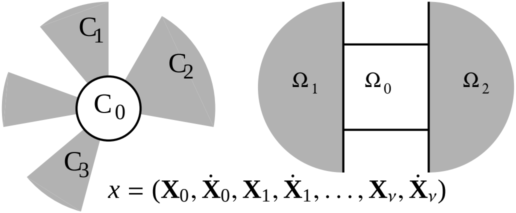
Nonequilibrio, termostati e limite termodinamico

coll. Errico Presutti, GG

Modelli di termostato (Feynman-Vernon 1963): sistemi finiti in contatto con altri infiniti. Esempi



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

Stato iniziale: $\mu_0(dx) \stackrel{def}{=} Ce^{-\sum_{j=0}^{\nu} \beta_j H_j(\mathbf{X}_j, \dot{\mathbf{X}}_j)} \prod_j \frac{d\mathbf{X}_j\, d\dot{\mathbf{X}}_j}{N_j!}$

Aquila 31 marzo 2010

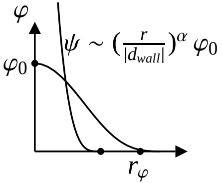
Equazioni del moto

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

$$m\ddot{\mathbf{X}}_{ji} = -\,\partial_i U_j(\mathbf{X}_j) - \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) + \partial_i \Psi(\mathbf{X}_j)$$

$$U_j(\mathbf{X}_j) = \sum_{q,q' \in \mathbf{X}_j} \varphi(q - q'), \qquad U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) = \sum_{q \in \Omega_0, q' \in \Omega_j} \varphi(q - q')$$

$$\Psi(X) = \sum\nolimits_{q \in X} \psi(q)$$



Inizialmente: distrib. di Gibbs a date densità δ_j e temperature β_j^{-1}

Ipotesi di assenza transizioni fase $\Rightarrow$ energia cinetica-potenziale, densità di energia, densità e molti

osservabili sono costanti con μ_0 probabilità 1 al tempo $t = 0$: esempi

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda \cap \Omega_j|} K_{j,\Lambda}(x) = \frac{d}{2}\beta_j^{-1}\delta_j$$

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda \cap \Omega_j|} N_{j,\Lambda}(x) = \delta_j$$

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda \cap \Omega_j|} U_{j,\Lambda}(x) = u_j$$

Termostati dovrebbero ammettere evoluzione: definita da un limite

SE si regularizza in in una sfera Λ_n (lato $2^n r_\varphi$) $\Rightarrow$ Time evolution exists $x \to S_t^{(n,0)} x \Rightarrow$

si dovrebbe avere anche $\lim_{n\to\infty} S_t^{(n,0)} x = S_t^{(0)} x$ **??**

Temperatura, densità, densità di energia **dovrebbero** essere costanti per $\forall t, j > 0$

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1}{|\Lambda \cap \Omega_j|} K_{j,\Lambda}(S_t^{(0)} x) = \frac{d}{2}\beta_j^{-1}\delta_j \equiv \frac{d}{2} k_B T_j \delta_j \qquad ??$$

Entropy: l'entropia dei termostati cresce di

$$\sigma_0(x) = \sum_{j>0} \frac{Q_j}{k_B T_j(x)}, \qquad Q_j \stackrel{def}{=} -\dot{\mathbf{X}}_j \cdot \partial_{\mathbf{X}_j} U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j))$$

Existence: Theorema di Caglioti, Marchioro, Pulvirenti (2000)

Notevole conclusione di una serie di lavori di

Lanford (1968) 1 dimensione (q.o. per stati generali)

Sinai (1971) 1 dimensione (q.o. per stati generali, ottenendo dinamica “a gruppi”)

Marchioro, Pellegrinotti, Presutti (1974) (q.o. solo per stati di Gbbs dim. arbitraria).

Dobrushin Fritz (1975) (q.o. per dim.= 2: stati generali)

$$W(x;\xi,R) \overset{def}{=} \text{energia totale + numero di particelle in sfera } \mathcal{B}(\xi,R)$$

$$\mathcal{E}(x) \overset{def}{=} \sup_{\xi} \sup_{R>(\log_+(\frac{\xi}{r_\varphi}))^{1/d}} \frac{W(x;\xi,R)}{R^d}$$

Sia $\mathcal{N}_i(t,n)$= numero di particelle entro r di $q_i^{(n,0)}(t)$ e sia $T>0$, $v_1 = \sqrt{\frac{2\varphi_0}{m}}$

Risultato 0: $\exists\, C(\mathcal{E}), c(\mathcal{E})^{-1}$, $\uparrow \mathcal{E}$, *e se* $q_i(0) \in \Lambda_k$ $\forall t \le T$,

$$(1) \qquad |\dot q^{(n,0)}(t)| \le v_1\, C(\mathcal{E})\, k^{1/2},$$

$$(2) \qquad \text{distanza}(q_i^{(n,0)}(t), \partial(\cup_j \Omega_j \cap \Lambda)) \ge c(\mathcal{E})\, k^{-3/2\alpha}\, r_\varphi$$

$$(3) \qquad \mathcal{N}_i(t,n) \le C(\mathcal{E})\, k^{3/4}$$

$$(4) \qquad |x_i^{(n,0)}(t) - x_i^{(0)}(t)| \le C(\mathcal{E})\, r_\varphi\, e^{-c(\mathcal{E})2^{nd/2}}$$

$\forall\, n > k$. *Il moto* $x^{(0)}(t)$ *é l'unico privo di attrito che soddisfa 1,2,3*

Q1: La temperatura resta costante per $t > 0$? e le quantità intensive sono costanti del moto?

Q2: Modelli alternativi (termostati Gaussiani Λ_n–regularizzati)

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

$$m\ddot{\mathbf{X}}_{ji} = -\,\partial_i U_j(\mathbf{X}_j) - \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) + \partial_i \Psi(\mathbf{X}_j) - \alpha_{j,n}\dot{\mathbf{X}}_{ji}$$

Con $\alpha_{j,n}$ scelti sì che $U_{j,\Lambda_n} + K_{j,\Lambda_n} = E_{j,\Lambda_n}$ sono esattamente costanti

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

ove $\qquad m\dot{\mathbf{X}}_j^2 \stackrel{def}{=} 2K_{j,\Lambda_n}(x) \stackrel{def}{=} d\, N_j k_B T_j(x)$

Equivalenza? (nel lim. therm. $\Lambda_n \to \infty$)

Idea: $Q_j \stackrel{def}{=} -\dot{\mathbf{X}}_j \cdot \partial_j U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j)$ is $O(1)$ (Williams,Searles,Evans 2004)

quindi $\alpha_j = \frac{Q_j}{d\, N_j k_B T_{j,n}(x)}$ $\Rightarrow$ 0 **per** $n \to \infty$.

But is $T_{j,n}(x) \geq c > 0$ **??**

Risultato 1 (Presutti, G): *Con* μ_0*–probabilità* 1

(a) $\frac{\mathbf{K_{j,\Lambda_n}(S^{(n,1)}x)}}{|\mathbf{\Lambda_n \cap \Omega_j}|} \geq \frac{1}{4}\, d\, \delta_j\, k_B T_j$ *per n grande* *(pertanto* $\alpha \xrightarrow[n\to\infty]{} 0$*).*

(b) $\lim_{n\to\infty} S_t^{(n,1)} x = \lim_{n\to\infty} S_t^{(n,0)} x$ per tutti $t > 0$.

(c) $\frac{d\mu_t(dx)}{dt} = -\sigma(x)\, \mu_t(dx)$ and

$$\sigma(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{j>0}} \frac{\mathbf{Q_j}}{\mathbf{k_B T_j(x)}} + \beta_0(\dot{\mathbf{K}}_\mathbf{0} + \dot{\mathbf{U}}_\mathbf{0} + \dot{\mathbf{\Psi}}_\mathbf{0}) \stackrel{\mathbf{def}}{=} \sigma_\mathbf{0}(\mathbf{x}) + \dot{\mathbf{F}}(\mathbf{x})$$

Produzione di entropia = contrazione del volume + una derivata temporale:

$\Rightarrow$ (media di σ) $\equiv$ (media di σ_0)

purché $\beta_j(x)$ sia una costante del moto per $n \to \infty$ e $\beta_j(S_t x) = \beta_j$

In altre parole: assai in generale la contrazione dello spazio delle fasi può essere identificata con la prodizione di entropia definita nella termodinamica classica.

Risultato 2: *Sia Γ un potenziale a due corpi e $\varphi + \varepsilon\Gamma$ sia superstabile per $|\varepsilon|$ piccolo e $P(\varphi + \varepsilon\Gamma)$ (2 volte) differenziabile a $\varepsilon = 0$ (i.e. "no transiz. fase."))*

$$g(S_t x) \stackrel{def}{=} \lim_{\Lambda_n \to \infty} \frac{1}{\Lambda_n \cap \Omega_j} \sum_{q_i, q'_j \in x} \Gamma(q_i(t) - q'_j(t)) = g$$

con μ_0-probabilità 1 e per tutti $t > 0$: i.e. $g(x)$ é costante del moto.

---

superstabilità) (incluse energie specifiche di potentiali Γ a molti corpi)” se, per ogni fissati m, n, la funzione di correlazione μ_0 fattorizza

$$\rho(q_1, \ldots, q_n, y_1 + \xi, \ldots, y_m + \xi) - \rho(q_1, \ldots, q_n)\rho(y_1 + \xi, \ldots, y_m + \xi) \xrightarrow[\xi \to \infty]{} 0$$

uniformemente nei diametri degli insiemi $\{q_1, \ldots, q_n\}$ e $\{y_1, \ldots, y_n\}$.

$\Rightarrow$ Infinite constanti del moto

Metodo: “*Stime entropiche*” per i moti con termostato

(I) Si mostra che l’energia cinetica per particella (nel moto Λ_n–regolarizzato) resta $> \frac{d}{4}\delta_j\beta_j^{-1}$ con μ_0-probabilità 1 per $t \le \Theta$.

(II) Si dimostra che il numero di particelle e ls loro energia inclusa la cinetica e quella d’interzione con le pareti) in una scatola unitaria cresce al più con una potenza $\gamma \in (\frac{1}{2}, 1)$ of $(\log_+(|\xi|/r_\varphi))^{\frac{1}{2}} \cdot (\log n)^\gamma$

Idee Sinai, Fritz-Dobrushin, e Marchioro, Pellegrinotti, Presutti, Pulvirenti (1975,1976).

Si collega $||x|| \stackrel{def}{=} \max_{\xi\in\Lambda_n} \frac{\max(N_{C_\xi}(x),\varepsilon_{C_\xi}(x))}{(\log_+(\xi/r_\varphi))^{1/2}}$ ove

$C_\xi \stackrel{def}{=}$ cubo unitario centrato ξ, $N_{C_\xi}(x)$= numero di particelle in C_ξ,

$\varepsilon^2_{C_\xi} \stackrel{def}{=} \max_{q\in C_\xi}(\frac{1}{2}\dot{q}^2 + \psi(q))$. energia cinetica+parete

1) Dato $1 > \gamma > \frac{1}{2}$, definisco per x t.c. $\mathcal{E}(x) \le E$, il **tempo d'arresto** $\tau(x)$

$$T_n(x) \stackrel{def}{=} \max\{t:\ t \le \Theta:\ \forall\, \tau < t,$$
$$\frac{K_{j,n}(S_\tau^{(n,1)}x)}{\varphi_0} > \kappa 2^{nd}, \quad \|S_t^{(n,1)}x\|_n < (\log n)^\gamma\}.$$

2) si mostra che prima dell'arresto l'evoluzione senz'attrito e quella termostatata sono molto vicine per particelle che inizialmente sono in Λ_k purchè la regolarizzazione sia a $n \gg k$.

3) Si controlla che la μ_0-probabilità di $\mathcal{B} \stackrel{def}{=} \{x \,|\, x \in \mathcal{X}_E \text{ e } T_n(x) \le \Theta\}$ sia

$$\mu_0(\mathcal{B}) \le\ C\, e^{-c(\log n)^{2\gamma}}.$$

Via stime di grandi deviazioni.
"Se si è entro il tempo di arresto alllora il moto resta vicino a quello senza attrito: ma allora la produzione di emtropia e' finita e allora la distribuzione di probabilit'a non é cambiata molto e si può usare la distribuzione iniziale i equilibrio e quindo nota"