathrm{d}y = C\int_0^{2\pi}\sin^{k-1} y\sin y\ \mathrm{d}y\\
&= -C\sin^{k-1} y\cos y\Big|_0^{2\pi} + C\int_0^{2\pi}\cos y\ \mathrm{d}(\sin^{k-1} y)\\
&= C\int_0^{2\pi}(k-1)\cos^2 y\sin^{k-2} y\ \mathrm{d}y\\
&= C\int_0^{2\pi}(k-1)(1-\sin^2 y)\sin^{k-2} y\ \mathrm{d}y\\
&= C(k-1)\int_0^{2\pi}\sin^{k-2} y\ \mathrm{d}y - C(k-1)\int_0^{2\pi}\sin^k y\ \mathrm{d}y\\
&= \frac{C(k-1)}{k}\int_0^{2\pi}\sin^{k-2} y\ \mathrm{d}y = \frac{C(k-1)(k-3)}{k(k-2)}\int_0^{2\pi}\sin^{k-4} y\ \mathrm{d}y\ .
\end{aligned}
$$

como seno é uma função ímpar e periódica, $\displaystyle\int_{jC2\pi}^{(j+1)C2\pi}\sin^k y\ \mathrm{d}y = 0$ se $k$ for ímpar, e se $k = 2p$

$$
\begin{aligned}
\int_{jC2\pi}^{(j+1)C2\pi}\sin^{2p} y\ \mathrm{d}y &= \frac{C(2p-1)[(2p-1)-2]}{2^2p(p-1)}\int_0^{2\pi}\sin^{2(p-2)} y\ \mathrm{d}y\\
&= \frac{C(2p-1)[(2p-1)-2][(2p-1)-4]}{2^3p(p-1)(p-2)}\int_0^{2\pi}\sin^{2(p-3)} y\ \mathrm{d}y\\
&= \frac{(2p-1)!!2\pi C}{p!2^p}\ \Rightarrow
\end{aligned}
$$

$$
\int_0^{C\pi}\frac{f(x)}{1+g(x)\sin 2Nx}\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{N-1} f\left(\frac{jC\pi}{N}\right)\left[\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(2p-1)!!}{p!2^p}g^{2p}\left(\frac{jC\pi}{N}\right)\right]\frac{C\pi}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)\ .
$$

A série de taylor de $(1-x)^{-\frac{1}{2}}$ em torno do zero é igual a $\displaystyle\sum_{p=0}^{\infty} \frac{(2p-1)!!}{p!2^p} x^p$, logo

$$\lim_{N\to\infty} \int_0^{C\pi} \frac{f(x)}{1+g(x)\sin 2Nx}\, \mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{f(jC\pi/N)}{\sqrt{1-g^2(jC\pi/N)}} \right] \frac{C\pi}{N} \ ,$$

que é uma soma de Riemann,

$$\lim_{N\to\infty} \int_0^{C\pi} \frac{f(x)}{1+g(x)\sin 2Nx}\, \mathrm{d}x = \int_0^{C\pi} \frac{f(x)}{\sqrt{1-g^2(x)}}\, \mathrm{d}x \ .$$

Os mesmos argumentos são válidos, de maneira análoga, para a segunda região de integração em (3.31), portanto

$$\lim_{N\to\infty} \int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{f(x)}{1+g(x)\sin 2Nx}\, \mathrm{d}x = \int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{f(x)}{\sqrt{1-g^2(x)}}\, \mathrm{d}x \ .$$

■

Aplicando a proposição 3 em (3.30),

$$\int_{\mathfrak{N}_C} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2}\, \mathrm{d}\nu \to \int_{-C\pi}^{C\pi} \frac{\nu^2 \frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}q} \sin^2 q}{(|a|^2+|b|^2)[1+r^2]^{\frac{1}{2}}}\, \mathrm{d}q \ ;$$

desde que $|r|<1$, o que é mostrado a seguir. Como conseqüência,

$$\lim_{N\to\infty} \mathcal{F}(N,C) = \mathcal{F}(C) = \frac{(T_L-T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \left\{ \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2}\, \mathrm{d}\nu \right\} \ \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(C) &= \frac{(T_L-T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \left\{ \lim_{N\to\infty} \int_{\mathfrak{N}_C} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2}\, \mathrm{d}\nu + \lim_{N\to\infty} \int_{\mathbb{R}-\mathfrak{N}_C} \frac{\nu^2}{|Z_A(\nu)|^2}\, \mathrm{d}\nu \right\} \\ &= \frac{(T_L-T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \int_{\mathfrak{N}_C} \frac{\nu^2 \sin^2 q}{(|a|^2+|b|^2)[1+r^2]^{\frac{1}{2}}}\, \mathrm{d}\nu \ . \end{aligned} \tag{3.32}$$

O denominador do integrando de (3.32) pode ser simplificado:

$$\begin{aligned}
r^2 &= r^2(\cos^2\phi + \sin^2\phi) = \frac{(a^*b + b^*a)^2 + (|a|^2 - |b|^2)^2}{(|a|^2 + |b|^2)^2} \\
&= \frac{a^*ba^*b + b^*ab^*a + 2a^*bb^*a + |a|^4 + |b|^4 - 2|a|^2|b|^2}{(|a|^2 + |b|^2)^2} \\
&= \frac{(a^*b)^2 + (b^*a)^2 + (a^*a)^2 + (bb^*)^2}{(|a|^2 + |b|^2)^2} \\
&= \frac{(a^*)^2[a^2 + b^2] + (b^*)^2[a^2 + b^2]}{(|a|^2 + |b|^2)^2} \\
&= \frac{[(a^*)^2 + (b^*)^2][a^2 + b^2]}{(|a|^2 + |b|^2)^2} \\
&= \frac{(a^2 + b^2)(a^2 + b^2)^*}{(|a|^2 + |b|^2)^2} \\
&= \left(\frac{|a^2 + b^2|}{|a|^2 + |b|^2}\right)^2 \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$|r| \leq 1$ e

$$1 - r^2 = \frac{(|a|^2 + |b|^2)^2 - |a^2 + b^2|^2}{(|a|^2 + |b|^2)^2} \ ,$$

mas $b \in \mathbb{R}$ e escrevendo $a = \alpha + i\beta \ \Rightarrow$

$$\begin{aligned}
(|a|^2 + |b|^2)^2 - |a^2 + b^2|^2 &= (\alpha^2 + \beta^2 + b^2)^2 - |(\alpha^2 - \beta^2) + 2i\alpha\beta + b^2|^2 \\
&= (\alpha^2 + \beta^2)^2 + b^4 + 2b^2(\alpha^2 + \beta^2) \\
&\quad - [(\alpha^2 - \beta^2) + b^2]^2 - 4\alpha^2\beta^2 \\
&= \alpha^4 + \beta^4 + 2\alpha^2\beta^2 + b^4 + 2b^2(\alpha^2 + \beta^2) \\
&\quad - (\alpha^2 - \beta^2)^2 - b^4 - 2b^2(\alpha^2 - \beta^2) - 4\alpha^2\beta^2 \\
&= (\alpha^2 - \beta^2)^2 + 2b^2[\alpha^2 + \beta^2 - \alpha^2 + \beta^2] - (\alpha^2 - \beta^2)^2 \\
&= 4b^2\beta^2 \ ,
\end{aligned}$$

$$\beta = \mathrm{Im}\{a\} = \mathrm{Im}\{Z_C\} = -\nu[\zeta_1 m_1 K_{2,C} + \zeta_C m_C K_{1,C-1}] \ ;$$

$r = 1$ se e somente se $4b^2\beta^2 = 0$, $\beta$ e $b$ não são constantes $\Rightarrow |r| < 1$, como dito.

$$\begin{aligned}
(|a|^2 + |b|^2)[1 - r^2]^{\frac{1}{2}} &= 2|b||\beta| \\
&= 2|(1 + \zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2)(\zeta_1 m_1 K_{2,C} + \zeta_C m_C K_{1,C-1})||\nu \sin q| \ ,
\end{aligned}$$

portanto,

$$\mathcal{F}(C) = \frac{(T_L - T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \int_{\mathfrak{N}_C} \frac{|\nu \sin q| \, \mathrm{d}\nu}{|(1+\zeta_C m_C \zeta_1 m_1 \nu^2)(\zeta_1 m_1 K_{2,C} + \zeta_C m_C K_{1,C-1})|} \; . \tag{3.33}$$

Observando que

$$\mathrm{tr} Q_C(\nu) = K_{1,C} - K_{2,C-1} = 2\cos q = P_C(\nu^2) \; ,$$

onde $P_C(\nu^2)$ é um polinômio de grau $C$ em $\nu^2$, tem-se

$$1 = \sin^2 q + \cos^2 q \;\Rightarrow\; \sin^2 q = 1 - \left(\frac{P_C}{2}\right)^2 \in [0,1] \Rightarrow$$

$$\nu \sin q = \pm \left[\nu^2 - \frac{\nu^2 P_C^2}{4}\right]^{\frac{1}{2}} \in \mathbb{R} \text{ e } (1 + \zeta_1 m_1 \zeta_C m_C \nu^2) > 0 \; .$$

O integrando de (3.33) depende apenas de $\nu^2$, logo é par e pode-se reduzir a região de integração para

$$|\mathfrak{N}_C| = \{\nu \geq 0; \mathrm{tr} Q_C(\nu) \in [-2,2]\} \; , \tag{3.34}$$

portanto

$$\mathcal{F}(C) = \frac{2(T_L - T_R)\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C}{\pi} \int_{|\mathfrak{N}_C|} \frac{\sqrt{\nu^2 - \nu^2 (K_{1,C} - K_{2,C-1})^2/4} \, \mathrm{d}\nu}{(1+\zeta_1 m_1 \zeta_C m_C \nu^2)|\zeta_1 m_1 K_{2,C} + \zeta_C m_C K_{1,C-1}|} \; , \tag{3.35}$$

mostrando que esse sistema não satisfaz a lei de Fourier (1.1).

Em diante será tomado o sistema simplificado onde $\zeta_1 = \zeta_C = \zeta$. A dependência de $\mathcal{F}(C)$ em $\zeta$ se encontra toda no termo $\zeta/(1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2)$ dentro da integral (3.35); reescrevendo esse em sua série de Taylor,

$$\begin{aligned}
\frac{\zeta}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta}\left(\frac{\zeta}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2}\right)\Bigg|_{\zeta=0} \zeta \\
&\quad + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\zeta^2}\left(\frac{\zeta}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2}\right)\Bigg|_{\zeta=0} \frac{\zeta^2}{2} \\
&\quad + \frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\zeta^3}\left(\frac{\zeta}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2}\right)\Bigg|_{\zeta=0} \frac{\zeta^3}{6} + \ldots \\
&= \zeta - \zeta^3 m_1 m_C \nu^2 + \mathcal{O}(\zeta^4) \; .
\end{aligned}$$

Logo, para $\zeta \ll 1$ vale

$$\mathcal{F}(C) \approx \frac{2(T_L - T_R)m_1 m_C \zeta}{\pi} \int_{|\mathfrak{N}_C|} \frac{\sqrt{\nu^2 - \nu^2(K_{1,C} - K_{2,C-1})^2/4}}{|m_1 K_{2,C} + m_C K_{1,C-1}|} \, \mathrm{d}\nu \ , \zeta \ll 1 \ . \quad (3.36)$$

Se $\zeta \gg 1 \Rightarrow 1/\zeta \ll 1$,

$$\begin{aligned} \frac{\zeta}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2} &= \frac{1/\zeta}{(1/\zeta)^2 + m_1 m_C \nu^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta^{-1}} \left( \frac{\zeta^{-1}}{\zeta^{-2} + m_1 m_C \nu^2} \right) \Bigg|_{\zeta^{-1}=0} \zeta^{-1} \\ &\quad + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}(\zeta^{-1})^2} \left( \frac{\zeta^{-1}}{\zeta^{-2} + m_1 m_C \nu^2} \right) \Bigg|_{\zeta^{-1}=0} \frac{\zeta^{-2}}{2} + \dots \\ &= \frac{1}{\zeta m_1 m_C \nu^2} - \frac{1}{\zeta^3 m_1^2 m_C^2 \nu^4} + \mathcal{O}(\zeta^4) \ , \end{aligned}$$

logo

$$\mathcal{F}(C) \approx \frac{2(T_L - T_R)}{\pi\zeta} \int_{|\mathfrak{N}_C|} \frac{\sqrt{\nu^2 - \nu^2(K_{1,C} - K_{2,C-1})^2/4}}{\nu^2 |m_1 K_{2,C} + m_C K_{1,C-1}|} \, \mathrm{d}\nu \ , \zeta \gg 1 \ . \quad (3.37)$$

Como $\mathcal{F}(C) \to 0$ se $\zeta \ll 1$ ou $\zeta \gg 1$ então $\mathcal{F}(C)$ deve ter ao menos um máximo ou é constante.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta} \left( \frac{\zeta}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2} \right) = 0 \ \Rightarrow \ \frac{1}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2} - \frac{2\zeta^2 m_1 m_C \nu^2}{(1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2)^2} = 0 \ \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} 1 = \frac{2\zeta^2 m_1 m_C \nu^2}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2} \ &\Rightarrow \ 1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2 = 2\zeta^2 m_1 m_C \nu^2 \ \Rightarrow \\ \zeta^2 &= \frac{1}{m_1 m_C \nu^2} \ . \end{aligned}$$

Desta forma, $\frac{\partial \mathcal{F}(C)}{\partial \zeta} = 0$ em $\zeta^2 = 1/m_1 m_C \nu^2$ pois

$$\frac{\partial \mathcal{F}(C)}{\partial \zeta} = \frac{2(T_L - T_R)m_1 m_C}{\pi} \int_{|\mathfrak{N}_C|} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left( \frac{\zeta}{1+\zeta^2 m_1 m_C \nu^2} \right) \frac{\sqrt{1 - (K_{1,C} - K_{2,C-1})^2/4}}{|m_1 K_{2,C} + m_C K_{1,C-1}|} \, \mathrm{d}\nu \ ,$$

portanto

$$\max_{\zeta>0}\{\mathcal{F}(C)\} = \frac{2(T_L - T_R)\sqrt{m_1 m_C}}{\pi} \int_{|\mathfrak{N}_C|} \frac{\sqrt{1 - (K_{1,C} - K_{2,C-1})^2/4}}{|m_1 K_{2,C} + m_C K_{1,C-1}|} \, \mathrm{d}\nu \ .$$

O comportamento qualitativo de $\mathcal{F}(C)/(T_L - T_R)$ em relação a $\zeta$ é semelhante ao comportamento de (3.42) encontrado em [15].

### 3.1.2 Banhos a uma mesma temperatura

Apesar da forma como os reservatórios térmicos foram modelados ser intuitiva, o modelo precisa fornecer resultados consistentes. Uma maneira de testar isto é tentar reproduzir a distribuição de Boltzmann-Gibbs no estado estacionário; que deveria ocorrer quando todos os reservatórios estivessem à mesma temperatura (o que foi mostrado na seção 3.1), ou quando não existem interações entre partículas.

Usando a notação do espaço de fase, o hamiltoniano (3.1) se escreve como:

$$\mathcal{H}(\phi) = \frac{1}{2}\phi^\dagger \mathcal{S}\phi \ ,$$

onde $\mathcal{S} = \begin{pmatrix} \mathcal{J} & 0 \\ 0 & \mathcal{M}^{-1} \end{pmatrix}$.

Segundo a mecânica estatística de equilíbrio [1], a função de partição do sistema é dada por

$$\mathcal{Z} = \int \exp[-\beta\mathcal{H}(\phi)]\ \mathrm{d}\phi = \int \exp\left[-\frac{1}{2}\phi^\dagger \beta\mathcal{S}\phi\right] \mathrm{d}\phi \ .$$

A medida é gaussiana,

$$\mathrm{d}\mu = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\phi^\dagger\beta\mathcal{S}\phi}}{\mathcal{Z}}\mathrm{d}\phi \ ,$$

com covariância $\mathcal{C} = (\beta\mathcal{S})^{-1} = \begin{pmatrix} \mathcal{J}^{-1} & 0 \\ 0 & \mathcal{M} \end{pmatrix} \beta^{-1}$ , $\beta^{-1} = \begin{pmatrix} T & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix}$.

O objetivo agora é obter em que condições $\mathcal{C}$ satisfaz (3.11).

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}\mathcal{C} &= \begin{pmatrix} 0 & -\mathcal{M}^{-1} \\ \mathcal{J} & \Lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{J}^{-1} & 0 \\ 0 & \mathcal{M} \end{pmatrix} \beta^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & \Lambda\mathcal{M} \end{pmatrix} \beta^{-1} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & \Lambda\mathcal{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -T \\ T & \Lambda\mathcal{M}T \end{pmatrix} ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}\mathcal{A}^\dagger &= \begin{pmatrix} \mathcal{J}^{-1} & 0 \\ 0 & \mathcal{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{J} \\ -\mathcal{M}^{-1} & \Lambda \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \mathcal{J}^{-1} & 0 \\ 0 & \mathcal{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & T\mathcal{J} \\ -T\mathcal{M}^{-1} & T\Lambda \end{pmatrix} ,
\end{aligned}$$

mas $T$, $\mathcal{M}$ e $\Lambda$ são diagonais, logo $[T, \mathcal{M}^{-1}] = [T, \Lambda] = 0$ e

$$\mathcal{C}\mathcal{A}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{J}^{-1}T\mathcal{J} \\ -T & T\Lambda\mathcal{M} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}\mathcal{C} + \mathcal{C}\mathcal{A}^\dagger &= \begin{pmatrix} 0 & -T \\ T & \Lambda\mathcal{M}T \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{J}^{-1}T\mathcal{J} \\ -T & T\Lambda\mathcal{M} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{J}^{-1}T\mathcal{J} - T \\ 0 & 2T\Lambda\mathcal{M} \end{pmatrix} = \sigma^2 + \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{J}^{-1}T\mathcal{J} - T \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

O estado estacionário de equilíbrio é a distribuição de Boltzmann-Gibbs quando $[\mathcal{J}, T] = 0$, o que ocorre se todos os reservatórios estão a uma mesma temperatura, $T \propto I$, ou se não existe interação entre as partículas do sistema, $\mathcal{J}$ diagonal.

## 3.2 Resultados da literatura

Esta seção apresenta resultados da literatura de modelos harmônicos. O intuito é comparar o comportamento desses sistemas com o comportamento obtido nesta dissertação para o modelo de massas alternadas com banhos na extremidade.

### 3.2.1 Massas idênticas e banhos apenas nas extremidades

Um dos primeiros resultados rigorosos da área, dentro do estudo de sistemas fora do equilíbrio, foi obtido por Rieder, Lebowitz e Lieb [26]. Nesse trabalho eles estudam uma cadeia harmônica com interação entre primeiros vizinhos e acoplada a banhos térmicos apenas nas extremidades. Apesar dos resultados aqui apresentados terem sido obtidos pela primeira vez em [26], esses são apresentados usando a abordagem de [14], que fora desenvolvida na seção anterior.

O sistema descrito em [26] é equivalente à cadeia periódica com periodicidade $C = 1$. Vale então $K_{2,1} = K_{1,0} = 1$ e $K_{1,1} = \mathrm{tr}Q_1(\nu) = 2 - m\nu^2 = 2\cos q$ o que implica

$$
\begin{aligned}
\nu^2 &= \frac{2}{m}(1-\cos q) \ \Rightarrow \\
\frac{\mathrm{d}\nu^2}{\mathrm{d}q} &= 2\nu\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}q} = \frac{2\sin q}{m} \ ,
\end{aligned}
\tag{3.38}
$$

assim, substituindo a segunda igualdade de (3.38) em (3.35),

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}(1) &= \frac{(T_L-T_R)\zeta^2 m^2}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\sin^2 q}{2\zeta m^2[1+2\zeta^2 m(1-\cos q)]}\,\mathrm{d}q \\
&= \frac{(T_L-T_R)\zeta}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\sin^2 q}{1+2\zeta^2 m(1-\cos q)}\,\mathrm{d}q \\
&= \frac{(T_L-T_R)\zeta}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\sin^2 q}{(1+2\zeta^2 m)-2\zeta^2 m\cos q}\,\mathrm{d}q \ \Rightarrow
\end{aligned}
$$

$$
\mathcal{F}(1) = \frac{(T_L-T_R)\zeta}{2\pi}\times \left.\frac{[q+2\zeta^2 mq+2\zeta^2 m\sin q]+2i(1+4\zeta^2 m)^{\frac{1}{2}}\mathrm{atanh}[i(1+4\zeta^2 m)^{\frac{1}{2}}\tan(q/2)]}{4\zeta^4 m^2}\right|_{-\pi}^{\pi} ,
$$

como $\tan(\pm\pi/2)=\pm\infty$ e $\tanh(ix)=i\tan(x)$, se $x=\pm\pi/2 \ \Rightarrow \ \tanh(\pm i\pi/2)=\pm i\infty$, ou seja $\mathrm{atanh}(\pm i\infty)=\pm i\pi/2$ e

$$
\mathcal{F}(1) = \frac{(T_L-T_R)}{4\zeta^3 m^2}[1+2\zeta^2 m-(1+4\zeta^2 m)^{\frac{1}{2}}] \ . \tag{3.39}
$$

Quando $\zeta \gg 1$ tem-se

$$
\mathcal{F}(1) = \frac{(T_L-T_R)}{4m^2}\left[\frac{1}{\zeta^3}+\frac{2m}{\zeta}-\frac{1}{\zeta^2}\sqrt{\frac{1}{\zeta^2}+4m}\ \right] ,
$$

$\frac{1}{\zeta^3}\to 0$ em relação à $\frac{1}{\zeta}$ e $\sqrt{\frac{1}{\zeta^2}+4m} = 2m^{\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}(4m)^{-\frac{1}{2}}\frac{1}{\zeta^2}-\frac{1}{8}(4m)^{-\frac{3}{2}}\frac{1}{\zeta^4}+\ldots \ \Rightarrow$

$$
\mathcal{F}(1) \approx \frac{(T_L-T_R)}{4m^2}\left[\frac{2m}{\zeta}-\frac{1}{\zeta^2}\left(2m^{\frac{1}{2}}+\frac{1}{4m^{-\frac{1}{2}}\zeta^2}-\frac{1}{8(4m)^{-\frac{3}{2}}\zeta^4}\right)\right] ,
$$

$\frac{1}{\zeta^2}$, $\frac{1}{\zeta^4}$, $\frac{1}{\zeta^6}\to 0$ em relação à $\frac{1}{\zeta}$ então

$$
\mathcal{F}(1) \approx \frac{(T_L-T_R)}{2m}\left(\frac{1}{\zeta}\right) \ , \ \zeta \gg 1 \ .
$$

No caso em que $\zeta \ll 1$, $\sqrt{\frac{1}{\zeta^2} + 4m} = -1 - \frac{1}{2}(4\zeta^2 m) + \frac{1}{8}(4\zeta^2 m)^2 + \ldots$

$$\mathcal{F}(1) \approx \frac{(T_L - T_R)}{4\zeta^3 m^2}\left[1 + 2\zeta^2 m - 1 - \frac{1}{2}(4\zeta^2 m) + \frac{1}{8}(4\zeta^2 m)^2\right] \Rightarrow$$

$$\mathcal{F}(1) \approx \frac{(T_L - T_R)}{4\zeta^3 m^2}\left[\frac{16\zeta^4 m^2}{8}\right] \Rightarrow$$

$$\mathcal{F}(1) \approx \frac{(T_L - T_R)}{2}\zeta \ , \ \zeta \ll 1 \ .$$

Como resultado, tem-se que o fluxo de calor nesse sistema $\mathcal{F}(1)$ decai a zero com $\zeta^{-1}$ se $\zeta \to \infty$ e $\zeta$ se $\zeta \to 0$. Além disto, (3.39) mostra que o sistema não satisfaz a lei de Fourier (1.1).

### 3.2.2 Banhos auto-consistentes: massas idênticas

Como o sistema puramente harmônico, descrito na subseção anterior, não satisfaz a lei de Fourier, foi proposto em [27] o uso de ruídos estocásticos ao longo da cadeia. A intenção é modelar interações não-lineares não especificadas pelo hamiltoniano, e desta forma recuperar a validade da lei de Fourier nesse sistema. Esse sistema foi rigorosamente resolvido em [28].

Aqui são considerados (3.1) e (3.2), com $\mathcal{M} = I$, $\Lambda = \zeta I$, $\Omega_0 = \omega_0 I$ e $T = \text{diag}(T_L, \langle p_2^2 \rangle, ..., \langle p_j^2 \rangle, ..., \langle p_{N-1}^2 \rangle, T_R)$; como feito em [28]. O objetivo é obter a matriz de covariância $\mathcal{X} = \langle \phi(\infty)\phi^\dagger(\infty) \rangle$ para esse sistema. Em [28] os autores dividem a matriz de covariância em blocos $N \times N$, $\mathcal{X} = \begin{pmatrix} \mathfrak{U} & \mathfrak{Z}^\dagger \\ \mathfrak{Z} & \mathfrak{V} \end{pmatrix}$, assim a equação (3.11) se torna:

$$\begin{cases} \mathfrak{Z} = -\mathfrak{Z}^\dagger \ , \\ \zeta\mathfrak{Z} = \frac{1}{2}(\mathcal{J}\mathfrak{U} - \mathfrak{U}\mathcal{J}) \ , \\ \mathfrak{V} = \frac{1}{2}(\mathcal{J}\mathfrak{U} + \mathfrak{U}\mathcal{J}) \ , \\ \zeta(T - \mathfrak{V}) = \frac{1}{2}(\mathcal{J}\mathfrak{Z} - \mathfrak{Z}\mathcal{J}) \ . \end{cases}$$

A partir da matriz ortogonal, $\mathfrak{F}_{ij} = \sqrt{\dfrac{2}{N+1}} \sin\left(\dfrac{\pi i j}{N+1}\right)$, que diagonaliza $\mathcal{J}$ obtêm uma expressão para $\mathcal{X}$ em função da temperatura;

$$\begin{cases} \mathfrak{U}_{ij} = \displaystyle\sum_{r,k,l=1}^{N} \mathfrak{F}_{ik}\mathfrak{F}_{jl} f^{(\mathfrak{U})}\left(\cos\left(\frac{\pi k}{N+1}\right), \cos\left(\frac{\pi l}{N+1}\right)\right) \mathfrak{F}_{rk}\mathfrak{F}_{rl} T_{rr} \ , \\ \mathfrak{Z}_{ij} = \displaystyle\sum_{r,k,l=1}^{N} \mathfrak{F}_{ik}\mathfrak{F}_{jl} f^{(\mathfrak{Z})}\left(\cos\left(\frac{\pi k}{N+1}\right), \cos\left(\frac{\pi l}{N+1}\right)\right) \mathfrak{F}_{rk}\mathfrak{F}_{rl} T_{rr} \ , \\ \mathfrak{V}_{ij} = \displaystyle\sum_{r,k,l=1}^{N} \mathfrak{F}_{ik}\mathfrak{F}_{jl} f^{(\mathfrak{V})}\left(\cos\left(\frac{\pi k}{N+1}\right), \cos\left(\frac{\pi l}{N+1}\right)\right) \mathfrak{F}_{rk}\mathfrak{F}_{rl} T_{rr} \ , \end{cases}$$

onde

$$\begin{aligned} & f^{(\mathfrak{U})}(x,y) = \zeta^2/[\omega^4 G(x,y)] \ , \\ & f^{(\mathfrak{Z})}(x,y) = 1-(x-y)^2/G(x,y) \ , \\ & f^{(\mathfrak{V})}(x,y) = \zeta(y-x)/[\omega^2 G(x,y)] \text{ e} \\ & G(x,y) = (x-y)^2 + \zeta^2(\omega_0^2/\omega^2 + 2 - x - y)/\omega^2 \ . \end{aligned}$$

Para o perfil de Temperatura é provado um teorema de existência e unicidade (teorema 3.1 [28]), e usando a dependência linear entre o perfil de temperatura e o bloco $\mathfrak{V}$ (vide (3.10)), eles calculam o perfil de temperatura;

$$T_{ii} = T_R + (T_L - T_R)\mathfrak{M}_{i1} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=2}^{N-1} [\mathfrak{M}^n]_{ij} \ ,$$

$$\mathfrak{M}_{ij} = \sum_{k,l=1}^{N} \mathfrak{F}_{ik}\mathfrak{F}_{il} f^{(\mathfrak{V})}\left(\cos\left(\frac{\pi k}{N+1}\right), \cos\left(\frac{\pi l}{N+1}\right)\right) \mathfrak{F}_{jk}\mathfrak{F}_{jl} \ .$$

O fluxo de calor no estado estacionário de não-equilibrio é calculado, e é verificada a validade da lei de Fourier (1.1) no limite termodinâmico, com

$$\kappa_{auto}(1) = \frac{\omega^2}{\zeta} \frac{1}{2 + \omega_0^2/\omega^2 + \sqrt{\omega_0^2/\omega^2(4 + \omega_0^2/\omega^2)}} \ . \tag{3.40}$$

### 3.2.3 Banhos auto-consistentes: massas alternadas

Serão considerados agora (3.1) e (3.2), com $\mathcal{M} = \text{diag}(m_1, m_2, m_1, m_2, ...)$, $\Lambda = \zeta I$ e $T = \text{diag}(T_L, \langle p_2^2 \rangle, ..., \langle p_j^2 \rangle, ..., \langle p_{N-1}^2 \rangle, T_R)$; como feito em [15]. Para obter a matriz de covariância $\mathcal{X} = \langle \phi(\infty)\phi^\dagger(\infty) \rangle$ para esse sistema, em [15] os autores usam um método desenvolvido em [16, 17].

Eles resolvem o sistema desaclopado, $\omega = 0$. A solução de cada sítio é dada por (3.3), com

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & -1/m_i \\ \omega_i^2 & \zeta_i \end{pmatrix} \text{ e } \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2T_i\zeta_i m_i \end{pmatrix} .$$

A exponencial é calculada como no apêndice C de [29];

$$\begin{aligned} \exp(-\mathcal{A}t) = \mathrm{e}^{-\zeta_i t/2} & \left[ \cosh\left(t[\zeta_i^2/4 - \omega_i^2/m_i]^{\frac{1}{2}}\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right. \\ + & \left. \frac{\sinh\left(t[\zeta_i^2/4 - \omega_i^2/m_i]^{\frac{1}{2}}\right)}{[\zeta_i^2/4 - \omega_i^2/m_i]^{\frac{1}{2}}} \begin{pmatrix} \zeta_i/2 & 1/m_i \\ -\omega_i^2 & -\zeta_i/2 \end{pmatrix} \right] . \end{aligned}$$

Como nesse caso $\mathcal{J}$ é diagonal, a medida no estado estacionário é a de Boltzmann-Gibbs, com covariância $\mathcal{C} = \begin{pmatrix} \Omega_0^{-2}T & 0 \\ 0 & \mathcal{M}T \end{pmatrix}$.

Usando o teorema de Girsanov (teorema 8.6.4 [20]) obtêm uma expressão para o fluxo de calor do sistema original, $\omega \neq 0$. O teorema fornece a medida completa do processo em termos da medida do sistema desacoplado,

$$\mathrm{d}\mu(t) = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tilde{\phi}^\dagger\mathcal{C}^{-1}\tilde{\phi}} \exp\left[-\int_0^t \tilde{\phi}^\dagger\mathcal{L}\sigma^{-1}\,\mathrm{d}\mathbf{B}(s) - \frac{1}{2}\int_0^t \tilde{\phi}^\dagger\mathcal{L}\sigma^{-2}\mathcal{L}\tilde{\phi}\,\mathrm{d}s\right]}{\displaystyle\int \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tilde{\phi}^\dagger\mathcal{C}^{-1}\tilde{\phi} - \int_0^t \tilde{\phi}^\dagger\mathcal{L}\sigma^{-1}\,\mathrm{d}\mathbf{B}(s) - \frac{1}{2}\int_0^t \tilde{\phi}^\dagger\mathcal{L}\sigma^{-2}\mathcal{L}\tilde{\phi}\,\mathrm{d}s}\,\mathrm{d}\tilde{\phi}} \mathrm{d}\tilde{\phi} \quad \text{e}$$

$$\left\langle \phi(\infty)\phi^\dagger(\infty) \right\rangle = \int \tilde{\phi}(\infty)\tilde{\phi}^\dagger(\infty)\,\mathrm{d}\mu(\infty) , \tag{3.41}$$

com $\tilde{\phi}$ se referindo à solução do sistema desacoplado $\omega = 0$ e $\mathcal{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\omega^2\Delta & 0 \end{pmatrix}$.

E por fim, é feita uma analise pertubativa da expressão (3.41), quando $\omega \ll 1$, mostrando que o fluxo nesse caso satisfaz a lei de Fourier (1.1) com condutividade

$$\kappa_{auto}(2) = \frac{2\omega^2\zeta m_1^{-1}m_2^{-1}}{\left(\frac{\omega_1^2}{m_1} - \frac{\omega_2^2}{m_2}\right)^2 + 2\zeta^2\left(\frac{\omega_1^2}{m_1} + \frac{\omega_2^2}{m_2}\right)} . \tag{3.42}$$

## 3.3 Massas alternadas e banhos apenas nas extremidades

Aqui é apresentado o resultado principal desta dissertação, relativo ao controle da condução de calor. O sistema estudado nesta seção é o de massas alternadas (isto é, sítios ímpares contendo partículas de massa $m_1$ e sítios pares contendo partículas de massa $m_2$), ou seja, cadeia com banhos apenas nas extremidades e de periodicidade $C = 2$. O estudo segue a abordagem desenvolvida na subseção 3.1.1, com $\zeta_1 = \zeta_2 = \zeta$.

Primeiramente deve-se obter a região de integração (3.34):

$$\mathrm{tr}Q_2(\nu) = K_{1,2} - K_{2,1} = (2 - m_1\nu^2)(2 - m_2\nu^2) - 2 \;\Rightarrow$$

$$-2 \geq (2 - m_1\nu^2)(2 - m_2\nu^2) - 2 \leq 2 \;\Rightarrow$$

$$0 \geq (2 - m_1\nu^2)(2 - m_2\nu^2) \leq 4 \;\Rightarrow$$

$$\nu^2 = \begin{cases} \dfrac{2}{m_1} \\ \dfrac{2}{m_2} \end{cases},$$

ou então

$$\begin{aligned} 0 &= (2 - m_1\nu^2)(2 - m_2\nu^2) - 4 \\ &= m_1 m_2 \nu^4 + 4 - 2m_1\nu^2 - 2m_2\nu^2 - 4 \\ &= m_1 m_2 \nu^4 - 2(m_1 + m_2)\nu^2 \;\Rightarrow \end{aligned}$$

$$\nu^2 = \begin{cases} 0 \\ 2\left(\dfrac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}\right) \end{cases},$$

ou seja, supondo sem perda de generalidade $m_1 < m_2$ tem-se

$$\mathfrak{N}_2 = \left[-\sqrt{\frac{2(m_1+m_2)}{m_1 m_2}}, -\sqrt{\frac{2}{m_1}}\right] \cup \left[-\sqrt{\frac{2}{m_2}}, \sqrt{\frac{2}{m_2}}\right] \cup \left[\sqrt{\frac{2}{m_1}}, \sqrt{\frac{2(m_1+m_2)}{m_1 m_2}}\right] \text{ e}$$

$$|\mathfrak{N}_2| = \left[0, \sqrt{\frac{2}{m_2}}\right] \cup \left[\sqrt{\frac{2}{m_1}}, \sqrt{\frac{2(m_1+m_2)}{m_1 m_2}}\right].$$

As singularidades do integrando (3.35) são determinadas pelas raízes do polinômio $m_1 K_{2,2} + m_2 K_{1,1}$,

$$\begin{aligned} 0 &= m_1(2 - m_2\nu^2) + m_2(2 - m_1\nu^2) \\ &= 2(m_1 + m_2) - 2m_1 m_2 \nu^2 \ \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\nu^2 = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \in \left[\frac{2}{m_2}, \frac{2}{m_1}\right] ,$$

pois $\dfrac{m_1}{m_2} < 1$, assim

$$\begin{aligned} &\frac{m_1}{m_2} + 1 < 2 \ \Rightarrow \ \frac{m_1 + m_2}{m_2} < 2 \ \Rightarrow \ \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} < \frac{2}{m_1} \quad \text{e} \\ &\frac{m_2}{m_1} + 1 > 2 \ \Rightarrow \ \frac{m_1 + m_2}{m_1} > 2 \ \Rightarrow \ \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} > \frac{2}{m_2} \ . \end{aligned}$$

Portanto o integrando é analítico e como a raiz positiva de $m_1 K_{2,2} + m_2 K_{1,1}$ ocorre em $\left[\sqrt{\frac{2}{m_2}}, \sqrt{\frac{2}{m_1}}\,\right]$ e esse é um polinômio de grau 2 em $\nu$, então ele é positivo em $\left[0, \sqrt{\frac{2}{m_2}}\,\right]$ (em $\nu = 0$ ele vale $2[m_1 + m_2]$) e negativo em $\left[\sqrt{\frac{2}{m_1}}, \sqrt{\frac{2(m_1+m_2)}{m_1 m_2}}\,\right]$.

Fazendo a mudança de coordenadas $\nu^2 = \eta$ tem-se

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(2) &= \frac{(T_1 - T_N) m_1 m_2 \zeta}{2\pi} \left\{ \int_0^{\frac{2}{m_2}} \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4}[(2 - m_1\eta)(2 - m_2\eta) - 2]^2}}{(1 + m_1 m_2 \zeta^2 \eta)(m_1 + m_2 - m_1 m_2 \eta)} \, \mathrm{d}\eta \right. \\ &\quad \left. - \int_{\frac{2}{m_1}}^{\frac{2(m_1+m_2)}{m_1 m_2}} \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4}[(2 - m_1\eta)(2 - m_2\eta) - 2]^2}}{(1 + m_1 m_2 \zeta^2 \eta)(m_1 + m_2 - m_1 m_2 \eta)} \, \mathrm{d}\eta \right\} . \qquad (3.43) \end{aligned}$$

A condutividade térmica é dada por $\mathcal{F}/(T_1 - T_N)$: como visto em (3.35), esse sistema não obedece à lei de Fourier, e portanto, o fluxo de calor é proporcional à diferença de temperatura ao invés de ser proporcional ao gradiente de temperatura. Neste trabalho a complicada integral (3.43) não é calculada, mas estuda-se o comportamento assintótico de $\mathcal{F}(2)$ como função de $m_1$, $m_2$ e $\zeta$ com o intuito de obter algum efeito não trivial.

Considerando a dependência na constante dissipativa $\zeta$, $\mathcal{F}(2) \sim 1/\zeta$ quando $\zeta \to \infty$, e $\mathcal{F}(2) \sim \zeta$ quando $\zeta \to 0$ (isto é uma propriedade geral para sistemas com massas periódicas, (3.36) e (3.37)); e mesmo para modelos com reservatórios internos auto-consistentes, existem similaridades: (3.40) para o caso de massas iguais, e (3.42) para o caso de massas alternadas.

Com relação a dependência do fluxo de calor nas massas das partículas, (3.39) fornece $\mathcal{F}(1) \sim 1/m$ quando $m \to \infty$. Ou seja, para uma cadeia com massas iguais, o fluxo de calor decai com $1/m$ quando $m$ se torna grande (novamente, existem resultados semelhantes para o sistema com reservatórios auto-consistentes, (3.42) e referência [15]). Para a cadeia de massas alternadas, se a massa $m_2$ for aumentada na mesma proporção em que se diminui a massa $m_1$ ($m_2 = 1/\epsilon$ e $m_1 = \epsilon$), (3.43) fornece $\mathcal{F}(2) \sim \epsilon^2$ quando $\epsilon$ é pequeno. De fato, estudando $\mathcal{F}(2)$ quando $m_1 = \epsilon$, $m_2 = 1/\epsilon$ e $\epsilon \ll 1$:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(2) &= \frac{(T_1 - T_N)\zeta}{2\pi} \left\{ \int_0^{2\epsilon} \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4}[(2-\epsilon\eta)(2-\eta/\epsilon)-2]^2}}{(1+\zeta^2\eta)|(\epsilon - \eta + 1/\epsilon)|} \, \mathrm{d}\eta \right. \\ & \qquad \left. - \int_{\frac{2}{\epsilon}}^{\frac{2}{\epsilon}+2\epsilon} \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4}[(2-\epsilon\eta)(2-\eta/\epsilon)-2]^2}}{(1+\zeta^2\eta)|(\epsilon - \eta + 1/\epsilon)|} \, \mathrm{d}\eta \right\} ; \end{aligned}$$

o valor absoluto é mantido pois serão feitas aproximações que não preservam as positividades.

Na primeira integral, quando $\epsilon \ll 1$ tem-se $\eta \approx 2\epsilon$,

$$(\epsilon - \eta + 1/\epsilon) \approx 1/\epsilon \ , \quad (1 + \zeta^2\eta) \approx 1 \ ,$$

$$(2-\epsilon\eta)(2-\eta/\epsilon) - 2 = 2 + \eta^2 - 2\epsilon\eta - 2\eta/\epsilon \approx 2 - 2\eta/\epsilon \ \Rightarrow$$

$$\sqrt{1-(1-\eta/\epsilon)^2} = \sqrt{-\eta^2/\epsilon^2 + 2\eta/\epsilon} \ ,$$

mas $0 \leq \eta \leq 2\epsilon$ o que implica $\eta^2 \leq 2\epsilon\eta$, e como $\epsilon > 0$ vale $\eta^2/\epsilon^2 \leq 2\eta/\epsilon$ assim:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\epsilon} \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4}[(2-\epsilon\eta)(2-\eta/\epsilon)-2]^2}}{(1+\zeta^2\eta)|(\epsilon - \eta + 1/\epsilon)|} \, \mathrm{d}\eta \approx \int_0^{2\epsilon} \epsilon \sqrt{\frac{2\eta}{\epsilon} - \frac{\eta^2}{\epsilon^2}} \, \mathrm{d}\eta \\ &= \left[ \epsilon^2 \mathrm{atan} \left( \frac{\eta}{2\epsilon - \eta} \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{(\eta - \epsilon)}{2} \sqrt{2\epsilon\eta - \eta^2} \right] \Bigg|_0^{2\epsilon} = \frac{\pi}{2}\epsilon^2 \ . \end{aligned}$$

Na segunda integral, quando $\epsilon \ll 1$ tem-se $\eta \approx 2/\epsilon$,

$$(1+\zeta^2\eta) \approx \zeta^2\eta \ , \quad (\epsilon - \eta + 1/\epsilon) \approx (1/\epsilon - \eta) < 0 \text{ pois } \eta > 2/\epsilon \ ,$$

$$(2-\epsilon\eta)(2-\eta/\epsilon)-2 = 2+\eta^2-2\epsilon\eta-2\eta/\epsilon \approx \eta^2-2\eta/\epsilon > 0 \;\Rightarrow$$

$$\sqrt{1-(\eta^2-2\eta/\epsilon)^2/4} = \sqrt{1-\eta^2/4+\eta^3/\epsilon-\eta^2/\epsilon^2} \approx i(\eta^2-2\eta/\epsilon)/2 \ ,$$

logo:

$$\int_{\frac{2}{\epsilon}}^{\frac{2}{\epsilon}+2\epsilon} \frac{\sqrt{1-\frac{1}{4}[(2-\epsilon\eta)(2-\eta/\epsilon)-2]^2}}{(1+\zeta^2\eta)|(\epsilon-\eta+1/\epsilon)|}\, \mathrm{d}\eta \approx \int_{\frac{2}{\epsilon}}^{\frac{2}{\epsilon}+2\epsilon} \frac{\eta^2-2\eta/\epsilon}{2\zeta^2\eta(\eta-1/\epsilon)}\, \mathrm{d}\eta$$

$$= \frac{1}{2\zeta^2}\int_{\frac{2}{\epsilon}}^{\frac{2}{\epsilon}+2\epsilon} \frac{\eta-2/\epsilon}{\eta-1/\epsilon}\, \mathrm{d}\eta = \frac{1}{2\zeta^2}\int_{\frac{2}{\epsilon}}^{\frac{2}{\epsilon}+2\epsilon} \left[1-\frac{1}{\epsilon(\eta-1/\epsilon)}\right] \mathrm{d}\eta$$

$$= \frac{1}{2\zeta^2}\left[2\epsilon-\int_{\frac{2}{\epsilon}}^{\frac{2}{\epsilon}+2\epsilon} \frac{1}{\epsilon\eta-1}\, \mathrm{d}\eta\right] = \frac{\epsilon}{\zeta^2}-\left[\frac{\ln(\epsilon\eta-1)}{\epsilon}\right]\Bigg|_{\frac{2}{\epsilon}}^{\frac{2}{\epsilon}+2\epsilon}$$

$$= \frac{\epsilon}{\zeta^2}-\frac{\ln(2\epsilon^2+1)}{2\zeta^2\epsilon} \approx \frac{\epsilon}{\zeta^2}-\frac{2\epsilon^2}{2\zeta^2\epsilon}+\frac{4\epsilon^4}{2\zeta^2\epsilon} = \frac{\epsilon^3}{\zeta^2} \ .$$

Portanto, como afirmado,

$$\mathcal{F}(2) \approx \frac{(T_1-T_N)\zeta}{2\pi}\left(\frac{\pi\epsilon^2}{2}+\frac{\epsilon^3}{\zeta^2}\right) \;\Rightarrow$$

$$\mathcal{F}(2) \approx \frac{(T_1-T_N)\zeta}{4}\epsilon^2 \ , \ \epsilon \ll 1 \ .$$

Precisamente, para uma cadeia de osciladores, este trabalho mostra que o fluxo de calor é muito menor para uma cadeia com massas alternando entre pequena e grande do que uma cadeia contendo apenas massas grandes.

Para comparação, tome $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1$ na condutividade térmica $\kappa$, equação (3.42). Se $m_1 = \epsilon$ e $m_2 = 1/\epsilon$, quando $\epsilon \ll 1$,

$$\kappa_{auto}(2) = \frac{2\zeta}{(1/\epsilon-\epsilon)^2+2\zeta^2(1/\epsilon+\epsilon)} \approx 2\zeta\epsilon^2 \ .$$

Desta forma, tal propriedade não trivial parece ser extensível à modelos mais realísticos e complicados, como por exemplo a cadeia harmônica de osciladores com reservatórios auto-consistentes; um modelo no qual vale a lei de Fourier.

Mudanças nas massas das partículas $m_j$ geram o mesmo efeito que (outras apropriadamente escolhidas) mudanças no potencial local $\omega_j$ e no potencial de interação

$\mathcal{J}$. Como exemplo, o sistema (3.2) pode ser mapeado em um sistema com potenciais locais idênticos, $\Omega_0 = I$ (e vice-versa: um sistema com partículas de diferentes massas pode ser mapeado em outro de massas iguais mas com diferentes potenciais locais). De fato, pondo $\check{\mathcal{M}} = \Omega_0^{-2}\mathcal{M}$, $\check{\mathcal{J}} = \Omega_0^{-1}\mathcal{J}\Omega_0^{-1}$ e fazendo a mudança de variáveis definida por $\check{\mathbf{q}} = \Omega_0\mathbf{q}$ e $\check{\mathbf{p}} = \Omega_0^{-1}\mathbf{p}$,

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}\check{\mathbf{q}} &= \Omega_0\mathrm{d}\mathbf{q} = \Omega_0\mathcal{M}^{-1}\mathbf{p}\mathrm{d}t = \check{\mathcal{M}}^{-1}\check{\mathbf{p}}\mathrm{d}t, \\
\mathrm{d}\check{\mathbf{p}} &= \Omega_0^{-1}\mathrm{d}\mathbf{p} = -(\Omega_0^{-1}\mathcal{J}\mathbf{q} + \Omega_0^{-1}\Lambda\mathbf{p})\mathrm{d}t + \sqrt{2\Omega_0^{-2}\mathcal{M}\Lambda T}\mathrm{d}B \\
&= -(\check{\mathcal{J}}\check{\mathbf{q}} + \Lambda\check{\mathbf{p}})\mathrm{d}t + \sqrt{2\check{\mathcal{M}}\Lambda T}\mathrm{d}B \ .
\end{aligned}$$

Desta maneira, efeitos similares aos apresentados nesta seção podem ser encontrados alternando os potenciais locais em uma cadeia de partículas com massas idênticas.

# Capítulo 4

# Conclusão

Nesta dissertação foram estudadas propriedades da condução térmica em sistemas físicos fora do equilíbrio, através de modelos hamiltonianos microscópicos simples. Alguns dos sistemas aqui apresentados não obedecem à lei de Fourier. Entretanto, comportamento similar ao principal resultado obtido neste trabalho é observado quando são acoplados aos sítios internos da cadeia banhos térmicos auto-consistentes [15]. Esse último, um modelo efetivo onde vale a lei de Fourier – os reservatórios estocásticos internos mimetizam interações anarmônicas desprezadas. Um dos objetivos desta dissertação era responder uma questão levantada pelo grupo em [30]: "... talvez a maneira analítica mais eficaz de alterarmos a condutividade térmica desse modelo não seja mudando a massa das partículas, mas sim alternando as mesmas.". O método desenvolvido pelo grupo em [16, 17] – que envolve uma análise pertubativa rigorosa para potenciais de interação fraca [18] – e utilizado em [15] não poderia ser usado para determinar de maneira rigorosa o que ocorre com o sistema quando os reservatórios internos tendem a zero, apesar de um limite ingênuo fornecer o comportamento correto. A possibilidade de obter mecanismos de controle do fluxo de calor (que talvez fossem úteis à construção teórica de dispositivos como os retificadores térmicos), através de investigação analítica de propriedades da condutividade térmica, foi uma outra motivação que deu ímpeto a esta dissertação.

Partindo das equações diferenciais estocásticas que simulam o contato do sistema com reservatórios térmicos, foram obtidas expressões para as funções de correlação de dois pontos; que estão ligadas ao fluxo de calor no sistema. Os estudos desta dissertação seguiram a abordagem apresentada por Casher e Lebowitz [14], mas alguns resultados já existentes foram aqui apresentados de uma maneira original: a demonstração da existência e unicidade do estado estacionário para cadeias harmônicas (apêndice A); e a própria dedução das equações da dinâmica para a média das trajetórias e da função correlação (apesar de ser original apenas em relação a [14], pois em [28] e nos trabalhos do grupo, por exemplo, esta abordagem já é utilizada) são exemplos disto. Como uma maneira de justificar o modelo estocástico usado (além de ter sido usada para obtenção de uma expressão para a função de dois pontos), é obtida a distribuição de Boltzmann-Gibbs quando todos os ruídos estocásticos estão a uma mesma intensidade, ou seja, os ruídos simulam da maneira esperada os banhos térmicos no sistema.

O resultado principal, e original, diz respeito à cadeia harmônica de massas alternadas e reservatórios apenas nas extremidades: se uma das massas decresce como $m_1 \sim \epsilon$ ($\epsilon$ pequeno) e a outra cresce como $m_2 \sim 1/\epsilon$, então, o fluxo de calor $\mathcal{F}(2)$ satisfaz $\mathcal{F}(2) \sim \epsilon^2$. No sistema de massas idênticas, $\mathcal{F}(1) \sim 1/m$ [14]. Ou seja, esse estudo analítico mostra que: para tornar o fluxo de calor em uma cadeia de osciladores harmônicos pequeno, é mais eficiente tomar um sistema de massas alternadas e aumentar a massa de uma das partículas na mesma razão que a outra massa diminui, do que aumentar todas as massas do sistema. Efeitos similares podem ocorrer, por exemplo, se as massas forem fixadas, mas os potenciais locais alternados. E como observado no capítulo 3, tal propriedade não trivial pode ser extensível à modelos mais realísticos e complicados, como por exemplo a cadeia harmônica de osciladores com reservatórios auto-consistentes.

Em conclusão, estudos analíticos detalhados de modelos simples têm grande importância por serem fontes de propriedades não triviais que podem ser úteis: por exemplo, mecanismos de controle do fluxo de calor, como o apresentado neste trabalho.

# Apêndice A

# Estado estacionário: caso harmônico

Neste apêndice é apresentada uma demonstração da existência e unicidade do estado estacionário para o caso harmônico. A demonstração é baseada em técnicas qualitativas de equações diferenciais ordinárias. A idéia central é demonstrar que o sistema (A.1) possui apenas um ponto fixo, pois os pontos fixos desse sistema são as $\mathcal{X} \in \mathrm{M}(2N)$ (o conjunto das matrizes $2N \times 2N$ é representado por $\mathrm{M}(2N)$) tais que $\sigma^2 = \mathcal{A}\mathcal{X} + \mathcal{X}\mathcal{A}^\dagger$. Além disto, é obtido que o ponto fixo é assintoticamente estável.

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}\mathcal{C}(t)}{\mathrm{d}t} = \sigma^2 - \mathcal{A}\mathcal{C}(t) - \mathcal{C}(t)\mathcal{A}^\dagger \\ \\ \mathcal{C}(0) = \mathcal{W} \end{cases}, \tag{A.1}$$

com $\mathcal{C} : \mathbb{R} \to \mathrm{M}(2N)$, suave; $\mathcal{W} \in \mathrm{M}(2N)$; $\sigma^2 \in \mathrm{M}(2N)$; $\mathcal{A} \in \mathrm{M}(2N) - \{0\}$.

$\varphi : \mathbb{R} \times \mathrm{M}(2N) \to \mathrm{M}(2N)$ denotará o fluxo da equação, onde $\varphi_t(\mathcal{W})$ é a solução no tempo $t$ da equação com condição $\mathcal{W}$.

**Proposição 4.** $\varphi_t(\mathcal{W}) = \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} + \int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\,\mathrm{d}s.$

*Demonstração:* Basta mostrar que $\varphi_t(\mathcal{W})$, dado pela igualdade da proposição, satisfaz (A.1), e pelo teorema de existência e unicidade de soluções a proposição está demonstrada. De fato, vale que $\varphi_0(\mathcal{W}) = \mathcal{W}$ e

$$\frac{\mathrm{d}\varphi_t(\mathcal{W})}{\mathrm{d}t} = -\mathcal{A}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} - \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\mathcal{A}^\dagger + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} \ . \tag{A.2}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}\varphi_t(\mathcal{W}) &= \mathcal{A}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} + \int_0^t \mathcal{A}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\ \mathrm{d}s \\
&= \mathcal{A}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} - \int_0^t \frac{\mathrm{d}(\mathrm{e}^{-\mathcal{A}s})}{\mathrm{d}s}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\ \mathrm{d}s \ ,
\end{aligned}$$

integração por partes implica

$$\mathcal{A}\varphi_t(\mathcal{W}) = \mathcal{A}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} - \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} + \sigma^2 + \int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2\frac{\mathrm{d}(\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s})}{\mathrm{d}s}\ \mathrm{d}s \ .$$

$$\begin{aligned}
\varphi_t(\mathcal{W})\mathcal{A}^\dagger &= \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\mathcal{A}^\dagger + \int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\mathcal{A}^\dagger\ \mathrm{d}s \\
&= \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\mathcal{A}^\dagger - \int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\sigma^2\frac{\mathrm{d}(\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s})}{\mathrm{d}s}\ \mathrm{d}s \ \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\mathcal{A}\varphi_t(\mathcal{W}) + \varphi_t(\mathcal{W})\mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} - \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t} + \sigma^2 + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\mathcal{A}^\dagger \ ,$$

usando (A.2),

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}\varphi_t(\mathcal{W}) + \varphi_t(\mathcal{W})\mathcal{A}^\dagger &= -\frac{\mathrm{d}\varphi_t(\mathcal{W})}{\mathrm{d}t} + \sigma^2 \ \Rightarrow \\
\frac{\mathrm{d}\varphi_t(\mathcal{W})}{\mathrm{d}t} &= \sigma^2 - \mathcal{A}\varphi_t(\mathcal{W}) - \varphi_t(\mathcal{W})\mathcal{A}^\dagger \ .
\end{aligned}$$

■

Por definição, $\mathcal{X} \in \mathrm{M}(2N)$ é ponto fixo quando $\varphi_t(\mathcal{X}) = \mathcal{X}\ \forall\ t \in \mathbb{R}$. Usando (A.2),

$$\left.\frac{\mathrm{d}\varphi_t(\mathcal{W})}{\mathrm{d}t}\right|_{t=\tau} = -\mathcal{A}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}\tau}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger\tau} - \mathrm{e}^{-\mathcal{A}\tau}\mathcal{W}\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger\tau}\mathcal{A}^\dagger + \mathrm{e}^{-\mathcal{A}\tau}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger\tau} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
0 \leq \left\| \left.\frac{\mathrm{d}\varphi_t(\mathcal{W})}{\mathrm{d}t}\right|_{t=\tau} \right\| &\leq \left\|\mathrm{e}^{-\mathcal{A}\tau}\right\| \left\|\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger\tau}\right\| \left[\left(\|\mathcal{A}\| + \left\|\mathcal{A}^\dagger\right\|\right)\|\mathcal{W}\| + \left\|\sigma^2\right\|\right] \\
&\leq \left\|\mathrm{e}^{-\mathcal{A}\tau}\right\|^2 \left(2\|\mathcal{A}\|\|\mathcal{W}\| + \left\|\sigma^2\right\|\right) \ ,
\end{aligned}$$

mas se $-\mathcal{A}$ é um atrator, então $\lim\limits_{\tau\to\infty}\left\|\mathrm{e}^{-\mathcal{A}\tau}\right\| = 0 \ \Rightarrow \ \lim\limits_{\tau\to\infty}\left.\frac{\mathrm{d}\varphi_t(\mathcal{W})}{\mathrm{d}t}\right|_{t=\tau} = 0$. Resta apenas garantir a existência de $\lim\limits_{t\to\infty}\varphi_t(\mathcal{W})$ para que esse seja um ponto fixo.

**Lema 1.** $\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t$ *converge caso a parte real dos autovalores de $\mathcal{A}$ sejam positivos.*

*Demonstração:* Escrevendo $\mathcal{A}$ em blocos de Jordan, $\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \mathfrak{A} & \mathfrak{o} \\ \mathfrak{o} & \mathfrak{B} \end{pmatrix}$, onde $\mathfrak{A}_{ij} = \mathfrak{a}_i\delta_{ij}$ (bloco das raízes não degeneradas), e $\mathfrak{B}^k_{ij} = \mathfrak{b}_k\delta_{ij} + \delta_{i-1,j}$ ($\mathfrak{b}_k$ raiz com multiplicidade $k$). Nessa base,

$$\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathfrak{A}t} & \mathfrak{o} \\ \mathfrak{o} & \mathrm{Pol}(\mathrm{e}^{-\mathfrak{B}t}, t) \end{pmatrix} ,$$

com

$$\mathrm{Pol}(\mathrm{e}^{-\mathfrak{B}t}, t)^k_{ij} = \mathrm{e}^{-\mathfrak{b}_k t}\sum_{l=1}^{k}\frac{t^{l-1}}{(l-1)!}\delta_{i-l,j} \ .$$

$$[\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}]_{ij} = \sum_{k=1}^{2N}[\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}]_{ik}[\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}]_{kj} = \sum_{k,l=1}^{2N}[\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}]_{ik}[\sigma^2]_{kl}[\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}]_{lj} \ ,$$

assim, $\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t$ consiste de uma combinação linear de termos do tipo $\int_0^\infty \mathrm{e}^{-r\alpha t}t^s\ \mathrm{d}t$, com $\alpha$ autovalor de $\mathcal{A}$ e $r, s \in \mathbb{N}$. Se cada termo desse for finito, o lema estará provado. De fato, $\dfrac{\mathrm{d}^s\mathrm{e}^{-zt}}{\mathrm{d}z^s} = (-1)^s t^s\mathrm{e}^{-zt}$, $z \in \mathbb{C}$ e $\mathrm{Re}z > 0$, então

$$\begin{aligned}\int_0^\infty (-1)^s t^s\mathrm{e}^{-zt}\ \mathrm{d}t &= \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}^s\mathrm{e}^{-zt}}{\mathrm{d}z^s}\ \mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}^s}{\mathrm{d}z^s}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-zt}\ \mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}^s z^{-1}}{\mathrm{d}z^s} = (-1)^s(s!)z^{-(s+1)} \\ &\Rightarrow \int_0^\infty t^s\mathrm{e}^{-zt}\ \mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}^s z^{-1}}{\mathrm{d}z^s} = s!z^{-(s+1)} \ ,\end{aligned}$$

portanto, $\int_0^\infty \mathrm{e}^{-r\alpha t}t^s\ \mathrm{d}t < \infty \ \Rightarrow \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t < \infty$. ■

**Teorema 1.** *Se $-\mathcal{A}$ é atrator, $\mathcal{X} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t$ é o único ponto fixo da dinâmica.*

*Demonstração:* $\forall\ \mathcal{W} \in \mathrm{M}(2N)$, $\lim_{t\to\infty}\varphi_t(\mathcal{W}) = \mathcal{X}$, então se $\mathcal{W} \neq \mathcal{X}$, $\mathcal{W}$ não é ponto fixo, pois do contrário $\lim_{t\to\infty}\varphi_t(\mathcal{W}) = \lim_{t\to\infty}\mathcal{W} = \mathcal{W}$; contradizendo a unicidade do limite.

$$
\begin{aligned}
\mathcal{A}\mathcal{X} &= \mathcal{A}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t = -\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}(\mathrm{e}^{-\mathcal{A}t})}{\mathrm{d}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t \\
&= \sigma^2 + \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\frac{\mathrm{d}(\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t})}{\mathrm{d}t}\ \mathrm{d}t = \sigma^2 - \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t\mathcal{A}^\dagger \\
&= \sigma^2 - \mathcal{X}\mathcal{A}^\dagger\ \Rightarrow\ \sigma^2 = \mathcal{A}\mathcal{X} + \mathcal{X}\mathcal{A}^\dagger\ ;
\end{aligned}
$$

o lema 1 é usado para garantir a existência de $\mathcal{X}$. ■

**Proposição 5.** $\mathcal{X} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mathcal{A}t}\sigma^2\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger t}\ \mathrm{d}t$ *é um ponto fixo assintoticamente estável se* $-\mathcal{A}$ *é atrator.*

*Demonstração:* Seja $f : \mathrm{M}(2N) \to \mathrm{M}(2N)$, $f(\mathcal{W}) = \sigma^2 - \mathcal{A}\mathcal{W} - \mathcal{W}\mathcal{A}^\dagger$. $Df(\mathcal{W})\mathcal{S} = -\mathcal{A}\mathcal{S} - \mathcal{S}\mathcal{A}^\dagger$, $\forall\ \mathcal{S} \in T_{\mathcal{W}}\mathrm{M}(2N)$, e 0 é poço de $Df(\mathcal{W})$, $\forall\ \mathcal{W} \in \mathrm{M}(2N)$, pois é o sistema (A.1) no caso particular de $\sigma^2 = 0$ . Pode-se então aplicar o teorema da página 157 [22], o que prova a proposição. ■

Se $\varsigma^2 \in \mathrm{M}(2N)$ é tal que $\|\varsigma^2 - \sigma^2\| < \delta$, e $\varphi_t(\mathcal{W}, \sigma^2)$, $\varphi_t(\mathcal{W}, \varsigma^2)$ são os fluxos associados,então

$$
\begin{aligned}
\left\|\varphi_t(\mathcal{W}, \sigma^2) - \varphi_t(\mathcal{W}, \varsigma^2)\right\| &= \left\|\int_0^t \mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}(\sigma^2 - \varsigma^2)\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\ \mathrm{d}s\right\| \\
&\leq \int_0^t \left\|\mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}(\sigma^2 - \varsigma^2)\mathrm{e}^{-\mathcal{A}^\dagger s}\right\|\ \mathrm{d}s \\
&\leq \left\|\sigma^2 - \varsigma^2\right\| \int_0^t \left\|\mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\right\|^2\ \mathrm{d}s\ ,
\end{aligned}
$$

mas pelo teorema 2.11 página 97 de [23] , $\left\|\mathrm{e}^{-\mathcal{A}s}\right\| \leq \tilde{c}\mathrm{e}^{-\tilde{t}s}$, portanto

$$
\|\mathcal{X}_{\varsigma^2} - \mathcal{X}_{\sigma^2}\| \leq \left\|\varsigma^2 - \sigma^2\right\| \tilde{c}^2 \int_0^\infty \mathrm{e}^{-2\tilde{t}s}\ \mathrm{d}s < \frac{\delta\tilde{c}^2}{2\tilde{t}}
$$

ou seja, a proximidade dos pontos fixos em vizinhanças de $\sigma^2$ pode ser controlada.

# Referências Bibliográficas


[1] Landau, and Lifschitz; Statistical Physics Part 1 (Course of Theoretical Physics vol 5) 3th ed; Butterworth-Heinemann (1980).

[2] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, and L. Rey-Bellet; Fourier law: a challenge to theorists; Mathematical Physics 2000 (2001).

[3] P. Debye; Zur Theorie der spezifischen Wärmen; Ann. Phys. 344, 789 (1912).

[4] C. Bernardin, and S. Olla; Fourier's law for a microscopic model of heat conduction; J. Stat. Phys. 121, 271 (2005).

[5] G. Basile, C. Bernardin, and S. Olla; Momentum conserving model with anomalous thermal conductivity in low dimensional systems; Phys. Rev. Lett. 96, 204303 (2006).

[6] A. Dhar; Heat transport in low-dimensional systems; Adv. Phys. 57, 457 (2008).

[7] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi; Thermal conduction in classical low-dimensional lattices; Phys. Rep. 377, 1(2003).

[8] B. Li, L. Wang, and G. Casati; Thermal diode: rectification of heat flux; Phys. Rev. Lett. 93, 184301 (2004).

[9] B. Hu, L. Yang, and Y. Zhang; Asymmetric heat conduction in nonlinear lattices; Phys. Rev. Lett. 97, 124302 (2006).

[10] D. Ruelle; A departure from equilibrium; Nature 414, 263 (2001).

[11] N. Yang, N.-B Li, L. Wang, and B. Li; Thermal rectification and negative differential thermal resistance in lattices with mass gradient; Phys. Rev. B 76, 020301(R) (2007).

[12] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and A. Zettl; Solid-state thermal rectifier; Science 314 1121 (2006).

[13] A. Dhar, and J. L. Lebowitz; Effect of phonon-phonon interactions on localization; Phys. Rev. Lett. 100, 134301 (2008).

[14] A. Casher, and J. L. Lebowitz; Heat flow in regular and disordered harmonic chains; J. Math. Phys. 12, 1701 (1971).

[15] F. Barros, H. C. F. Lemos, and E. Pereira; Changing the heat conductivity: An analytical study; Phys. Rev. E 74, 052102 (2006).

[16] E. Pereira, and R. Falcao; Nonequilibrium statistical mechanics of anharmonic crystals with self-consistent stochastic reservoirs; Phys. Rev. E 70, 046105 (2004).

[17] E. Pereira, and R. Falcao; Normal heat conduction in a chain with a weak interparticle anharmonic potential; Phys. Rev. Lett. 96, 100601 (2006).

[18] R. Falcao, A. Francisco Neto, and E. Pereira; Analytic approach to the (an)harmonic crystal chains with self-consistent stochastic reservoirs; Theoret. and Math. Phys. 156, 1081 (2008).

[19] Landau, and Lifschitz; Mechanics (Course of Theoretical Physics vol 1) 3th ed; Butterworth-Heinemann (1976).

[20] B. Øksendal; Stochastic differential equations: an introduction With applications 6th ed; Spring, Berlin (2003).

[21] Lawrence C. Evans; An introduction to stochastic differential equations version 1.2; Lecture notes http://math.berkeley.edu/∼evans/ .

[22] V. I. Arnold; Ordinary differential equations; MIT Press, 1973.

[23] Claus I. Doering, e Artur O. Lopes; Equações diferenciais ordinárias; Coleção Matemática Universitária (2005).

[24] Elon Lages Lima; Álgebra linear; Coleção Matemática Universitária (2004).

[25] R. Lidl, G.L. Mullen, and G. Turnwald; Dickson Polynomials; Pitman Monogr. Surveys Pure Appl. Math. 65, Longman (1993).

[26] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb; Properties of harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state; J. Math. Phys. 8, 1073 (1967).

[27] M.Bolsterli, M.Rich, and W. M. Visscher; Simulation of nonharmonic interactions in a crystal by self-consistent reservoirs; Phys. Rev. A 1, 1086 (1970).

[28] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, and J. Lukkarinen; Fourier's law for a harmonic crystal with self-consistent stochastic reservoirs; J. Stat. Phys. 116, 783 (2004).

[29] Ricardo de Carvalho Falcão; Fluxo de calor em estados estacionários de não equilíbrio: um estudo microscópico; Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais (2006).

[30] Humberto Cesar Fernandes Lemos; Estudo analítico da condutividade térmica em modelos microscópicos hamiltonianos fora do equilíbrio; Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais (2008).