

Discusión sobre la Markovianicidad de una descripción de grano grueso de una cadena unidimensional de osciladores no armónicos

C.Hijón, M. Serrano, P. Español*
Departamento de Física Fundamental
Universidad Nacional de Educación a Distancia
28080 Madrid

Artículos recientes¹⁻⁴ reflejan una controversia acerca de la validez de la hipótesis Markoviana en la descripción de grano grueso de un sistema atómico unidimensional. En concreto en la Ref.⁴ se considera que la descripción Markoviana de una cadena unidimensional de átomos de Lennard-Jones a temperatura elevada es correcta. Sin embargo, es cierto que en este sistema puede haber efectos no-Markovianos, tal y como sugiere Cubero. Nuestra intención es mostrar que estos efectos no-Markovianos son pequeños.

Dentro del marco de la Teoría de Operadores de Proyección de Mori, la hipótesis Markoviana implica que la evolución temporal de las variables de grano grueso del sistema está descrita por una exponencial, posiblemente compleja. Cuando esto ocurre, se puede demostrar rigurosamente que podemos sustituir las fuerzas proyectadas por las fuerzas “microscópicas” en la formula de Green-Kubo, que nos da la expresión de los coeficientes de transporte. Nótese, por tanto, que la utilidad práctica de la Teoría de Mori, esto es, la posibilidad de calcular coeficientes de transporte a partir de simulaciones de

dinámica molecular sólo aparece si la hipótesis Markoviana es válida.

Una vez que se ha determinado la existencia de efectos no-Markovianos en el problema, nos proponemos cuantificar la importancia de los mismos, para lo cual supondremos que nuestro sistema es Markoviano. Hecha esta suposición podemos resolver las ecuaciones de evolución para las variables relevantes, que comparamos con los resultados obtenidos de simulación. La comparación entre los resultados de simulación para las variables macroscópicas con los resultados de la predicción Markoviana, *sin parámetros ajustables*, es satisfactoria.

* chijon@bec.uned.es

¹ P. Español, Phys. Rev. E 53, 1572 (1996).

² D. Cubero and S. Yaliraki, J. Chem. Phys. 122, 034108 (2005).

³ D. Cubero and S. Yaliraki, Phys. Rev. E 72, 032101 (2005).

⁴ C.Hijón, M. Serrano, P. Español, J. Chem. Phys. 125, 204101 (2006).