Calore, caos e fluttuazioni (http://ipparco.roma1.infn.it)

Termodinamica $\to$ equilibrio $\to$ stati = dist. probabilità su spazio fasi
Non Equilibrio :
(a) avvicinamento a equilib. o a stato stazionario
(b) stati stazionarii: distrib. probab. su spazio delle fasi

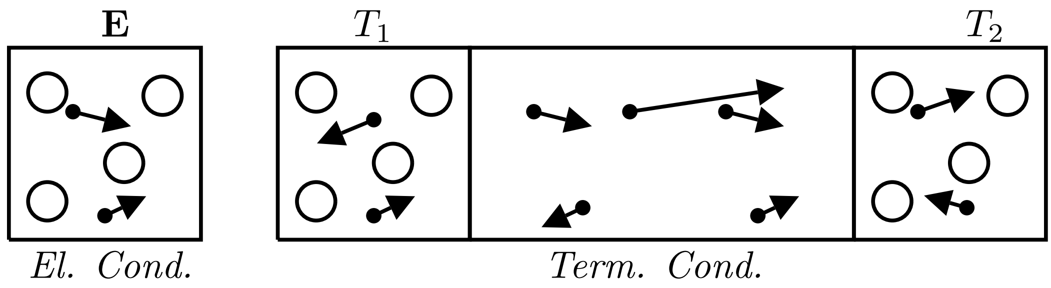
Fine: ricerca di relazioni "universali" che traducano proprietà strutturali.
Hamiltoniana $H = K + U$, $K = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}_i^2$, $U = \sum_{i<j} \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$
+ ipotesi ergodica $\Rightarrow$
$T = \langle K \rangle, U, V, p = \langle \frac{forza}{superficie} \rangle = \langle \int_{\partial V} 2 m v_n^2 \rho(\mathbf{q}) \frac{d\sigma_{\mathbf{q}}}{|\partial V|} \rangle$
sono funzioni dei parametri di controllo ad es U, V e

$$\frac{dU + pdV}{T} = \text{differenziale esatto}$$

Esempio 1: Modello di Drude (1899)

$$m\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{E} + \text{collision rule}$$

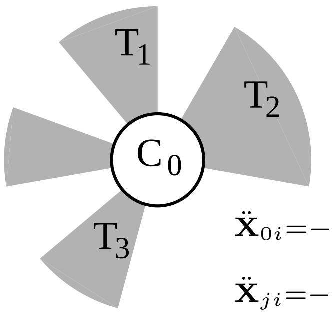
collisioni= elastiche + rescal. di velocità a $|\dot{\mathbf{x}}| = \sqrt{3mk_BT}$.



Problema: $\langle\dot{\mathbf{x}}\rangle = cE$? (Ohm). Teorema se $N = 1$.

Esempio 2: Conduzione del calore. Legge di Fourier ?

Problema aperto. Una congettura ("NO").



$$\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_n$$

$\ddot{\mathbf{X}}_{0i} = -\partial_i U_0(\mathbf{X}_0) - \sum_j \partial_i U_j(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) + \mathbf{E}_i(\mathbf{X}_0)$

$\ddot{\mathbf{X}}_{ji} = -\partial_i U_j(\mathbf{X}_j) - \partial_i U_j(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) - \alpha_j \dot{\mathbf{X}}_{ji}$ implica

$$\alpha_j = \frac{\dot{U}_j + Q_j}{3 k_B T_j N_j}, \qquad \text{se}$$

$$\frac{m \dot{X}_j^2}{2} = \frac{3}{2} k_B T_j\, N_j, \qquad Q_j = -\dot{\mathbf{X}}_j \cdot \partial_{\mathbf{X}_j} U_j(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j)$$

Efficiente? Contrazione volume $\Rightarrow$ divergenza

$$\sigma = \varepsilon + \dot{W}, \qquad \sum_{j \ge 1} \frac{Q_j}{k_B T_j}, \quad W = \sum_{j \ge 1} \frac{U_j}{k_B T_j}$$

Interpretazione cinetica della creazione di entropia.

$$p' = \frac{1}{\tau}\int_0^\tau \sigma(S_t(\dot X, X)dt, \quad \text{e} \quad p = \frac{1}{\tau}\int_0^\tau \varepsilon(S_t(\dot X, X)dt$$

uguale media e statistica ($\tau \to \infty$).
Se sistema caotico (iperbolico, regolare e transitivo) p' (quindi p) verifica legge "*grandi deviazioni*".

$$P_\tau(p \in [a,b]) \simeq e^{\tau \,\max_{[a,b]} \zeta(p)}, \qquad \forall a,b \in (p_1,p_2)$$

$\zeta(p)$ è analitica, convessa, massima a $\langle p\rangle \equiv \langle\varepsilon\rangle \geq 0$. Quadratica a $\langle p\rangle \Rightarrow$ Teorema limite centrale.

Ipotesi caotica
l'Attrattore per sistemi meccanici è iperbolico, regolare e transitivo
Analoga all'*ipotesi ergodica* (che implica).

Mecc. quantica: H operatore su $L_2(\mathcal{C}_0^{3N_0})$, onde simm. or antisimm. Ψ,

$$H=-\frac{\hbar^2}{2}\Delta_{\mathbf{X}_0}+U_0(\mathbf{X}_0)+\sum_{j>0}\big(U_{0j}(\mathbf{X}_0,\mathbf{X}_j)+U_j(\mathbf{X}_j)+K_j\big)$$

Sistema Dinamico

spazio delle fasi consiste in $\big(\Psi,(\{\mathbf{X}_j\},\,\{\dot{\mathbf{X}}_j\})_{j>0}\big)$:

$-i\hbar\dot\Psi(\mathbf{X}_0)=(H\Psi)(\mathbf{X}_0)$,

$$\ddot{\mathbf{X}}_j=-\Big(\partial_j U_j(\mathbf{X}_j)+\langle\partial_j U_j(\mathbf{X}_0,\mathbf{X}_j)\rangle_\Psi\Big)-\alpha_j\dot{\mathbf{X}}_j\qquad j>0$$

Vincolo di K_j costante $\Rightarrow$

$$\alpha_j\stackrel{def}{=}\frac{\langle W_j\rangle_\Psi-\dot U_j}{2K_j},\qquad W_j\stackrel{def}{=}-\dot{\mathbf{X}}_j\cdot\partial_j U_{0j}(\mathbf{X}_0,\mathbf{X}_j)$$

$$\sigma(\mathbf{X},\dot{\mathbf{X}})\equiv\varepsilon(\mathbf{X},\dot{\mathbf{X}})+\dot r(\mathbf{X})=\sum_{j>0}\frac{Q_j}{k_BT_j}+\dots$$

Consistenza: termostato singolo equivalente a Gibbs?

Esiste una unica statistica: $\forall x$ a meno di volume 0 e $\forall$ F regolari

$$\frac{1}{\tau}\sum_{j=0}^{\tau-1} F(S^j x) \xrightarrow[\tau\to\infty]{} \int F(y)\mu(dy)$$

è la *statistica SRB*: concentrata su volume 0 se $\langle\sigma\rangle \stackrel{def}{=} \sigma_+ > 0$

Costruzione euristica della SRB

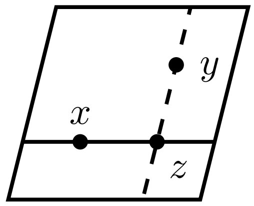
Sistema iperb. $\Rightarrow$ dinamica simbolica

Esiste $\mathcal{E} = (E_0, \ldots, E_q)$ partizione con matrice $M_{\xi\xi'} = 1$ se $SE^0_\xi \cap E^0_{\xi'} \neq \emptyset$ e $= 0$ altrimenti, transitiva ($M^{\overline{\ell}}_{\xi\xi'} > 0$).

(a) se $\boldsymbol{\xi} = (\ldots, \xi_{-1}, \xi_0, \xi_1, \ldots)$, $M_{\xi_i\,\xi_{i+1}} \equiv 1 \ \Rightarrow \exists\, x$ e *viceversa*: $S^i x \in E_{\xi_i}$.

(b) se $\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'$ corrisp. x, x' e in accordo fra $-\tau$ e $\tau \Rightarrow d(x, x') \le Ce^{-\lambda\tau}$

(c) E_ξ è fogliato da W_s (W_i), lisci e connessi, con storie definitivamente uguali nel futuro (passato) e $x, y \in W_s \Rightarrow d(S^n x, S^n y) \le Ce^{-\tau\lambda}$.



(d) Se $x, y \in E_\xi$ $\exists z \in W_i(x) \cap W_s(y) \Rightarrow d(S^k y, S^k z) \xrightarrow[k\to\infty]{} 0$ esponenz. Ossia W_i attrae asintoticamente.

Sia τ sì grande che *tutte* le osserv. F di interesse siano costanti nelle celle ($\widetilde{\boldsymbol{\xi}} \stackrel{def}{=} (\xi_{-\tau}, \ldots, \xi_\tau)$)

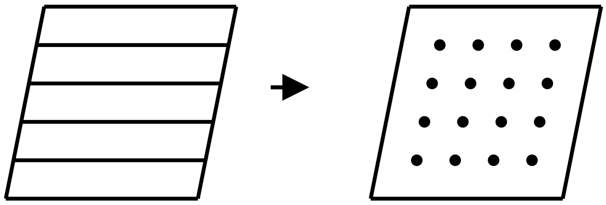
$$E(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) \stackrel{def}{=} E_{\xi_{-\tau}} \cap E_{\xi_{-\tau+1}} \cap \ldots \cap E_{\xi_\tau} = \text{“}\textit{cella a grana grossa}\text{”}$$

Problema: evoluzione temporale *non può essere una permutazione.* Immaginiamo discretizzato lo spazio delle fasi (Boltzmann). Come nelle simulazioni: punto $\to$ 64 bits per ogni delle $\mathcal{N}$ coordinate $2^{64}\mathcal{N}$.

Vogliamo calcolare $\langle F \rangle$.
L'insieme $\mathcal{A}$ dei punti ricorrenti è l'*attrattore*. La transitività ("ipotesi ergodica" generalizz.) $\to$ permutazione a 1-ciclo *solo*
Allora le medie si calcolano con la distribuzione uniforme!

$$\langle F \rangle = \frac{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}}} \mathcal{N}(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) F(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}}} \mathcal{N}(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}$$

Nella rappresentazione discreta l'attrattore $\mathcal{A}$ appare cme una famiglia di punti regolarmente disposti su un numero finito di varietà instabili



Il numero $\mathcal{N}(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})$ è soggetto ad un forte vincolo di compatibilità.

Se $x \in E(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})$ prefissato, sia $\Lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})$ il coefficiente di espanzione della superficie $W_i(x)$ per la trasformazione $S^{2\tau}$ (come trasf. di $S^{-\tau}x$ in $S^{\tau}x$).

$$\text{Compatibilità} \Rightarrow \mathcal{N}(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) = \,cost\,\Lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})^{-1}$$

e quindi se $\lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) \stackrel{def}{=} \log \Lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})$

$$\langle F\rangle = \frac{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}}} e^{-\lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})} F(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}}} e^{-\lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}}$$

che è una formula che esprime la distribuzione SRB.
Applicazioni? Teorema di fluttuazione, reciprocità di Onsager, Green-Kubo.

Se evoluzione è reversibile (come nei modelli descritti) $\exists I$ tale che $I^2 = 1$, $IS = S^{-1}I$. Allora $\lambda_i(I\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) = -\lambda_s(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})$

Quindi se $p = \frac{1}{\tau}\sum_{j=0}^{\tau-1}\frac{\sigma(S^j x)}{\sigma_+}$, $\sigma_+ = \langle\sigma\rangle > 0$

$$\frac{P_\tau(p)}{P_\tau(-p)} = \frac{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}},p\,\text{fixed}} e^{-\lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}}{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}},-p\,\text{fixed}} e^{-\lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}} = \frac{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}},p\,\text{fixed}} e^{-\lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}}{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}},p\,\text{fixed}} e^{-\lambda_i(I\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}} = \frac{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}},p\,\text{fixed}} e^{-\lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}}{\sum_{\widetilde{\boldsymbol{\xi}},p\,\text{fixed}} e^{\lambda_s(\widetilde{\boldsymbol{\xi}})}}$$

$= e^{\tau\,p\,\sigma_+}$ perchè il rapporto fra term. corrisp. è fisso! perché $-\lambda_i(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) - \lambda_s(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) = p\sigma_+\tau$. In termini di grandi deviazioni $\exists p^*$ tale che

$$\zeta(-p) = \zeta(p) - p\sigma_+, \qquad \forall p \in (-p*, p^*)(\textit{Teor. di Fluttuazione})$$

relazione *senza parametri, indipendente dal modello purchè reversibile.* *Verificabile* in simulazioni e, in linea di principio, in esperimenti, per la interpretazione di σ come tasso di creazione di entropia.