Evoluzione temporale e termostati nella meccanica statistica del nonequilibrio, *Collaborazione E. Presutti, GG*

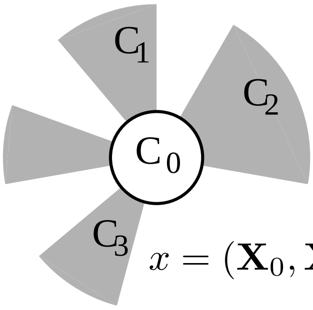
Nonequilibrio: Stati stazionari di sistemi di particelle soggette a forze non conservative il cui lavoro è dissipato in termostati.

Problema: nelle simulazioni $\rightarrow$ sistemi finiti **non Hamiltoniani**.

"*Soluzione*": forze artificiali che assorbono il lavoro

Domanda: giusto ? sono alterate le proprietà fisiche? si ha equivalenza con termostati ideali Hamiltoniani ma infiniti?

Ricorda l'equivalenza degli insiemi statistici: fu imprtante nei 1960' proprio come supporto agli esperimenti numerici e iniziò della M.Stat. "rigorosa".



Es: $U_j,\ U_{0,j}$ int. coppie, portata r_φ

$x = (\mathbf{X}_0, \dot{\mathbf{X}}_0, \mathbf{X}_1, \dot{\mathbf{X}}_1, \ldots, \mathbf{X}_n, \dot{\mathbf{X}}_n)$

$$\ddot{\mathbf{X}}_{0i} = -\,\partial_i U_0(\mathbf{X}_0) - \sum_{j>0} \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) + \mathbf{F}_i(\mathbf{X}_0)$$

$$\ddot{\mathbf{X}}_{ji} = -\,\partial_i U_j(\mathbf{X}_j) - \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) - a\,\alpha_j \dot{\mathbf{X}}_{ji}, \qquad a = 0, 1$$

C_0 di raggio D e, per $a = 1$, le α_j sono multiplicatori per imporre moti *Isocinetici* or *Isoenergetici*, mentre $a = 0 \Rightarrow$ Hamiltoniani

$$\frac{\dot{\mathbf{X}}_j^2}{2} \equiv \frac{3N_j}{2} k_B T_j, \qquad \text{ovvero} \qquad \frac{\dot{\mathbf{X}}_j^2}{2} + U_j(\mathbf{X}_j) \equiv E_j$$

$Q_j \stackrel{def}{=} -\,\dot{\mathbf{X}}_j \cdot \partial_{\mathbf{X}_j} U_{j,0}(\mathbf{X}_j, \mathbf{X}_0) =$ *calore ceduto ai termostati* $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \qquad \alpha_j = \frac{Q_j - \dot{U}_j}{3k_B T_j N_j},\ (\textit{isoc.}) \qquad \alpha_j = \frac{Q_j}{3k_B T_j N_j},\ (\text{isoe.})$$

Temperatura dei termostati è fissata da condizioni iniziali. Es.

$\mu_0 = \lim_{\Lambda\to\infty} c\, e^{-H_0(x)} \prod_j \frac{d\mathbf{X}_j d\dot{\mathbf{X}}_j}{N_j!}, \qquad H_0(x) = \sum_{j=0}^n \beta_j \Big(\frac{\dot{\mathbf{X}}_j^2}{2} + U_j(\mathbf{X}_j) - \lambda_j N_j\Big)$

Scelta di x rsp a μ_0 genera una configurazione infinita a temperatura, densità di energia e di particelle ben definite $T_j = 1/k_B T_j$, e_j, δ_j.

Problema: la dinamica può solo esser definita "regoalarizzandola" in Λ e poi al "limite termodinamico" $\Lambda \to \infty$.

Teoremi MPP975 $\to$ caso dell'equilibrio $\beta_j = \beta, \Phi = 0$, CMP000 includono il caso presente *eccetto che per le condizioni al bordo*

I. Dinamica Locale: In $S_t^{(\Lambda,a)}x$ ogni particella collide contro le pareti un # finito di volte per $t' \le t$ $(\forall\,\Lambda, a = 0, 1)$. E $S_t^{(a)}x$ esistono con μ_0-probabilità 1. Inoltre le densità d'energia cin. e di particelle sono limitate su scala logaritmica e **sono costanti**, $\forall t$, le quantità globali

$$\frac{N_j(x^{(\Lambda,a)}(t))}{|\Lambda\cap C_j|} \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} \delta_j, \quad \frac{U_j(x^{(\Lambda,a)}(t))}{|\Lambda\cap C_j|} \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} u_j, \quad \frac{K_j(x^{(\Lambda,a)}(t))}{|\Lambda\cap C_j|} \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} \frac{3 k_B T_j\, \delta_j}{2},$$

In questa ipotesi **Idea**: Se Λ è grande un termostato finito genera moti assai vicini a quelli di termostati infiniti **con** μ_0**–prob.** 1. Quest'ultimi sono definiti come limiti termodinamici $x \to S_t^{(0)} x = \lim_\Lambda S_t^{(\Lambda,0)} x$

Dim. Euristica:

$$x_i^{(\Lambda,a)}(t) = x_i(0) + e^{-\int_0^t a\alpha_j(t')dt'} \dot{x}_i(0) + \int_0^t dt'' e^{-\int_{t''}^t a\alpha_j(t')dt'} F_i(t'')dt''$$

e $\alpha_j \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} 0$ per ogni j. $Q_j = -\sum_{q_i \in X_j, q\in \mathbf{X}_0} \dot{\mathbf{q}}_i \partial_{\mathbf{q}_i} \varphi(q_i - q)$ perché

$$\alpha_j(x) = \frac{Q_j}{N_j k_B T_j(x)}, \quad Q_j = O(\frac{N_0 N_j F V}{K_j(x)})$$

numeratore finito e denom. $O(|\Lambda|)$
$\alpha_j \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} 0 \Rightarrow$ i limiti $x_i^{(a)}(t)$ verificano *le stese equazioni*

$$x_i(t) = x_i(0) + \dot{x}_i(0)t + \int_0^t dt'' F_i(t'')dt''$$

La difficoltà (**caso isoenerg.**) è dimostare la dinamica locale. Casi certi $d = 1$, d qualsiasi ma termostati liberi

Dunque Dinamica dissipativa = dinamica conservativa.

si è persa la produzione di entropia???

Nella dinamica Hamiltoniana è definita da

$$\varepsilon = \sum_{j>0} \frac{Q_j}{k_B T_j}.$$

In quella termostattata è identificata con il tasso di contrazione del volume delo spazio delle fasi. E un calcolo semplice mostra che

$$\sigma(x) = \sum_{j>0} \frac{Q_j - \dot{U}_j}{k_B T_j}, (isoc.) \qquad \sigma(x) = \sum_{j>0} \frac{Q_j}{k_B T_j}, (\text{isoe.})$$

σ and ε sono identiche (perchè la derivata temporale “non conta”)

References:

`arxiv.org: 0810.1510`

CHAOS **19**, 013101, 2009, `doi: 10.1063/1.3054710`

per la parte euristica e

lavoro in corso con E. Presutti per i casi $d = 1, 2, 3$.