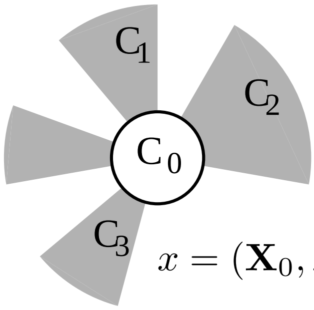
Termostati

con: **Errico P.**

Sistema finito in C_0 in contatto con "sistemi esterni a temperatura fissa". Temperatura definita come?



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

Fig.1: *Gli* $1+\nu$ *contenitori* $\Omega_j \cap \Lambda$, $j = 0, \ldots, \nu$, *sono* $\mathcal{C}_0, \mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_\nu$ *e contengono* $N_0, N_1, \ldots,$ N_ν *particelle con posizioni evelocita' denotate*$\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_\nu$, *e* $\dot{\mathbf{X}}_0, \dot{\mathbf{X}}_1,$ $\ldots, \dot{\mathbf{X}}_\nu$, *risp.*

Può aver senso solo se i termostati sono infiniti.

Le equazioni del moto sono

$$
\begin{aligned}
m\ddot{\mathbf{X}}_{0i} =& - \partial_i U_0(\mathbf{X}_0) - \sum_{j>0} \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) + \boldsymbol{\Phi}_i(\mathbf{X}_0)\\
m\ddot{\mathbf{X}}_{ji} =& - \partial_i U_j(\mathbf{X}_j) - \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) - a\,\alpha_j \dot{\mathbf{X}}_{ji}
\end{aligned}
$$

E $\psi(q) = \varphi_0 \left(\frac{r_\psi}{r}\right)^\alpha$ potenziale pareti e φ potenziale di coppie

$$
\begin{aligned}
U_j(\mathbf{X}_j) =& \sum_{q\in\mathbf{X}_j} \psi(q) + \sum_{q,q'\in\mathbf{X}_j, q\in\Lambda} \varphi(q-q')\\
U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) =& \sum_{q\in\mathbf{X}_0, q'\in\mathbf{X}_j} \varphi(q-q');
\end{aligned}
$$

Come si fissa la temperatura? $\longleftrightarrow$ dati iniziali x.

Il dato x è scelto con distrib. rispetto al limite μ_0 per $\Lambda_0 \to \infty$ di

$$\mu_{0,\Lambda_0}(dx) = const\ e^{-H_{0,\Lambda_0}(x)}\, dx, \qquad \text{with}$$

$$H_{0,\Lambda_0}(x) \stackrel{def}{=} \sum_{j=0}^{\nu} \beta_j (K_{j,\Lambda_0}(x) - \lambda_j N_{j,\Lambda_0} + U_{j,\Lambda_0}(x))$$

$$\beta_j \stackrel{def}{=} \frac{1}{k_B T_j} > 0,\ \lambda_j \in \mathbb{R},$$

Proprietà con μ_0-prob. 1 ??

Sia $W(x;\xi,R) \stackrel{def}{=} E_{\mathcal{B}(\xi,R)}(x)+U_{\mathcal{B}(\xi,R)}(x) + N_{\mathcal{B}(\xi,R)}(x)$ o più esplicitamente

$$W(x;\xi,R) \stackrel{def}{=} \frac{1}{\varphi(0)} \sum_i \Big(\frac{m\dot q_i^2}{2} + \psi(q_i) + \frac{1}{2}\sum_{j\neq i} \varphi(q_i - q_j) + \varphi(0)\Big)$$

con somme su $q_j, q_i \in \mathcal{B}(\xi,R)$: energia adimensionale.

Allora se $\zeta \geq 1/d$ e $g_\zeta(y) \stackrel{def}{=} (\log_+(|y|/r_\varphi))^\zeta$
con μ_0–probabilità 1 si ha

$$\mathcal{E}_\zeta(x) \stackrel{def}{=} \sup_\xi \sup_{R > g_\zeta(\frac{\xi}{r_\varphi})} \frac{W(x;\xi,R)}{R^d}$$

"energia, numero di particelle" crescono al più "logaritmicamente".
Inoltre l'energia cinetica è $\frac{K_{j,\Lambda}}{|\Lambda\cap\Omega_j|} \sim \frac{\delta_j\, d}{2\beta_j}$.

MA dinamica non è definita! Regolarizzazione su $\Lambda_n = \mathcal{B}(O, 2^n)$

Ci si aspetta: (1) $\mathcal{E}_\zeta(S_t^{(n,a)}x) < \infty$, (2) $\dfrac{K_{j,\Lambda}(t)}{|\Lambda\cap\Omega_j|} > \dfrac{1}{2}\dfrac{\delta_j\, d}{2\beta_j}$

$\forall \Lambda = \mathcal{B}(O, L)$ abbastanza grandi.

Nel caso $a = 1$, thermostato isoenergetico, posto $K_j(x) = d\,N_j k_B T_j(x)$

$$\alpha_j \stackrel{def}{=} \frac{Q_j}{d\,N_j k_B T_j(x)/m}, \qquad \text{with}$$
$$Q_j \stackrel{def}{=} -\dot{\mathbf{X}}_j \cdot \partial_j U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j),$$

e le equazioni conservano *esattamente* l'energia di ciascun termostato

$$m\ddot{\mathbf{X}}_{0i} = -\,\partial_i U_0(\mathbf{X}_0) - \sum_{j>0} \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) + \boldsymbol{\Phi}_i(\mathbf{X}_0)$$
$$m\ddot{\mathbf{X}}_{ji} = -\,\partial_i U_j(\mathbf{X}_j) - \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) - a\,\alpha_j \dot{\mathbf{X}}_{ji}$$

MA ora occorre che $T_j(x) \neq 0$. Quindi anche se regolarizzato
il moto esiste solo per $t \le t_\Lambda(x)$

Diventa essenziale avere una stima inferiore per l'energia cinetica.

In realtà ci si aspetta che sia una costante del moto per $\Lambda \to \infty$!

Teorema: *Il moto esiste con μ_0 prob. 1 sia per $a = 0$ che per $a = 1$ e*

$$\lim_{\Lambda\to\infty} S_t^{(n,1)} x = \lim_{\Lambda\to\infty} S_t^{(n,0)} x = S_t x$$

se $d = 1, 2$.

Idea (che risale a lavori di Sinai, Fritz-Dobrushin) è di mostrare prima una stima debole in cui $V_n(t)$ è stimato come $C\sqrt{n}$.

Rispetto a CMP000 difficoltà aggiuntiva è la presenza del potenziale della parete. Simili problemi in CMS005. Risultato se $|q_i(0)| < 2^k r_\varphi$

$$\begin{aligned}
&|\dot q_i^{(n,0)}(t)| \le C(\mathcal{E})\, k^{\frac{1}{2}},\\
&\text{distance}(q_i^{(n,0)}(t), \partial(\cup_j \Omega_j \cap \Lambda)) \ge c(\mathcal{E}) k^{-\frac{1}{\alpha}} r_\psi\\
&\mathcal{N}_i(t,n) \le C(\mathcal{E})\, k^{1/2}\\
&|x_i^{(n,0)}(t) - x_i^{(0)}(t)| \le C(\mathcal{E})\, r_\varphi\, e^{-c(\mathcal{E})2^{nd/2}}
\end{aligned}$$

Ma neanche nel caso Hamiltoniano ($a = 0$) questo basta a garantire che K è una costante del moto.
È necessaria una stima **inferiore** di $K(S_t^{(n,a)}x)$.

(1) Per avere eq. ben definite e per
(2) dedurre che $\alpha_j \to 0 \Rightarrow$ equazioni termst. si confondano con le Hamilt.

Colleghiamo questa a una stima di *entropia*: se il moto non produce "troppa entropia" allora $K_{j,\Lambda}(S_t^{(n,a)}x) > 0$ e anzi $O(2^{nd})$:

$$K_{j,\Lambda_n}(S_t^{(n,a)}x) > \frac{1}{2}\delta_j k_B T_j |\Lambda_n \cap \Omega_j|$$

L'idea è che inizialmente l'energia cinetica $K_{j,\Lambda_n}(x)$ in $\Omega_j \cap \Lambda_n$ devia poco dal suo valor medio ($O(2^{nd})$ e quindi se μ_0 fosse invariante si potrebbe dire che la stima della probabilità che K_{j,Λ_n} non cambia molto in un tempo finito.

È questa un'applicazione di un metodo di Sinai che è stato usato in MPP975. Ora μ_0 non è invariante ma la contrazione dell'elemento di volume è

$$\sigma_1(x) = \sum_{j>0} dN_j \frac{Q_j}{2K_{j,n}(x,t)} (1 - \frac{1}{dN_j}) + \beta_0 Q_0$$
$$\sigma_0(x) = \sum_{j\ge 0} \beta_j Q_j = \sum_{j\ge 0} \frac{Q_j}{k_B T_j}$$

Nota: sarebbero *uguali* se $K_{j,n}/|\Omega_j \cap \Lambda_n|$ fosse una costante del moto.

$$\sigma_1(x) \simeq \sum_{j>0} \frac{Q_j}{k_B T_j(x)} + \frac{Q_0}{k_B T_0}$$

Fino a che $K_{j,\Lambda_n}(x) >$ metà del valore iniziale, un tempo $t_n(x) \le \Theta$, si può usare che K_{j,Λ_n} è $> O(2^{nd})$ per inferire che $|\sigma| \le Cn$ con C che dipende solo da $\mathcal{E}$ del dato iniziale per tempi $< \Theta$.

Poichè avere $K_{j,n}$ più piccolo della metà del suo valore medio la probabilità che al tempo di arresto ciò sia sarà

$$e^{Cn}e^{-C'2^{nd}}$$

e per Borel Cantelli c'è prob. 1 del contrario. Ossia si ha una stima inferiore dell'energia cinetica.

Insomma: le cose vanno come se μ_0 *fosse invariante, almeno con probabilità* 1*. Ossia si spera di procedere come in MPP975.*

Ottenuta così una soddisfacente teoria delle equazioni regolarizzate si pone il problema del limite termodinamico per $S_t^{(n,1)}x$.

Ma ora le equazioni del moto sono diverse. In forma integrale

$$q_i^{(n,a)}(t) = q_i(0) + \int_0^t \big(e^{-\int_0^\tau \alpha_j(x^{(n,a)}(s))ds}\dot q_i(0)$$
$$+ (t-\tau)\, e^{-\int_\tau^t \alpha_j(x^{(n,a)}(s))ds} f_i(x^{(n,a)}(\tau))\big)\, d\tau$$

Ingenuamente: le stime eseguite conducono a stimare che $|\alpha_j|$ è $O(2^{-dn}n)$: piccolissimo. Ma non basterebbe.
Ad es. si potrebbe confrontare il moto term. con quello Ham.

$$q_i^{(n,0)}(t) = q_i(0) + t\dot q_i(0) + \int_0^t (t-\tau)\, f_i(x^{(n,0)}(\tau))\big)\, d\tau$$

Definendo

$$\delta_i(t,n) \stackrel{def}{=} |q_i^{(n,0)}(t) - q_i^{(n,1)}(t)|, \qquad u_k(t,n) \stackrel{def}{=} \max_{q_i\in\Lambda_k} \delta_i(t,n),$$

si troverebbe

$$\frac{u_k(t,n)}{r_\varphi} \le c\, 2^{-nd} n + C\, n^\eta \int_0^t \frac{u_{k_1}(s,n)}{r_\varphi}\frac{ds}{\Theta}$$

$$\delta_i(t,n)\stackrel{def}{=}|q_i^{(n,0)}(t)-q_i^{(n,1)}(t)|,\qquad u_k(t,n)\stackrel{def}{=}\max_{q_i\in\Lambda_k}\delta_i(t,n),$$

si troverebbe con $\eta>1$ ($\eta=1+\frac{1}{\alpha}$)

$$\frac{u_k(t,n)}{r_\varphi}\le c\,2^{-nd}n+\,C\,n^\eta\int_0^t\frac{u_{k_1}(s,n)}{r_\varphi}\frac{ds}{\Theta}$$

se $2^{k_1}=2^k+C\sqrt{n}$ ($\sqrt{n}$ è la stima della velocità a priori nel moto Λ_n–regolarizzato): allora la si può iterare tante volte, ℓ, fino a che $2^k+C\ell\sqrt{n}<2^n$. Ma l'esp. di Lyap. è Cn^η e l'errore si amplifica a

$$2^{-nd}ne^{C\,n^\eta\Theta}\xrightarrow[n\to\infty]{}\infty$$

ossia ci vorrebbe $\eta<1$!.

Si noti che se non ci fosse il termine noto funzionerebbe! per confrontare $u_k(n,t)$ e $u_k(n+1,t)$. Nel caso Hamiltoniano tale confronto non produce termini noti e dimostra l'esistenza del limite term. (come in MPP975 e CMP000). Usando la stima banale su $u_n(n,t) \le C\sqrt{n}$ e si itera $\ell = 2^n - 2^k n^\eta C$ la

$$\frac{u_k(t,n)}{r_\varphi} \le C\,n^\eta \int_0^t \frac{u_{k_1}(s,n)}{r_\varphi}\frac{ds}{\Theta}$$

ottenendo

$$\frac{u_k(t,n)}{r_\varphi} \le \frac{(Cn^\eta)^\ell}{\ell!} Cn \xrightarrow[n\to\infty]{} 0, \qquad \ell = \frac{2^n - 2^k}{Cn^\eta}$$

Qui interviene la seconda idea tecnica. Usare ancora la quasi invarianza (ossia la stima dell'entropia) per dimostrare che n^η può essere sostituito da $(k^\eta \log n)^\gamma$, per $k > (\log n)^\lambda$ che invece è più che sufficiente

$$\frac{u_k(t,n)}{r_\varphi} \le c\, 2^{-nd} n + C\,(k \log n)^\eta \int_0^t \frac{u_{k_1}(s,n)}{r_\varphi} \frac{ds}{\Theta}$$

Questo è vero con probabilità 1: segue con stime semplici se si mostra che

$$\begin{aligned} &\|x^{(n,1)}(t)\|_n \le (\log n)^\lambda \\ &||x||_n \stackrel{def}{=} \max_{\xi\in\Lambda_n} \frac{\max(N_{C_\xi}(x), \sqrt{E_{C_\xi}(x)})}{g_\lambda(\xi/r_\varphi)} \le (\log n)^\lambda \end{aligned}$$

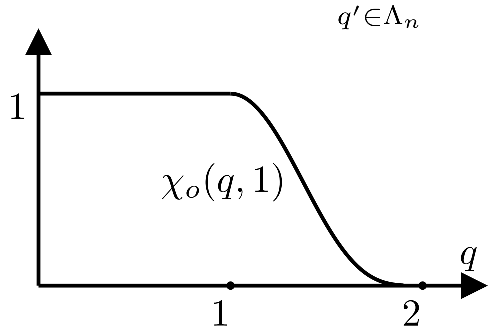
con $\frac{1}{2} < \lambda < 1$; se N_C è il numero massimo di punti che possono trovarsi nel cubo unitario C_ξ in $r_\varphi \mathbb{Z}^d$ e $E_C = \max_{q\in C} \frac{m\dot q^2}{2} + \psi(q)$ e $g_\lambda(\xi/r_\varphi) = (\log_+ \xi/r_f)^\lambda$.

Si mostra che la probab. che un dato arrivi alla frontiera dell'insieme ove $||x||_n \le (\log n)^\lambda$ è per la stima dell'entropia riducibile ad una stima di equilibrio ed è sommabile su n, quindi per Borel-Cantelli l'evento ha probabilità 0 per n grande.
Allora la dinamica termostattata è moto vicina a quella Hamiltoniana e quindi il numero di particelle e le velocità sono stimate da quelle (note) Hamiltoniane e allora le due dinamiche coincidono.

Stima Energia in $\widetilde{\Lambda}_n$ = punti a dist $\le r_\varphi$ and Λ_n

$$\widetilde{W}_n(x;\xi,R) \stackrel{def}{=} \frac{1}{\varphi_0}\sum_{q\in\widetilde{\Lambda}_n}\chi_\xi(q,R)\Big(\frac{m\dot q^2}{2}+\psi(q)+\frac12\sum_{q'\in\widetilde{\Lambda}_n}\varphi(q-q')+\varphi_0\Big).$$

se $\chi(q,R) =$



$R_n(t,s) \stackrel{def}{=} R_n(t) + \int_s^t \frac{V_n(s)}{r_\varphi}\,ds$

$$\frac{d}{ds}\widetilde{W}_n(x(s);\xi,R_n(t,s)) \le \frac{1}{\varphi_0}\sum_{q\in\widetilde{\Lambda}_n}\chi_\xi(q(s),R_n(t,s))$$
$$\cdot\frac{d}{ds}\Big(\frac{m\dot q(s)^2}{2}+\psi(q(s))+\frac12\sum_{q'\in\widetilde{\Lambda}_n}\varphi(q(s)-q'(s))\Big)$$

Posto $\chi_\xi(q(s),R_n(t,s))\equiv\chi_{\xi,q,t,s}$,

$$\frac{d}{ds}\widetilde{W}_n(x(s);\xi,R_n(t,s))\le\sum_{q\in\Omega_0}\dot q(s)\Phi(q(s))\chi_{\xi,q,t,s}$$
$$-\sum_{\substack{q\in\Lambda_n\\ q'\in\widetilde{\Lambda}_n}}\big(\chi_{\xi,q,t,s}-\chi_{\xi,q',t,s}\big)\frac{\dot q(s)\partial_q\varphi(q(s)-q'(s))}{2\varphi_0}$$

$\neq 0$ se $|q(s)-q'(s)|<r_\varphi$.
Le χ' sono $\le (r_\varphi R_n(t,s))^{-1}$ e $|\dot q|,|\dot q'|\le V_n(s)=r_\varphi|\dot R_n(t,s)|$

$$\frac{d}{ds}\widetilde{W}_n(x(s);\xi,R_n(t,s))\le C\widetilde{W}_n(x(s);\xi,\frac{D_0}{r_\varphi})$$
$$+C\frac{|\dot R_n(t,s)|}{R_n(t,s)}\widetilde{W}_n(x(s);\xi,2R_n(t,s)+1)$$
$$\le C(\frac{|\dot R_n(t,s)|}{R_n(t,s)}\widetilde{W}_n(x(s);R_n(t,s))$$

perchè $R_n(t,s)/R(t,0)\le 2$, $W_n(x(s),\xi,R_n(t,s))\le W_n(x(s),R_n(t,s))$.

$$\dot{\widetilde{W}} \le C\widetilde{W}, \qquad W_n(x(s), R_n(t,s)) \le C W_n(x(0), R_n(t,0))$$

$$V_n(t) \le \sqrt{\widetilde{W}_n(x(0), R_n(t))} \le C\sqrt{\mathcal{E}}\, R_n(t)^{d/2}$$

$$R(t) \le n^{1/d} + \int_0^t C R(\tau)^{d/2} d\tau$$

$$R(t) \le C n^{1/d}$$

SE $d \le 2$: CMP000.
Se $d = 3$? Questa relazione è sempre vera ma si deve dimostrare che $V_n(t) \le C V_n(t)$. Metodo di CMP000.
In corso di stesura: d=3 e teorema sulla esistenza di infinite costanti del moto (tutte le grandezze intensive per cui valgono leggi di grandi deviazioni).