

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Dipartimento di Matematica “Tullio Levi Civita”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Dinamica e termodinamica del pistone adiabatico

Relatore

Prof. Giancarlo Benettin

Laureando

Alessandro Lonardi

Anno Accademico 2017/2018

Indice

| | |
|---|-----------|
| Introduzione | 1 |
| 1 Il problema del pistone adiabatico | 3 |
| 1.1 Nascita del problema | 3 |
| 1.2 Il sistema | 4 |
| 2 Approccio termodinamico | 5 |
| 2.1 Equilibrio | 5 |
| 2.2 Equilibri termodinamici | 5 |
| 2.3 Adiabaticità | 7 |
| 3 Modelli dinamici microscopici | 9 |
| 3.1 Invarianti adiabatici | 9 |
| 3.1.1 Moto del pistone | 10 |
| 3.1.2 Moto delle particelle | 12 |
| 3.1.3 Potenziale mediato | 13 |
| 3.2 Modello idrodinamico | 14 |
| 3.2.1 Descrizione del modello | 14 |
| 3.2.2 Preparazione delle simulazioni | 15 |
| 3.2.3 Risultati numerici | 16 |
| 3.3 Configurazione fisica | 21 |
| 3.3.1 Approccio con la termodinamica del non equilibrio | 21 |
| 3.3.2 Generazione di una distribuzione gaussiana | 23 |
| 3.3.3 Risultati numerici | 23 |
| Conclusioni | 27 |
| A Codice - Collisioni | 29 |

Introduzione

Lo scopo di questo lavoro di tesi è quello di presentare e rielaborare, attraverso sia derivazioni di natura fisico-matematica, che attraverso simulazioni numeriche, alcuni dei modelli elementari per l'analisi del cosiddetto problema del *pistone adiabatico*.

La questione, presentata da E.H. Lieb nel 1999 (cfr. [1]), tra una serie di problemi di meccanica che allora necessitavano di chiarimento, pone il lettore di fronte ad un problema di natura solo apparentemente semplice: un gas ideale riempie un contenitore adiabatico nel quale una delle pareti è sostituita da un setto mobile, anch'esso adiabatico. Quali sono gli stati di equilibrio del sistema? Come evolve la dinamica nel caso in cui nella configurazione iniziale stia fuori dall'equilibrio?

La risposta elementare per cui l'equilibrio è determinato solamente dall'uguaglianza delle pressioni ai lati del pistone, mentre la temperatura può assumere valore qualsiasi, risulta, a seguito di un'indagine oculata, ingenua. Fin da subito sarà evidente come i principi della termodinamica, se si parte da una situazione fuori equilibrio, non permettono di determinare lo stato di equilibrio finale del sistema. Si vedrà come per arrivare a delle conclusioni ragionevoli sulla termodinamica e sulla dinamica del problema sarà necessario percorrere una strada tutt'altro che spianata, lavorando su diversi modelli dinamici microscopici, che porterà a risultati non banali e, soprattutto, a rimettere in discussione capisaldi della fisica quali la nozione di *adiabaticità*.

Il sistema verrà studiato principalmente in due situazioni di scala differenti: il consueto limite degli *invarianti adiabatici*, con m e N , massa di una particella del gas e numero di particelle, mantenuti costanti, μ , massa del gas, sarà costante di conseguenza mentre su M , massa del pistone, viene operato il limite $M \rightarrow \infty$. Per l'analisi di questo limite, l'unico nel quale si riesce a compiere un'analisi perturbativa sul sistema, che appare qui ben controllato dal punto di vista matematico, si riporteranno i risultati ottenuti da Ya. G. Sinai in [4]. Saranno poi rielaborati alcuni dei risultati presenti in [5], nel meno consueto *limite idrodinamico*, con $m = \text{cost.}$, $\mu \sim L^3$ e $M \sim L^2$, e $L \rightarrow \infty$. In questo caso sarà necessario ricorrere allo svolgimento di simulazioni numeriche, eseguite sullo stampo di quelle di N. Chernov e J. L. Lebowitz, per lo studio del comportamento del sistema, dalla fase di transiente verso l'equilibrio, fino alla termalizzazione.

Organizzazione dell'elaborato:

Capitolo 1 – Nel primo capitolo viene presentato il problema attraverso una riscrittura dettagliata del sistema e dell'approccio, di tipo termodinamico, con cui Lieb stesso lo affronta. L'analisi dell'autore culmina con tre vincoli possibili con cui forzare la termodinamica per risolvere alcuni “paradossi” che sorgono durante la precedente trattazione.

Capitolo 2 – Qui inizialmente sarà discusso il contesto termodinamico in cui il problema si inserisce, con lo scopo di ottenere gli strumenti necessari per averne una corretta comprensione. Quindi viene ripercorso il metodo attraverso cui Callen, in [3], affronta il sistema con gli strumenti della termodinamica di equilibrio.

Capitolo 3 – Nel terzo capitolo vengono presentate le due situazioni di scala nelle quali può essere affrontato il problema.

- limite di invarianza adiabatica: si trova, attraverso metodi perturbativi, come il moto del pistone sia riconducibile ad un problema meccanico ad 1 grado di libertà, con un potenziale mediato che si lega al pistone con la consueta relazione $\ddot{x}(\tau) = \frac{dU}{dx}$;
- limite idrodinamico: in questa trattazione si può osservare, attraverso delle simulazioni numeriche eseguite sullo stampo di quelle effettuate in [5], il comportamento del pistone nella sua interezza. Si prenderà in analisi, infatti, sia la fase di “build-up” verso il moto macroscopico, che lo smorzamento dell’oscillazione verso la termalizzazione. Le simulazioni numeriche, inoltre, permetteranno di osservare la dinamica sia dal punto di vista del pistone che da quello delle particelle del gas;

Nel limite idrodinamico si indaga sul problema con gli strumenti della termodinamica del non equilibrio, arrivando a derivare un sistema di equazioni differenziali del primo ordine (3.27) che permette di determinare in modo univoco lo stato di equilibrio. Poi, attraverso una seconda versione del codice adoperato precedentemente, si osservano le caratteristiche principali del moto del pistone e del gas quando le particelle, nello stato iniziale, sono termalizzate a T_1 e T_2 , differenti, nei due volumi.

Appendice – In appendice è riportato uno dei codici utilizzati per le simulazioni numeriche.

Capitolo 1

Il problema del pistone adiabatico

1.1 Nascita del problema

Il problema, portato alla luce da Elliot H. Lieb nel 1999, in un articolo scritto in occasione del conferimento della medaglia Boltzmann [1], viene descritto come un “amusing cautionary example with which I occasionally irritate some of my friends”, riportato dettagliatamente qui di seguito.

Il sistema analizzato è costituito da un gas ideale all’equilibrio in un contenitore isolato cosicché non possono avvenire scambi di calore con l’esterno; una delle facce del contenitore è sostituita da un pistone, anch’esso adiabatico, libero di muoversi senza attrito nel contenitore, che la configurazione considerata viene tenuto fermo da una pietra poggiata sul pistone. Il peso della pietra è chiaramente responsabile della pressione del gas. La domanda da porsi è: il sistema è in equilibrio?¹

La risposta è tutt’altro che semplice. Da un punto di vista puramente macroscopico la risposta è affermativa, è noto, infatti, che la comprimibilità adiabatica $\chi_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_S$ è sempre positiva: se viene applicata una forza dall’esterno questa spingerà il pistone verso il basso causando un aumento di pressione, quindi la pietra si muoverà verso l’alto proprio sotto l’effetto della pressione e il sistema si sposterà nuovamente verso la configurazione di equilibrio, oscillando.

L’obiezione che si può fare a questo punto è la seguente: se la temperatura della pietra e quella del gas non sono uguali allora il sistema non è in equilibrio. Tale affermazione trova giustificazione grazie alla definizione di entropia di Boltzmann-Gibbs $S = k_B \log \Omega$ e al principio di massimizzazione dell’entropia da cui si deriva che la condizione di equilibrio di un sistema è quella in cui l’entropia è la massima permessa dai vincoli, questa condizione nel caso in esame si ottiene quando la pietra e il gas hanno la stessa temperatura. Una maniera equivalente di presentare il vincolo di massimo è considerare che l’entropia può essere aumentata, se le temperature di pietra e gas sono diverse, trasferendo calore dal sottosistema a temperatura maggiore a quello a temperatura minore. L’adiabaticità del pistone non permette il passaggio di calore ma è possibile rendere conto di quanto detto considerando la pressione come un’osservabile mediata e, quindi, notare come le fluttuazioni di pressione e densità del gas generino un moto di tipo browniano sul pistone, consentendo così il trasferimento di energia anche in assenza di conduzione termica, nel senso consueto del termine. In questo caso è evidente che le scale di tempi per il compimento del passaggio di energia sono molto, molto lunghe, sorge quindi il problema non trascurabile dell’osservazione del sistema per cui l’esperimento è classificabile come “gedankenexperiment”.

Il sistema, inoltre, genera un paradosso altrettanto cruciale. In accordo con il secondo principio della termodinamica, infatti, è noto che per un sistema isolato l’entropia è una funzione non decrescente, quindi, sia per la pietra che per il gas si deve avere $\Delta S \geq 0$. Tuttavia, in accordo con l’obiezione compiuta precedentemente, considerando il contributo delle fluttuazioni, è chiaro che il sottosistema più caldo cede

¹Non è banale capire cosa si intende per equilibrio, la definizione deve essere ben adattata al contesto di volta in volta.

calore a quello più freddo e diminuisce la sua entropia, generando così un apparente paradosso. Le assunzioni proposte da Lieb per sanare il problema sorto sono:

- considerare la possibilità che il moto macroscopico del pistone non possa essere descritto attraverso un modello microscopico mediato, abbandonando così il concetto di limite termodinamico;
- abbandonare la definizione di entropia di Gibbs-Boltzmann e, quindi, il principio di massimo per gli stati di equilibrio;
- abbandonare il secondo principio della termodinamica.

La scelta dell'ipotesi corretta da tenere in considerazione non è di certo facile, si vedrà non essere nemmeno la strada corretta da percorrere, verrà infatti reso chiaro la chiave del problema non sta nel tentare di “forzare” delle ipotesi termodinamiche, bensì nel cercare di inserire il sistema in un contesto teorico adeguato, nel quale nozioni quali equilibrio e adiabaticità vengono adattate al sistema.

Nei capitoli successivi si ragionerà sul problema, concentrandosi sia sulle sue sfumature meccaniche che termodinamiche, si utilizzeranno sia derivazioni fisico-matematiche che simulazioni numeriche.

1.2 Il sistema

I modelli che verranno poi analizzati fanno riferimento al seguente sistema fisico, del tutto equivalente a quello descritto da Lieb, con le dovute variazioni del caso, conseguenza dei processi di limite sulle variabili cruciali per il moto (m , N , M , μ , L), che verranno specificate di volta in volta.

Si considera un contenitore, a forma di parallelepipedo, isolato dall'universo. All'interno del volume è libero di muoversi, senza attrito, un pistone adiabatico, che non ha struttura microscopica interna e non ha una temperatura; compare nel sistema come un grado di libertà aggiuntivo di tipo meccanico, non permette quindi scambi di calore, e confina, nella parte destra e sinistra del recipiente, due gas.

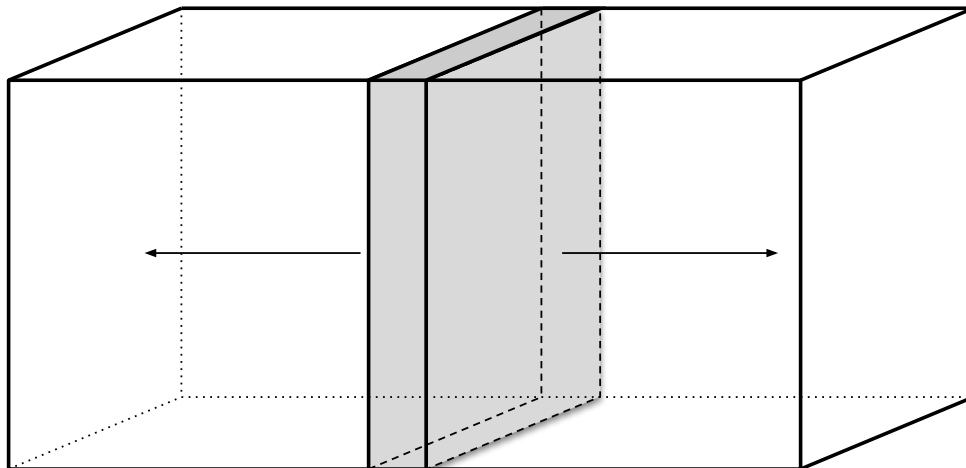


Figura 1.1: Rappresentazione del modello del pistone adiabatico.

Capitolo 2

Approccio termodinamico

Prima di procedere con la trattazione del sistema è bene effettuare delle considerazioni sulla nozione di equilibrio, non solo termodinamico, e sulla determinazione di uno stato di equilibrio.

2.1 Equilibrio

Data la natura del problema sorge subito spontaneo procedere con un'analisi di tipo termodinamico. Le due naturali definizioni che permettono di arrivare a quella di *equilibrio termodinamico* sono:

- *equilibrio meccanico*, è di un sistema nel quale la somma di tutte le forze applicate sui singoli componenti macroscopici è nulla;
- *equilibrio termico* è di un sistema in cui i diversi costituenti, se messi a contatto tra di loro attraverso una parete diatermica, non modificano i loro parametri di stato. (cfr. [2])

Un sistema in equilibrio meccanico + termico è in equilibrio termodinamico.

2.2 Continuo degli equilibri termodinamici

L'impossibilità in alcuni casi della determinazione univoca dell'equilibrio termodinamico attraverso delle condizioni necessarie e sufficienti sulle variabili macroscopiche è portata alla luce dall'analisi di Callen in [3]. Il sistema considerato è quello presentato in 1.2 con n_1 e n_2 il numero di moli a sinistra e destra fissati. Partendo dai principi della termodinamica è immediato mostrare che, in condizioni di equilibrio, le pressioni P_1 e P_2 devono essere uguali mentre nulla si può dedurre sul valore della temperatura. Formalmente si procede così. È noto che l'equazione fondamentale della termodinamica nella rappresentazione dell'entropia è

$$S = S(U_1, U_2, V_1, V_2; n_1, n_2). \quad (2.1)$$

Di seguito verranno omessi i numeri di mole, costanti durante tutto il processo. Per il sistema valgono le condizioni

$$\begin{cases} V_1 + V_2 = V, \text{ cost.} \\ U_1 + U_2 = U, \text{ cost.} \end{cases}$$

quindi, data l'estensività dell'entropia, è possibile scrivere:

$$S = S_1(U_1, V_1) + S_2(U_2, V_2) \quad (2.2)$$

inoltre è noto dal primo principio che

$$\delta Q_i = \delta W_i + dU_i \quad i = 1, 2 \quad (2.3)$$

è possibile formalizzare il limite imposto dall'adiabaticità del pistone, che impedisce il passaggio di flussi di calore tra le due parti, imponendo $\delta Q = 0$, vincolo di adiabaticità. Si ottiene, quindi da 2.3

$$dU_i = -P_i dV_i \quad i = 1, 2.$$

Sostituendo quest'ultima relazione nella 2.1 differenziata

$$dS = \frac{1}{T_1} dU_1 + \frac{P_1}{T_1} dV_1 + \frac{1}{T_2} dU_2 + \frac{P_2}{T_2} dV_2$$

si ottiene $dS = 0$, risultato non sufficiente per conoscere le variabili termodinamiche che determinano lo stato di equilibrio.

Comunque è possibile ottenere informazioni sul sistema adoperando il vincolo di adiabaticità in

$$dU_1 = -dU_2$$

che pone immediatamente

$$P_1 = P_2. \quad (2.4)$$

Alla luce di quanto noto sulla determinazione di uno stato di equilibrio termodinamico è evidente che per il sistema considerato, in cui l'equazione fondamentale della termodinamica comprende solo due variabili termodinamiche (V, U), la condizione sulle pressioni in 2.4 è necessaria ma non sufficiente.

Interessante è notare che fissato uno stato di equilibrio meccanico è possibile definire infiniti stati di equilibrio termodinamico. Una maniera intuitiva di visualizzare questo fatto senza perdere di generalità, si veda la figura 2.1, è quella di considerare una delle due metà del volume riempita da un gas ideale monoatomico, e cercare l'intersezione tra il luogo dei punti definiti dalla condizione di equilibrio meccanico $P = \text{cost.}$ e quello definito dai punti raggiungibili attraverso una trasformazione adiabatica $TV^{\gamma-1} = \text{cost.}$, ove $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ è il solito coefficiente di dilatazione adiabatica.

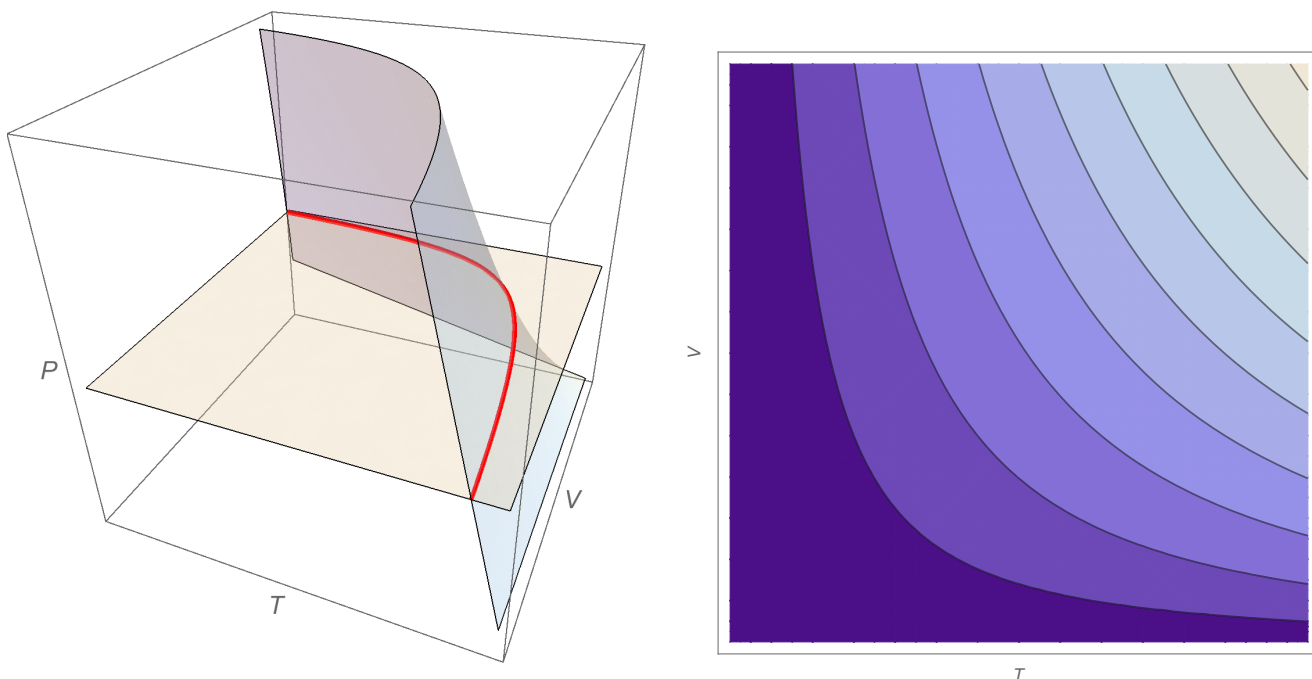


Figura 2.1: sx: Intersezione tra $P = \text{cost.}$ e $TV^{\gamma-1} = \text{cost.}$ dx: Curve di livello di $TV^{\gamma-1}$.

2.3 Adiabaticità

Il concetto di adiabaticità, secondo la termodinamica, consiste nell'assenza di flussi di calore. Essendo tuttavia il termine dipendente dal grado di accuratezza dell'osservazione macroscopica, il compito di capire cosa è “realmente” adiabatico risulta più arduo del previsto.

In primo luogo è bene fare una considerazione, non cruciale per l'analisi del problema, sulla struttura atomico-molecolare del pistone. I costituenti del pistone, ovvero le molecole, grazie alla proprietà di adiabaticità, non sono in grado di variare il loro stato di eccitazione microscopico, quindi, in nessun modo può avvenire un passaggio di energia tra le due parti che questo separa. Ovviamente non esistono materiali perfettamente adiabatici in natura, capaci di impedire il passaggio di energia per un tempo infinito; l'apparente problema che la questione comporta risulta in ogni caso di poco conto, infatti, il tempo di osservazione Δt di un certo sistema sarà sempre finito, ed è comunque una lecita assunzione pensare di poter costruire l'apparato in modo tale che l'adiabaticità venga mantenuta per un tempo Δt_Q tale che $\Delta t_Q \gg \Delta t$. A tal proposito si fa una distinzione tra materiali, si definisce:

- *internamente adiabatico*, un materiale in grado impedire il trasferimento di energia attraverso l'eccitazione di gradi di libertà interni, per cui vale $\Delta t_Q \gg \Delta t$;
- *diatermico* un materiale per cui vale $\Delta t_Q \ll \Delta t$.

La questione che viene trattata da Lieb, però, non riguarda i gradi di libertà microscopici interni del pistone, viene infatti supposto di avere nel tempo di osservazione macroscopico un pistone internamente adiabatico, bensì la possibilità di avere, attraverso fluttuazioni di pressione, trasferimento di energia tra le due parti. La comunicazione tra le due sezioni del contenitore infatti è innescata proprio dalle fluttuazioni di pressione e densità delle particelle, apprezzabili solo attraverso la descrizione di un modello meccanico, che, urtando ripetutamente contro il pistone generano un moto di deriva di tipo browniano unidimensionale del pistone. Questo moto browniano, nel quale il pistone gioca il ruolo di particella massiva, fornisce un canale di passaggio all'energia da un gas all'altro, indipendentemente dalla conduzione termica. Il sistema composto da gas e pistone è isolato, quindi, si conserva l'energia. Dal principio di equipartizione dell'energia inoltre è noto che l'energia media dipende dal numero di gradi di libertà quadratici che descrivono il sistema, per il pistone il moto è descritto interamente dalla dinamica lungo una sola direzione. L'energia media a termalizzazione raggiunta sarà

$$\langle \mathcal{E}_{pist} \rangle = \frac{1}{2} M \langle V^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T_{eq}. \quad (2.5)$$

Si vede facilmente come risulti naturale il passaggio ad una visione microscopica, che include la dinamica, nella quale il problema è totalmente guidato da un parametro di fondamentale importanza: $\varepsilon := m/M$. Il trasferimento di energia si riduce nei due casi limite $\varepsilon \rightarrow 0$ ($M \rightarrow \infty$) ad essere nullo e ad essere massimo, nel senso che il comportamento del pistone è corrispondente a quello delle particelle del gas, per $\varepsilon \rightarrow 1$. Così si risolve il “paradosso” termodinamico proposto da Lieb e risultano inutili le ipotesi proposte in 1.1. Il problema trova soluzione essendo $\varepsilon \neq 0$, è permesso di conseguenza il passaggio di energia tra le due metà del contenitore, anche se non in forma di trasferimento di calore, questo porta, in seguito alla termalizzazione, in tempi infiniti, al raggiungimento di un equilibrio termodinamico univoco in cui valgono le condizioni $P_1 = P_2$ e $T_1 = T_2$.

Capitolo 3

Modelli dinamici microscopici

Il problema a questo punto, essendo stato affrontato con gli strumenti della termodinamica di equilibrio, è stato descritto nel limite di tempi infiniti, a termalizzazione raggiunta. Rimane da studiare il transiente per il raggiungimento dello stato di equilibrio, per farlo si prenderanno in considerazione differenti situazioni di scala, non necessariamente legate tra loro:

- limite degli invarianti adiabatici: in questa trattazione si trovano delle equazioni mediate a cui soddisfa il pistone nel limite per cui viene mantenuta costante la massa m , della singola particella del gas, N , il numero di particelle, quindi μ , massa del gas, mentre $M \rightarrow \infty$; tali equazioni, si dimostra, descrivono accuratamente il moto del pistone su una scala di tempo dell'ordine $\mathcal{O}(\sqrt{M})$.
- limite idrodinamico: qui il sistema è analizzato attraverso il limite per cui $m = \text{cost.}$, $\mu \sim L^3$ e $M \sim L^2$, con $L \rightarrow \infty$. Il comportamento del pistone risulta essere complesso e poco intuitivo, per il raggiungimento della termalizzazione infatti il pistone sarà soggetto ad un moto microscopico prima e macroscopico, poi.

Il sistema viene analizzato nella seguente configurazione: il pistone viene posto inizialmente in una posizione diversa dalla metà del volume, i gas sono in equilibrio ovvero le velocità sono distribuite con una maxwelliana (gaussiana) unidimensionale; qui il parametro di controllo fondamentale sul sistema è la temperatura, rispettivamente T_1 e T_2 per i due volumi.

3.1 Modello degli invarianti adiabatici

Il modello, presentato da Ya. G. Sinai in [4], consiste nell'analisi del sistema presentato in 1.2 in un particolare limite. La dinamica del problema chiaramente è ben descritta con un grado di libertà, il moto delle molecole del gas lungo gli assi paralleli alla superficie del pistone è totalmente irrilevante; le particelle si prendono confinate nel segmento $[0, 1]$.

In particolare il sistema è composto da una *particella-pistone* di massa M posizionata, in maniera del tutto convenzionale, in $X(0) = 1/2$ con $V(0) = 0$; sono presenti inoltre $r^{(-)}$ particelle di massa $m_i^{(-)}$ tali per cui $x_i^{(-)}(0) < 1/2$ e $v_i^{(-)}(0) > 0$ con $i = 1 \dots r^{(-)}$, allo stesso modo si hanno $r^{(+)}$ particelle con massa $m_j^{(+)}$ che soddisfano le condizioni $x_j^{(+)}(0) > 1/2$ e $v_j^{(+)}(0) < 0$, con $j = 1 \dots r^{(+)}$. Ogni particella si muove indipendentemente dalle altre ed urta elasticamente con le pareti agli estremi del segmento e contro la particella pesante. Nella derivazione del risultato i numeri e le masse delle particelle saranno fissate, mentre la massa del pistone sarà soggetta al limite $M \rightarrow \infty$.

3.1.1 Moto del pistone

Dalla conservazione dell'energia è immediato trovare la relazione

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}MV(t)^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{r(-)} m_i^{(-)} \left(v_i^{(-)}(t)\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{r(+)} m_j^{(+)} \left(v_j^{(+)}(t)\right)^2 \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{r(-)} m_i^{(-)} \left(v_i^{(-)}(0)\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{r(+)} m_j^{(+)} \left(v_j^{(+)}(0)\right)^2. \end{aligned}$$

Essendo i termini nelle sommatorie relative all'energia delle particelle sempre positivi o nulli si ottiene immediatamente $|V(t)| \leq \sqrt{2H/M}$, quindi la velocità è $V \in \mathcal{O}(1/\sqrt{M})$. È naturale a questo punto definire delle variabili lente in funzione di $\tau = t/\sqrt{M}$; è lecito supporre che la funzione $X(\tau)$ posizione del pistone per il tempo lento abbia limite per $M \rightarrow \infty$, si deriva di seguito questa funzione limite.

Come detto gli urti delle particelle avvengono elasticamente con il pistone e con le pareti, indicando con un apice le quantità dopo un urto e senza apice quelle prima dell'urto, si ottiene, indicando con v la velocità di una particella qualunque e con V quella del pistone:

$$\begin{cases} v' = -\left(1 - \frac{2m}{M+m}\right)v + \frac{2M}{M+m}V \\ V' = \left(1 - \frac{2m}{M+m}\right)V + \frac{2m}{M+m}v. \end{cases} \quad (3.1)$$

Si considerano quindi due istanti successivi $t = \tau\sqrt{M}$ e $t_1 = (\tau + \delta)\sqrt{M}$, in questo intervallo di tempo lo spostamento del pistone è dell'ordine di δ . Si hanno, in $[t, t_1]$, collisioni successive di particelle con il pistone che vengono indicizzate da k tale che $k = k_0 + 1, \dots, k_1$. Si ottiene quindi dalla seconda equazione del sistema 3.1:

$$V_{k+1} = \left(1 - \frac{2m_k}{M + m_k}\right)V_k + \frac{2m_k}{M + m_k}v_k \quad (3.2)$$

con $m_k = m_i^{(-)}$ o $m_k = m_j^{(+)}$ a seconda che l'urto avvenga con una particella a sinistra o a destra del pistone. Si definiscono le variabili

$$\begin{cases} \varepsilon_i^{(-)} := \frac{2m_i^{(-)}}{M+m_i^{(-)}} \\ \varepsilon_j^{(+)} := \frac{2m_j^{(+)}}{M+m_j^{(+)}}. \end{cases}$$

Applicando la 3.2 in maniera ricorsiva segue che

$$\begin{aligned} V_{k_1} &- \prod_{\substack{i=1\dots r(-) \\ j=1\dots r(+)}} \left(1 - \varepsilon_i^{(-)}\right)^{n_i^{(-)}} \left(1 - \varepsilon_j^{(+)}\right)^{n_j^{(+)}} V_{k_0} \\ &= \sum_{i=1}^{r(-)} \varepsilon_i^{(-)} \sum_{k \in \mathcal{N}_i^{(-)}} v_k \prod_{\substack{i'=1\dots r(-) \\ j'=1\dots r(+)}} \left(1 - \varepsilon_{i'}^{(-)}\right)^{n_{i'}^{(-)}(k)} \left(1 - \varepsilon_{j'}^{(+)}\right)^{n_{j'}^{(+)}(k)} \\ &+ \sum_{j=1}^{r(+)} \varepsilon_j^{(+)} \sum_{k \in \mathcal{N}_j^{(+)}} v_k \prod_{\substack{i''=1\dots r(-) \\ j''=1\dots r(+)}} \left(1 - \varepsilon_{i''}^{(-)}\right)^{n_{i''}^{(-)}(k)} \left(1 - \varepsilon_{j''}^{(+)}\right)^{n_{j''}^{(+)}(k)} \end{aligned} \quad (3.3)$$

con $n_i^{(-)}$ e $n_j^{(+)}$ che sono i numeri di collisioni della particella i -esima e j -esima durante tutto l'intervallo considerato $[t, t_1]$, similmente i numeri $n_i^{(-)}(k)$ e $n_j^{(+)}(k)$ indicano la stessa quantità in un intervallo dalla

k -esima collisione alla k_1 -esima, $\mathcal{N}_i^{(-)}$ e $\mathcal{N}_j^{(+)}$ sono gli insiemi in cui sono contenuti i numeri k che indicizzano le collisioni successive.

Avendo supposto che la funzione $X(\tau)$ abbia limite per $M \rightarrow \infty$ si ha

$$\frac{d}{dt}X(\tau) = \frac{1}{\sqrt{M}}\dot{X}(\tau)$$

la velocità del pistone è quindi

$$V(t) = \frac{1}{\sqrt{M}}W\left(\frac{t}{\sqrt{M}}\right).$$

Quindi si applicano, in ordine, il limite $M \rightarrow \infty$ e $\delta \rightarrow 0$ alla differenza $W(\tau + \delta) - W(\tau)$, ottenendo così le seguenti espressioni:

$$\begin{aligned} W(\tau + \delta) - W(\tau) &= \sum_{i=1}^{r^{(-)}} \frac{2m_i^{(-)}\sqrt{M}}{M + m_i^{(-)}} \sum_{k \in \mathcal{N}_i^{(-)}} v_k + \sum_{j=1}^{r^{(+)}} \frac{2m_j^{(+)}\sqrt{M}}{M + m_j^{(+)}} \sum_{k \in \mathcal{N}_j^{(+)}} v_k \\ &+ \left[\prod_{\substack{i=1 \dots r^{(-)} \\ j=1 \dots r^{(+)}}} \left(1 - \varepsilon_i^{(-)}\right)^{n_i^{(-)}} \left(1 - \varepsilon_j^{(+)}\right)^{n_j^{(+)}} - 1 \right] W(\tau) \\ &+ \sqrt{M} \sum_{i=1}^{r^{(-)}} \varepsilon_i^{(-)} \sum_{k \in \mathcal{N}_i^{(-)}} v_k \left[\prod_{\substack{i'=1 \dots r^{(-)} \\ j'=1 \dots r^{(+)}}} \left(1 - \varepsilon_{i'}^{(-)}\right)^{n_{i'}^{(-)}(k)} \left(1 - \varepsilon_{j'}^{(+)}\right)^{n_{j'}^{(+)}(k)} - 1 \right] \\ &+ \sqrt{M} \sum_{j=1}^{r^{(+)}} \varepsilon_j^{(+)} \sum_{k \in \mathcal{N}_j^{(+)}} v_k \left[\prod_{\substack{i''=1 \dots r^{(-)} \\ j''=1 \dots r^{(+)}}} \left(1 - \varepsilon_{i''}^{(-)}\right)^{n_{i''}^{(-)}(k)} \left(1 - \varepsilon_{j''}^{(+)}\right)^{n_{j''}^{(+)}(k)} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Si ha che $\varepsilon_{i,j}^{(\pm)} \in \mathcal{O}\left(\frac{1}{M}\right)$, quindi

$$W(\tau + \delta) - W(\tau) = \sum_{i=1}^{r^{(-)}} \frac{2m_i^{(-)}\sqrt{M}}{M + m_i^{(-)}} \sum_{k \in \mathcal{N}_i^{(-)}} v_k + \sum_{j=1}^{r^{(+)}} \frac{2m_j^{(+)}\sqrt{M}}{M + m_j^{(+)}} \sum_{k \in \mathcal{N}_j^{(+)}} v_k + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{M}}\right). \quad (3.5)$$

Si può utilizzare, a questo punto, il fatto che la velocità delle particelle leggere prima dell'impatto con il pistone, nell'intervallo $[\tau\sqrt{M}, (\tau + \delta)\sqrt{M}]$, varia lentamente per urti successivi (sarà giustificato in seguito).

Quindi si ottengono le due espressioni:

$$\begin{cases} \sum_{k \in \mathcal{N}_i^{(-)}} v_k = v_i^{(-)}(\tau\sqrt{M}) n_i^{(-)}(1 + o(1)) \\ \sum_{k \in \mathcal{N}_j^{(+)}} v_k = v_j^{(+)}(\tau\sqrt{M}) n_j^{(+)}(1 + o(1)) \end{cases}$$

con la funzione $o(1)$ convergente uniformemente in M con $\delta \rightarrow 0$. Si possono stimare a questo punto i tempi di collisione tra due urti consecutivi per una particella di destra o di sinistra, dividendo l'intervallo

temporale in cui si muove il pistone per queste due quantità si ottengono i numeri degli urti del pistone con le particelle, rispettivamente di destra e di sinistra, essi sono:

$$\begin{cases} n_i^{(-)} = \frac{\delta\sqrt{M}v_i^{(-)}(\tau\sqrt{M})}{2X(\tau)}(1 + o(1)) \\ n_j^{(+)} = \frac{\delta\sqrt{M}v_j^{(+)}(\tau\sqrt{M})}{2(1-X(\tau))}(1 + o(1)). \end{cases} \quad (3.6)$$

Si sostituiscono le espressioni trovate nella 3.5 e si effettuano i soliti limiti $M \rightarrow \infty$ e $\delta \rightarrow 0$, si ottiene così l'importante relazione

$$\ddot{X}(\tau) = \sum_{i=1}^{r^{(-)}} \frac{m_i^{(-)} \left(V_i^{(-)}(\tau)\right)^2}{X(\tau)} - \sum_{j=1}^{r^{(+)}} \frac{m_j^{(+)} \left(V_j^{(+)}(\tau)\right)^2}{1-X(\tau)} \quad (3.7)$$

con $V_{i,j}^{(\pm)}(\tau) = v_{i,j}^{(\pm)}(\tau\sqrt{M})$.

3.1.2 Moto delle particelle

Di seguito si deriva una certa espressione per la velocità delle particelle del gas che dipenderà solamente dalla posizione del pistone e dalle condizioni iniziali del sistema.

Per la trattazione è sufficiente considerare una delle N particelle che collide con il pistone, la particella etichettata da $i = 1$, nel volume di sinistra. L'indice che permette di numerare le collisioni consecutive della suddetta particella è $k \in \mathcal{N}_i^{(-)} := s$. Si ottiene dalla prima equazione della 3.1 l'espressione

$$v_{s+1}^{(-)} = \left(1 - \varepsilon_1^{(-)}\right) v_s^{(-)} - \frac{2M}{M + m_1^{(-)}} V_s. \quad (3.8)$$

Iterando l'espressione 3.8 fino all'ultima collisione $n_1^{(-)}$, nell'intervallo $[\tau\sqrt{M}, (\tau + \delta)\sqrt{M}]$, della particella etichettata si ottiene

$$v_1^{(-)}\left((\tau + \delta)\sqrt{M}\right) - v_1^{(-)}\left(\tau\sqrt{M}\right) = -2 \sum_{s=0}^{n_1^{(-)}-1} V_s + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{M}}\right). \quad (3.9)$$

Notando che vale la seguente relazione

$$V_s = \sum_{t=1}^s (V_t - V_{t-1}) + V_0$$

utilizzando la definizione di $V_{i,j}^{(\pm)}(\tau)$ data precedentemente e sostituendo in 3.9 si ottiene:

$$V_1^{(-)}(\tau + \delta) - V_1^{(-)}(\tau) = 2n_1^{(-)}V_0 + \sum_{s=0}^{n_1^{(-)}} \sum_{t=1}^s (V_t - V_{t-1}). \quad (3.10)$$

È possibile verificare che la doppia sommatoria nell'espressione appena scritta è dell'ordine $\mathcal{O}(\delta^2)$, quindi, nel processo di limite per $\delta \rightarrow 0$ può essere omessa, al primo ordine. Ricordando le espressioni trovate per il numero di urti del pistone con le particelle di sinistra e destra date in 3.6 si deriva

$$\begin{cases} \frac{dV_i^{(-)}(\tau)}{d\tau} = -V_i^{(-)}(\tau) \frac{\dot{X}(\tau)}{X(\tau)} \\ \frac{dV_j^{(+)}(\tau)}{d\tau} = V_j^{(+)}(\tau) \frac{\dot{X}(\tau)}{1-X(\tau)} \end{cases} \quad (3.11)$$

dove si è tornati ai soliti indici per indicare le particelle a sinistra e quelle a destra rispetto al pistone. Dalle relazioni appena scritte si può trovare:

$$\begin{cases} V_i^{(-)}(\tau) = \frac{C_i^{(-)}}{X(\tau)} \\ V_j^{(+)}(\tau) = \frac{C_j^{(+)}}{1-X(\tau)} \end{cases}$$

con le costanti $C_{i,j}^{(\pm)}$ dipendono dalle condizioni iniziali del sistema.

3.1.3 Potenziale mediato

Sostituendo le relazioni appena derivate nell'equazione 3.7 si ottiene l'equazione che permette di descrivere il moto del pistone, in funzione non del tempo t , bensì della nuova variabile riscaltata τ :

$$\ddot{X}(\tau) = \frac{\sum_{i=1}^{r^{(-)}} m_i^{(-)} \left(C_i^{(-)}\right)^2}{X(\tau)^3} - \frac{\sum_{j=1}^{r^{(+)}} m_j^{(+)} \left(C_j^{(+)}\right)^2}{(1-X(\tau))^3} \quad (3.12)$$

questa relazione non è altro che l'equazione del moto per una particella (pistone) 1-dimensionale immersa in un potenziale $U(x)$ definito come segue

$$U(x) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{x^2} \sum_{i=1}^{r^{(-)}} m_i^{(-)} \left(C_i^{(-)}\right)^2 + \frac{1}{(1-x)^2} \sum_{j=1}^{r^{(+)}} m_j^{(+)} \left(C_j^{(+)}\right)^2 \right]. \quad (3.13)$$

La descrizione del moto del pistone attraverso un potenziale efficace, insieme al principio di conservazione dell'energia, per cui $\frac{1}{2}\dot{x}^2 + U(x) = U_0$, permette di notare come il moto sia di tipo oscillatorio nella buca descritta da $U(x)$. Il moto, essendo in funzione di τ risulta decritto, a mano a mano che la massa pistone cresce, in maniera efficace dal potenziale mediato per scale di tempo sempre più dilatate, dell'ordine $\mathcal{O}(\sqrt{M})$. I singoli urti delle particelle così, infittendosi, sono sempre meno determinanti per la dinamica del sistema.

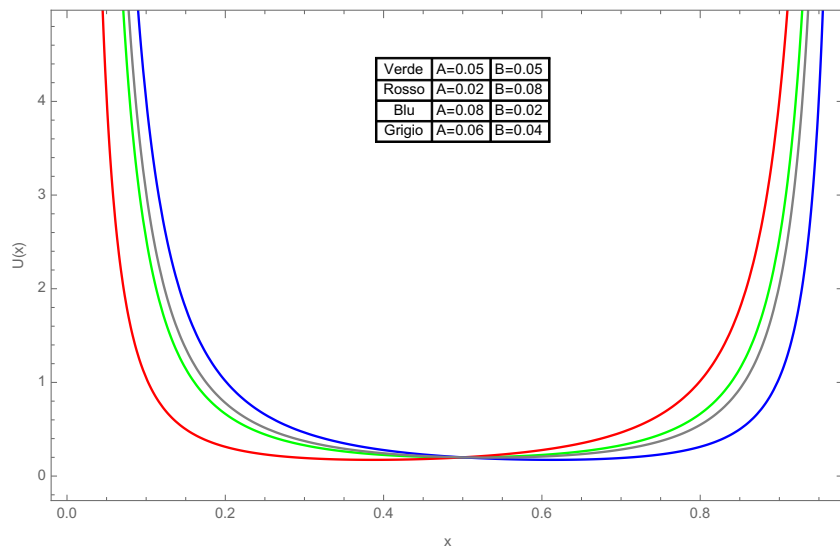


Figura 3.1: Potenziale mediato per diverse condizioni iniziali:

$$A = \sum_{i=1}^{r^{(-)}} m_i^{(-)} \left(C_i^{(-)}\right)^2 \text{ e } B = \sum_{j=1}^{r^{(+)}} m_j^{(+)} \left(C_j^{(+)}\right)^2$$

3.2 Modello idrodinamico

Il modello idrodinamico, cui si è già accennato di sopra, verrà ora descritto e analizzato attraverso delle simulazioni numeriche effettuate prendendo spunto, e rielaborando, il lavoro in [5], di Chernov e Lebowitz.

3.2.1 Descrizione del modello

Il sistema è composto da un volume $V_L = [0, L] \times [0, L] \times [0, L]$ con all'interno un gas formato da N particelle. Il volume è partizionato da un pistone adiabatico, posizionato all'istante $t = 0$ in $X = L/2$, che può muoversi liberamente a seguito degli urti elastici causati dalle particelle del volume di destra e di sinistra. La massa della "particella-pistone" è $M \sim L^2$, in particolare $M = bmL^2$, con m massa di un particella e b costante che si può prendere uguale a 1. La dinamica lungo le direzioni \hat{y} e \hat{z} non ha alcun ruolo nel moto del pistone e delle particelle. I gradi di libertà sufficienti per descrivere la dinamica del sistema saranno, quindi, $\{\{x(t)_i, v(t)_i\}_{i=1\dots N}, X(t), V(t)\}$.

La configurazione iniziale secondo cui sono distribuite le molecole del gas viene generata nel seguente modo.

In un dominio $D = [0, L] \times \mathbb{R}$, viene generato un certo numero di particelle $N_D = \#\{(x_i, v_i)_{i=1\dots N} \in D\}$, campionato da una poissoniana con varianza λ_D , definita come

$$\lambda_D := C \cdot L^2 \int_D \rho(v) dx dv \quad (3.14)$$

con, $\forall k \geq 0$

$$P(k = N_D) = \frac{\lambda_D^k}{k!} e^{-\lambda_D}. \quad (3.15)$$

Alla costante C verrà assegnato poi, in maniera del tutto convenzionale, un valore. Il numero totale di particelle campionate è N , suddivise in N_1 e N_2 particelle a sinistra e a destra, tali per cui $N = N_1 + N_2$. Fissato il numero di particelle si fissa anche l'energia cinetica del sistema $\mathcal{E} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m v_i^2$, che è l'unico integrale primo del sistema. Fondamentale è il ruolo della funzione $\rho(v)$, distribuzione nelle velocità delle particelle, che sarà uniforme troncata, scelta in modo da rispettare la seguente condizione

$$\rho(v) \equiv 0 \quad \text{con} \quad v_{min} \leq v \leq v_{max} \quad (3.16)$$

così poter identificare un certo intervallo temporale $[0, \tau_0] \in \mathcal{O}(L)$ entro il quale le particelle che collidono con il pistone dovranno invertire il loro verso di moto e urtare con le pareti del contenitore, prima di ricollidere con il pistone. L'intervallo così trovato viene detto intervallo di *0-ricollisioni*. Allo stesso modo sarà possibile determinare un intervallo di *1-ricollisione*, e così via. Si considera inoltre una funzione $\rho(v)$ simmetrica nelle velocità, tale che $\rho(v) = \rho(-v)$. La distribuzione nelle posizioni viene presa uniforme nell'intervallo $[0, L]$. Il moto delle particelle e del pistone è ben descritto dal sistema 3.1, con il parametro ε che qui è della forma:

$$\varepsilon = \frac{2m}{m+M} = \frac{2}{L^2 + 1}.$$

Nella trattazione che verrà svolta di seguito si considerano le variabili riscalate

$$\begin{cases} X_L(\tau) := \frac{X(\tau L)}{L} \\ W_L(\tau) := \frac{dX_L}{d\tau} \end{cases} \quad (3.17)$$

gli intervalli di ricollisione sopra definiti, in funzione di queste nuove variabili, saranno $[0, \tau_0] \in \mathcal{O}(1)$; è possibile verificare, si veda [6], che, nel limite $L \rightarrow \infty$, la funzione $X_L(\tau)$, come $W_L(\tau)$ converge in

probabilità¹ ad una certa funzione \overline{X}_L , rispettivamente $\overline{W}_L(\tau)$, $\forall \tau \in [0, \tau_0]$, con \overline{W}_L che soddisfa una certa equazione della forma $\overline{W}_L = d\overline{X}_L/d\tau$. Nel caso in cui la $\rho(v)$ sia pari nelle velocità allora è immediato trovare che $\overline{X}_L \equiv 1/2$ e $\overline{W}_L \equiv 0$. Lo scopo dell'investigazione numerica è, tuttavia, differente: si vuole comprendere, infatti, in un intervallo successivo a quello di 0-ricollisioni, qual è il comportamento del pistone. Il risultato sarà del tutto non banale.

3.2.2 Preparazione delle simulazioni

I codici, di cui quello utilizzato per simulare il moto del pistone e delle particelle è riportato in appendice, sono scritti in linguaggio C++. Il funzionamento del codice che ha permesso di simulare il moto delle particelle del gas e della particella-pistone, descritto nel flow chart 3.2, è il seguente: tutte le particelle venivano fatte avanzare fino a che non veniva registrato un evento di collisione, con il pistone o con le pareti. Essendo, chiaramente, i passi compiuti dalla particella resi discreti, e potendo esserci in un passo più particelle che urtano, veniva registrato il tempo di urto esatto più breve. Questa procedura veniva effettuata cercando l'intersezione, data la velocità e la posizione della particella (e per il pistone nel caso di collisione con esso) nell'istante prima dell'urto, tra particella e bordo ($x = 0$ e $x = L$) o tra le traiettorie della particella e del pistone. Trovato il tempo di collisione più breve t^* e etichettata la particella che impiega il minor tempo ad urtare con l'indice i^* , tutte le particelle indicizzate da $i \neq i^*$ venivano fatte avanzare di t^* . La i^* particella oltre che avanzare veniva anche soggetta all'inversione del verso del suo moto, nel caso in cui urti con il bordo della scatola, o alle equazioni del moto 3.1, nel caso in cui l'urto avvenisse con il pistone.

In tutte le simulazioni eseguite si è considerata la costruzione del modello precedentemente presentata, sono stati modificati, di volta in volta, parametri cruciali per permettere l'ottimizzazione delle diverse "run" del codice, problema rivelatosi non banale.

In particolare la $\rho(v)$ considerata è:

$$\rho(v) = \begin{cases} 1 & 1/2 \leq |v| \leq 1 \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (3.18)$$

Il limite che si è analizzato, quindi, è tale per cui, fissata m , massa di una singola particella, si ha μ , massa del gas tale che $\mu \sim L^3$, e M , massa del pistone, invece, è tale che $M \sim L^2$. Si è notato che una condizione fondamentale per ottenere il processo di "build-up" è $\mu \gg M$, non mantenendola verificata, infatti non si osservano i risultati sperati riguardo l'oscillazione macroscopica. Nella tabella 3.1 sono riportati i parametri utilizzati per le diverse simulazioni.

| N_{run}^2 | L | b | M | μ | λ_D |
|--------------------|-----|---|-------|-------|-------------|
| 1 | 30 | 1 | 900 | 2663 | $L^3/10$ |
| 2 | 50 | 1 | 2500 | 12422 | $L^3/10$ |
| 3 | 80 | 1 | 6400 | 51044 | $L^3/10$ |
| 4 | 100 | 1 | 10000 | 99782 | $L^3/10$ |

Tabella 3.1: Parametri delle simulazioni eseguite.

¹Una successione di variabili casuali $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ converge in probabilità alla variabile X ($X_n \xrightarrow{P} X$) se $\forall \varepsilon > 0 \lim_{n \rightarrow \infty} P(|X_n - X| > \varepsilon) = 0$.

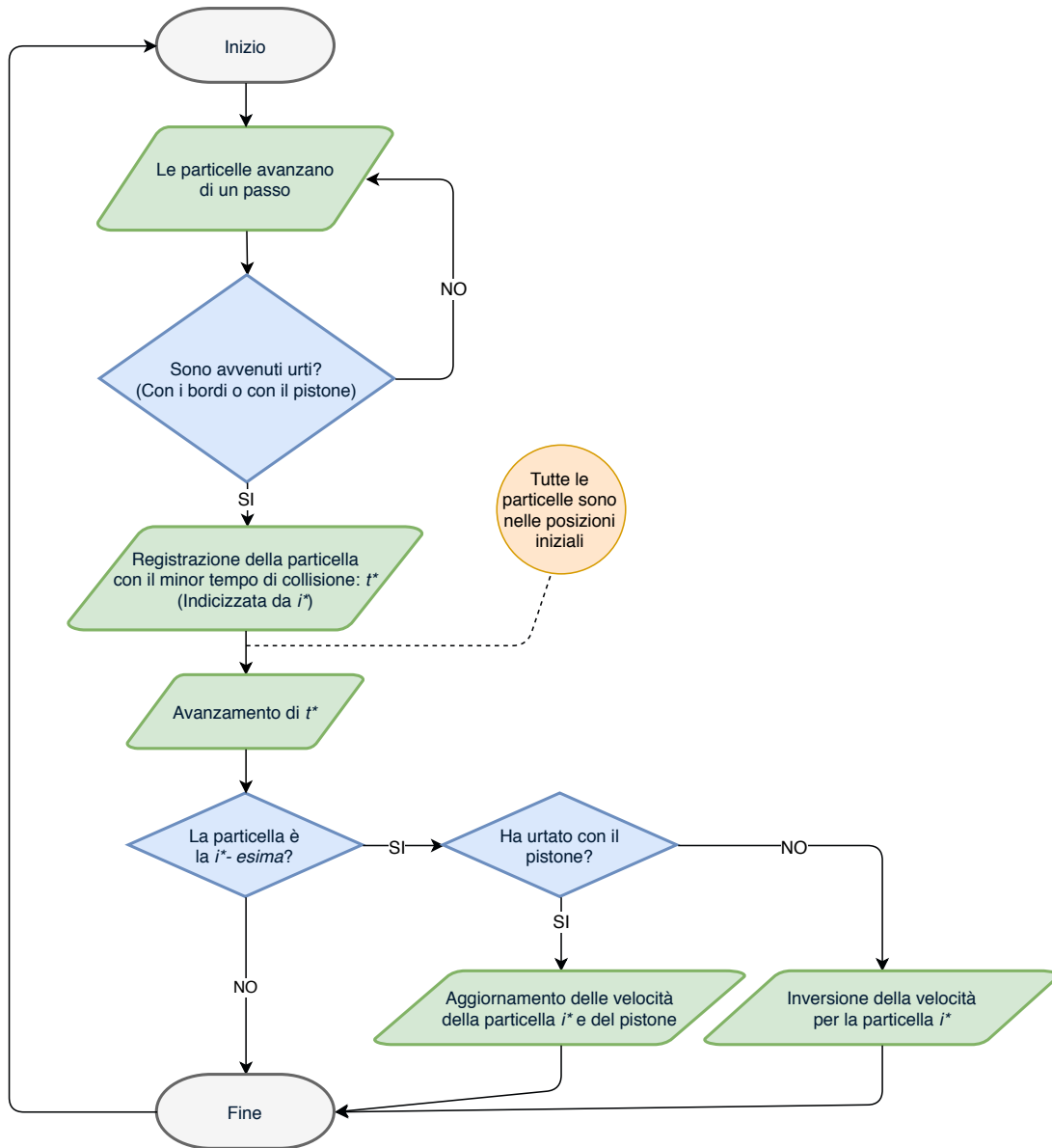


Figura 3.2: Flow chart del codice utilizzato per simulare gli urti delle particelle.

3.2.3 Risultati numerici

Saranno qui analizzati i risultati numerici ottenuti traendo spunto da [5]. Tutti i dati e le figure analizzati sono stati riprodotti e rielaborati attraverso il codice scritto in appendice. L'analisi di Chernov e Lebowitz è stata utilizzata come importante linea guida per poter valutare l'attendibilità del lavoro di analisi effettuato. Una tipica traiettoria del pistone, della simulazione 1 in tabella 3.1, è riportata in figura 3.3, in ordinata la variabile è $X_L(\tau) \in [0, 1]$, in ascissa τ . È presente inoltre un grafico della velocità del pistone, sempre relativa alla stessa simulazione, le variabili, rispettivamente in ordinata e ascissa, sono $V(\tau)$ e τ .

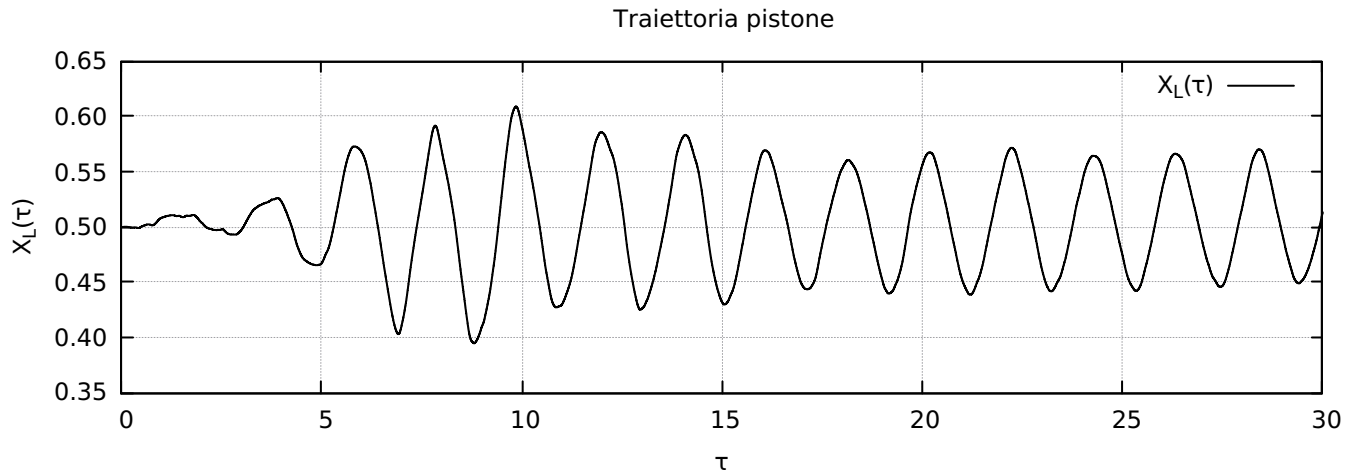


Figura 3.3: Traiettorie caratteristiche del pistone, dalla simulazione 1.

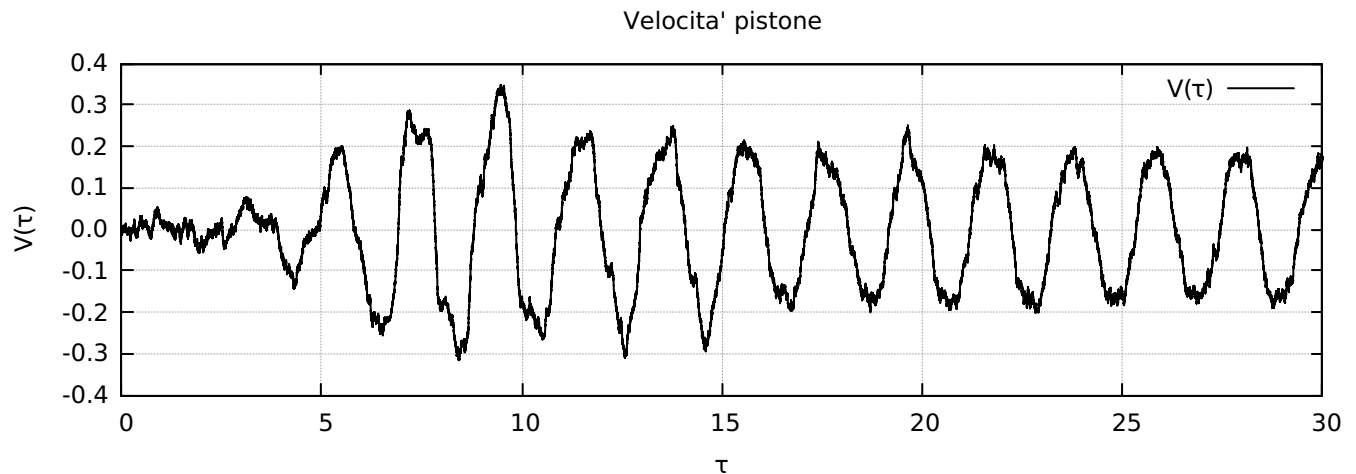


Figura 3.4: Velocità del pistone $V(\tau)$, dalla simulazione 1.

Si nota dalle figure qui di sopra che la dinamica del pistone si svolge nel seguente modo: inizialmente il pistone si muove intorno alla posizione di equilibrio $\bar{X}_L \equiv 1/2$ ed è soggetto solamente a fluttuazioni casuali, a $\tau \simeq 3$ le fluttuazioni cominciano ad essere visibili ma ancora casuali, quindi, da $\tau \simeq 6$ esse cominciano a divenire macroscopiche e si supera, qui, con l'instaurarsi del moto macroscopico l'intervallo di "0-ricollisions", citato precedentemente. Quindi, dopo aver compiuto l'oscillazione macroscopica con ampiezza massima ($\tau \simeq 9$), la traiettoria decade, modulata da un esponenziale. La velocità del pistone, chiaramente, segue un andamento simile a quello della posizione. L'insorgere dell'oscillazione macroscopica può essere spiegato in modo intuitivo attraverso la visione dei diagrammi in fase delle particelle, allo scorrere del tempo (figura 3.5). Si vede come, parallelamente al moto macroscopico del pistone, si ha la generazione di "cluster" di particelle, che si rompono, poi, mano a mano che ci si dirige verso la termalizzazione. Un altro punto cruciale dell'analisi del problema, appunto, consiste nell'approccio delle particelle del gas ad una distribuzione maxwelliana. Si può osservare qualitativamente il fenomeno, come detto, attraverso l'analisi dei diagrammi di fase del gas; è stato compiuto inoltre il test statistico a due campioni di Kolmogorov-Smirnov (cfr. [8]), si è costruita la distribuzione cumulativa, nelle velocità, del gas, a diversi istanti e si è notato come questa vada ad adagiarsi appunto sulla distribuzione cumulativa di

una maxwelliana, trovata attraverso la generazione di un campione termalizzato effettuata con il metodo di Box-Miller (descritto in 3.3.2).

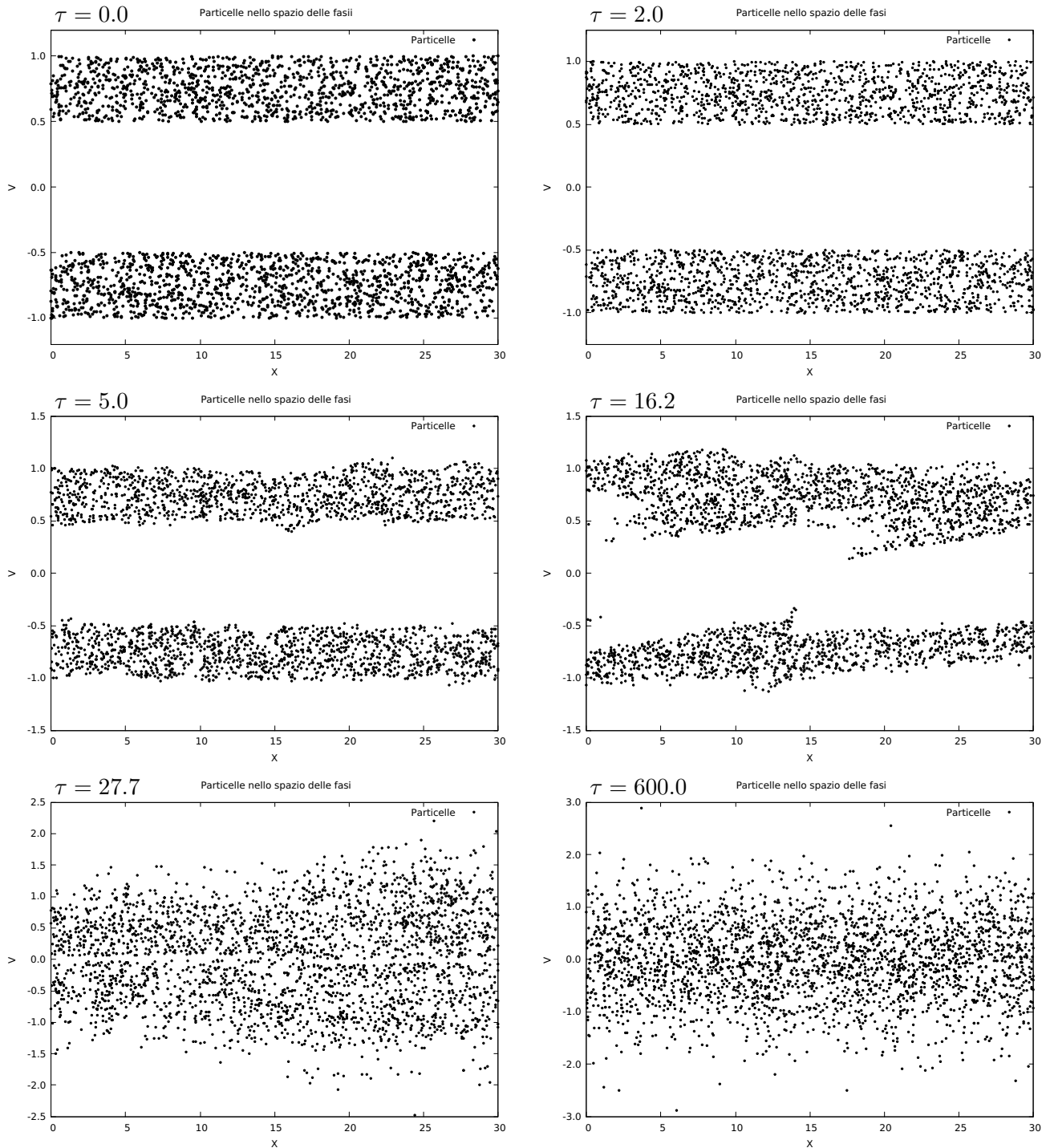


Figura 3.5: Plot delle particelle nello spazio delle fasi, i parametri sono quelli della prima run in Tabella 3.1.

Il meccanismo di “build-up” si accompagna alla formazione dei “cluster” che si possono notare nel quinto ritratto in fase. Si può, in maniera iper-semplificata ma efficace, attraverso un’analisi della dinamica delle particelle, comprendere come si possa giungere alla formazione di questi. Inizialmente la distribuzione delle particelle è pressoché uniforme nel dominio $[0, L] \times [-1, -1/2] \cup [1/2, 1]$, quando le fluttuazioni sono

casuali le particelle acquisiscono velocità dell'ordine $\mathcal{O}(1/L)$. Le fluttuazioni di velocità del pistone, infatti, si trasferiscono sulla velocità delle particelle, la distribuzione, come si vede nella seconda e terza immagine, si deforma intorno ai bordi. L'effetto di deformazione è cruciale per la dinamica del pistone, infatti, quando $W_L(\tau)$ è positiva le particelle nel volume a destra vengono accelerate, quelle nel volume a sinistra, invece sono rallentate. La correlazione tra le velocità delle particelle, che dipendono dalla velocità del pistone, è la chiave del moto macroscopico, le particelle sono fortemente correlate e il meccanismo si ripete facendo aumentare di un fattore costante la velocità del pistone, per ogni intervallo di tempo unitario, fino ad avere un'oscillazione massima e, quindi, la rottura dei "cluster" che si traduce una modulazione della traiettoria del pistone con un esponenziale e nella termalizzazione, quinta e sesta immagine della figura 3.5.

L'analisi della termalizzazione sulla simulazione 1, come precedentemente anticipato, si è svolta attraverso il test di Kolmogorov-Smirnov. Il metodo consiste nel confronto della funzione cumulativa dei dati di un certo campione $\{x_1, \dots, x_n\}$ con una distribuzione teorica o, come nel caso qui trattato, con un campione di riferimento, allo scopo di verificare una certa ipotesi nulla sulla prima distribuzione, H_0 . La frequenza cumulativa del campione in analisi viene indicata con $F_n(x_i)$ mentre la seconda distribuzione cumulativa, ottenuta derivando la funzione di partizione per un campione giunto a termalizzazione, generato con il metodo di Box-Miller, viene indicata con $\Phi_m(x_i)$. L'obiettivo è quello di ottenere lo scarto massimo tra le due frequenze definito come:

$$D_{n,m} := \max_{x_i} |F_n(x_i) - \Phi_m(x_i)|. \quad (3.19)$$

con n, m grandezze dei campioni. È possibile verificare (cfr. [9]) che l'ipotesi nulla viene rigettata, ad un certo livello di confidenza α , se vale

$$D_{n,m} > c(\alpha) \sqrt{\frac{n+m}{nm}} = \Delta_\alpha \quad (3.20)$$

Si ottiene dai dati più vicini alla termalizzazione $D_{n,m} = 0.0905$ e $\Delta_{90\%} = 0.1913$, risulta possibile, quindi, confermare l'ipotesi nulla, di approccio ad una distribuzione maxwelliana con $\sigma = 0.277$, con un grado di confidenza del 90%.

L'approccio alla distribuzione cumulativa maxwelliana si nota qualitativamente nell'immagine 3.6, nella quale si sono graficate le funzioni cumulative delle particelle discretizzate a diversi istanti, $F_n(x_i) = \#\{i \mid x_i < x\}$. Le ascisse sono espresse in unità arbitrarie con $x_i = \frac{i}{100} \cdot (v_{\max} - v_{\min})$.

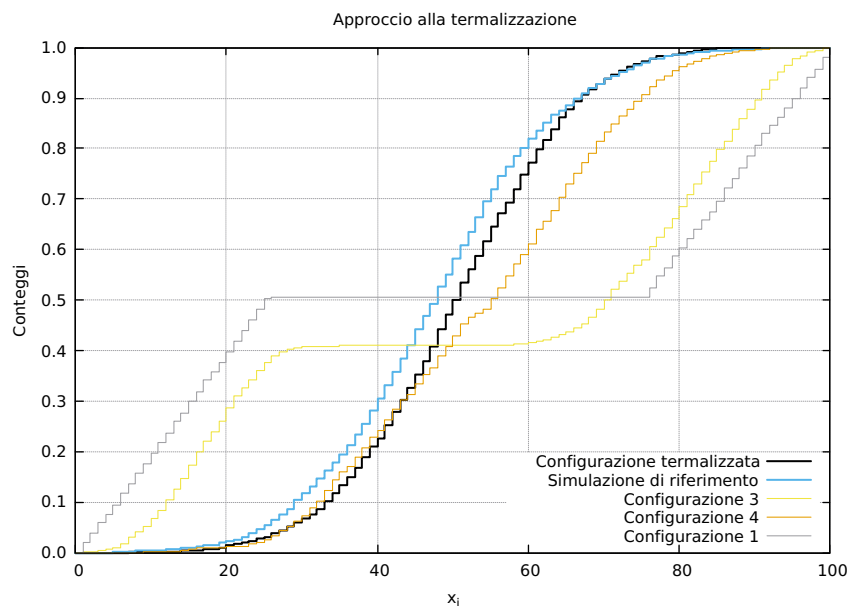


Figura 3.6: Approccio alla distribuzione maxwelliana, simulazione 1.

In seguito alla rottura dei cluster la traiettoria del pistone è soggetta ad una modulazione che porta ad una diminuzione dell'ampiezza dell'oscillazione, fino al raggiungimento della traiettoria di equilibrio $\bar{X}_L \equiv 1/2$. Per verificare tale ipotesi sono stati interpolati con una retta della forma $y = m \cdot x + q$, i punti di massimo, di cui è stato fatto il logaritmo, raggiunti dalle traiettorie del pistone per la run 1, per $\tau \in [15, 170]$. A tal proposito è possibile notare come il coefficiente angolare della retta sia chiaramente legato con la costante di decadimento esponenziale della traiettoria. Eseguendo l'interpolazione per diversi L sarebbe possibile, come si trova in letteratura, individuare una dipendenza sistematica tra m , quindi $\lambda = 1/\tau$, e L ($\lambda \sim L^{-1/3}$ in [5]). I campioni generati dalle simulazioni eseguite, tuttavia, non dispongono di statistica sufficiente per l'esecuzione della procedura. È stata inoltre calcolata, per ogni "traiettoria delle velocità" la velocità massima raggiunta dal pistone, V^{\max} , e l'ampiezza massima di oscillazione riscalata X_L^{\max} , entrambe con il relativo istante in cui vengono raggiunte. In accordo con quanto trovato da Chernov e Lebowitz esse sono indipendenti da L . In 3.7 sono riportati i risultati.

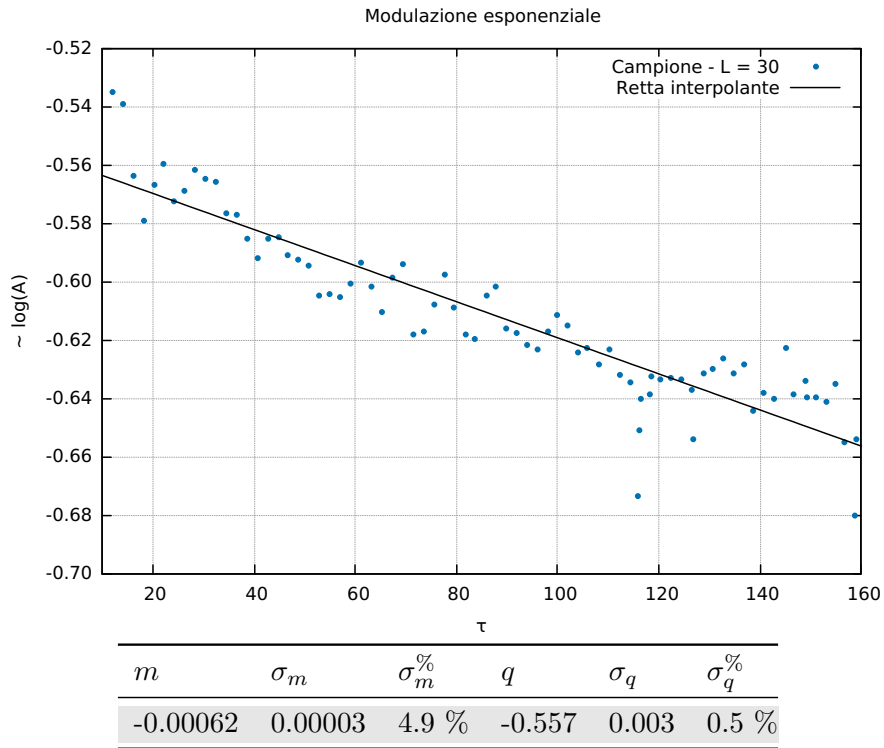


Figura 3.7: Decadimento esponenziale con retta interpolante per la run 1.

| N_{run}^o | L | τ_X^{\max} | X_L^{\max} | τ_V^{\max} | V^{\max} |
|--------------------|-----|-----------------|--------------|-----------------|------------|
| 1 | 30 | 9.86 | 0.11 | 9.48 | 0.35 |
| 2 | 50 | 9.67 | 0.12 | 7.27 | 0.39 |
| 3 | 80 | 8.27 | 0.12 | 8.01 | 0.46 |
| 4 | 100 | 7.68 | 0.12 | 11.07 | 0.39 |

Tabella 3.2: Parametri delle simulazioni eseguite.

3.3 Una configurazione fisica particolare

In questo paragrafo si discuterà, prima attraverso un'analisi di tipo termodinamico, effettuata da Gruber in [10], e poi attraverso delle simulazioni numeriche eseguite autonomamente, una particolare situazione fisica del problema: il sistema è composto da due gas, alle temperature T_1 e T_2 , internamente in equilibrio, che occupano i due volumi separati dal setto. Il sistema globale non è in equilibrio termodinamico. La prima trattazione porterà a notare come il vincolo di adiabaticità non permette di ottenere delle condizioni necessarie e sufficienti sui parametri di stato, in accordo con quanto già detto, e non porta alla determinazione di una condizione di equilibrio sulle temperature. Tuttavia, attraverso l'analisi con la termodinamica fuori dall'equilibrio, si riesce ad arrivare ad un sistema di equazioni differenziali ordinarie (3.27) che porta alla determinazione univoca dello stato di equilibrio. Lo scopo della seconda trattazione è quello di visualizzare sia il comportamento del pistone che quello delle particelle del gas nella fase di transiente verso la termalizzazione.

3.3.1 Approccio con la termodinamica del non equilibrio

Si considera un sistema equivalente a quello descritto in 1.2. Si hanno qui due volumi cilindrici, riempiti con due gas a due differenti temperature, nei quali una delle basi viene sostituita da un pistone mobile in grado di muoversi senza attrito, i due pistoni sono mantenuti insieme da un'asta di massa M . Una rappresentazione del sistema si ha in figura 3.8.

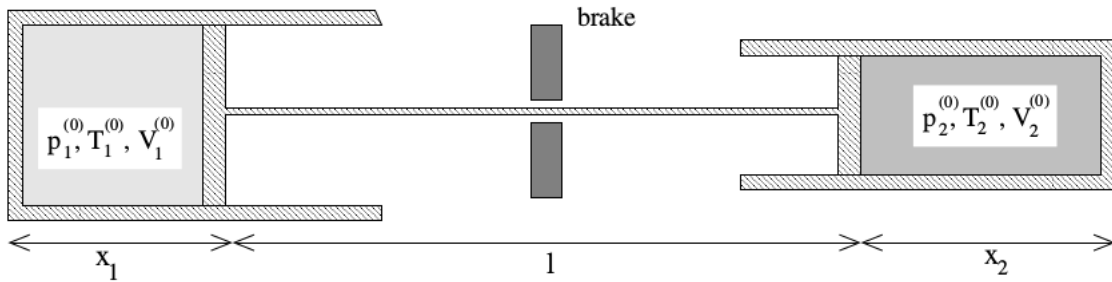


Figura 3.8: Sistema analizzato in [10].

Si suppone di poter determinare univocamente lo stato del sistema attraverso il set di variabili (S_1, S_2, x, v) , composto dalle entropie dei due volumi e dalla posizione e dalla velocità del pistone del volume 1. È noto che per ogni sistema isolato esiste una funzione di stato energia, estensiva e conservata. Quindi è lecito scrivere:

$$\mathcal{E}(S_1, S_2, x, v) = \mathcal{E}_1(S_1, x, v) + \mathcal{E}_2(S_2, D - l - x, -v) + \frac{1}{2}Mv^2. \quad (3.21)$$

Derivando l'espressione qui di sopra si ottiene²

$$\frac{dE}{dt} = T_1 \frac{dS_1}{dt} + T_2 \frac{dS_2}{dt} - (F_1^{int} - F_2^{int})\dot{x} + Mv\dot{v} = 0 \quad (3.22)$$

con $\hat{M} = M + \mu_1 + \mu_2$ ($\mu_{1,2}$ sono le masse dei gas) e $F_i^{int}(S_i, x_i, v_i) = P_i A_i$ con $i = 1, 2$ (A_i è la superficie del pistone di sinistra o destra, le superfici possono essere prese uguali senza perdere di generalità).

Utilizzando l'estensività dell'entropia e la 3.22 è possibile scrivere:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dS_1}{dt} + \frac{dS_2}{dt} = \left[T_1 \frac{dS_1}{dt} \right] \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) + \left[\frac{1}{T_2} (F_1^{int} - F_2^{int} - \hat{M}\dot{v}) \right] v. \quad (3.23)$$

²Si utilizza la definizione di forza generalizzata $F_i := \frac{\partial U_i}{\partial x}$.

Il sistema è isolato, quindi \dot{S} è non negativa, inoltre i singoli sottosistemi sono in equilibrio interno ma il sistema globale è lontano dall'equilibrio. Dall'equazione qui scritta si nota che la produzione di entropia è della forma $P = \sum_i J_i \cdot X_i$. Espandendo in serie, quindi, si possono riscrivere i flussi generalizzati J_i attraverso i coefficienti fenomenologici di Onsager \mathcal{L}_{ij} .

$$J_i(X_1, \dots, X_N) = \sum_{j=1}^N \left. \frac{\partial J_i}{\partial X_j} \right|_{eq.} X_j = \sum_{j=1}^N \mathcal{L}_{ij} X_j$$

in particolare nel caso trattato si ottiene

$$\begin{cases} \frac{1}{T_2} \left(F_1^{int} - F_2^{int} - \hat{M}\dot{v} \right) & = \mathcal{L}_{11}v + \mathcal{L}_{12} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \\ T_1 \frac{dS_1}{dt} & = \mathcal{L}_{21}v + \mathcal{L}_{22} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \end{cases} \quad (3.24)$$

con i coefficienti, essendo la produzione di entropia semi-definita positiva, che soddisfano le condizioni

$$\mathcal{L}_{11} \geq 0 \wedge \mathcal{L}_{22} \geq 0 \wedge 4\mathcal{L}_{11}\mathcal{L}_{22} - (\mathcal{L}_{12} + \mathcal{L}_{21})^2 \geq 0.$$

Si nota quindi che, essendo $V_{1,2}$ isolati, si deve avere $\frac{dS_1}{dt} \geq 0$ e $\frac{dS_2}{dt} \geq 0$, quindi da 3.24 e dalle condizioni sui coefficienti si deriva

$$\mathcal{L}_{22} = 0 \wedge \mathcal{L}_{21} = -\mathcal{L}_{12} = \lambda_1 v \text{ con } \lambda_1 \geq 0$$

quindi

$$\begin{cases} \hat{M} \frac{dv}{dt} = F_1^{int} - F_2^{int} - \left[T_2 \mathcal{L}_{11} - \lambda_1 \left(\frac{T_2}{T_1} - 1 \right) \right] v \\ T_1 \frac{dS_1}{dt} = \lambda_1 v^2. \end{cases} \quad (3.25)$$

Allo stesso modo da 3.23, si trova, alla luce delle considerazioni fatte:

$$T_2 \frac{dS_2}{dt} = \left(F_1^{int} - F_2^{int} - \hat{M}\dot{v} \right) v - T_1 \frac{dS_1}{dt} = T_2 \left(\mathcal{L}_{11} - \frac{\lambda_1}{T_1} \right) v^2$$

dato che $\frac{dS_2}{dt} \geq 0$ si ottiene³

$$\mathcal{L}_{11} - \frac{\lambda_1}{T_1} = \frac{\lambda_2}{T_2} \geq 0 \quad (3.26)$$

Le equazioni del moto per il problema del pistone adiabatico sono quindi

$$\boxed{\begin{cases} \hat{M} \frac{dv}{dt} = F_1^{int} - F_2^{int} - (\lambda_1 + \lambda_2)v & M \geq 0 \\ \frac{dS_1}{dt} = \frac{\lambda_1}{T_1} v^2 & \lambda_1 \geq 0 \\ \frac{dS_2}{dt} = \frac{\lambda_2}{T_2} v^2 & \lambda_2 \geq 0 \end{cases}} \quad (3.27)$$

con la produzione di entropia della forma

$$\boxed{\frac{dS}{dt} = \left(\frac{\lambda_1}{T_1} + \frac{\lambda_2}{T_2} \right) v^2.} \quad (3.28)$$

Gli stati di equilibrio soddisfano le seguenti condizioni:

$$\boxed{\begin{cases} v = 0 \\ P_1 A_1 = P_2 A_2 \\ \mathcal{E}_1(S_1, x_1) + \mathcal{E}_2(S_2, x_2) = \bar{\mathcal{E}}. \end{cases}} \quad (3.29)$$

Non si può dedurre da questa trattazione *nessuna* condizione sulla temperatura di equilibrio.

³Si può verificare che λ_1 è indipendente da S_2 e che λ_2 è indipendente da S_1 , in [10].

3.3.2 Generazione di una distribuzione gaussiana

Per la modellizzazione del limite fisico si è utilizzato lo stesso codice usato per le collisioni del limite idrodinamico. La generazione delle particelle è stata qui però svolta in maniera differente, in accordo con lo scopo dell'analisi. Si sono generate N particelle a partire da un processo di Poisson con media $\lambda_D = L^3/10$, la posizione delle particelle segue ancora una distribuzione uniforme nell'intervallo $[0, L]$. La distribuzione delle velocità, invece, è stata modificata: si è seguito il metodo di Box-Muller (cfr. [7]), di seguito illustrato, che permette di generare variabili (le velocità delle particelle) che seguono una distribuzione gaussiana a partire da variabili campionate da una distribuzione uniforme.

Si definiscono le variabili:

$$\begin{cases} z_1 = \cos(2\pi x_2)\sqrt{-2 \log x_1} \\ z_2 = \sin(2\pi x_2)\sqrt{-2 \log x_1}. \end{cases}$$

Se le variabili x_1, x_2 sono, appunto, generate da una distribuzione uniforme z_1 e z_2 campiono una distribuzione gaussiana normalizzata ($\langle z \rangle = 0, \sigma = 1$). Si può notare innanzitutto come il dominio di z_1, z_2 sia compatibile con una gaussiana, infatti se $x_1, x_2 \in [0, 1] \implies z_1, z_2 \in] - \infty, \infty[$.

Secondo il teorema di Liouville si preserva la probabilità sotto cambi di coordinate, quindi

$$p(z_1, z_2)dz_1dz_2 = p(x_1, x_2)dx_1dx_2 = dx_1dx_2$$

con

$$p(z_1, z_2) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial z_1} & \frac{\partial x_1}{\partial z_2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial z_1} & \frac{\partial x_2}{\partial z_2} \end{vmatrix}.$$

Notando che

$$z_1^2 + z_2^2 = (-2 \log x_1) \underbrace{(\cos^2(2\pi x_2) + \sin^2(2\pi x_2))}_{=1} = -2 \log x_1 \quad \text{e} \quad \frac{z_2}{z_1} = \tan(2\pi x_2)$$

si trovano x_1, x_2 in funzione di z_1, z_2

$$\begin{cases} x_1 = \exp\left(\frac{z_1^2 + z_2^2}{2}\right) \\ x_2 = \frac{1}{2\pi} \arctan\left(\frac{z_2}{z_1}\right) \end{cases}$$

Calcolando esplicitamente il determinante dello jacobiano si ottiene:

$$p(z_1, z_2) = \frac{x_1}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \exp\left(\frac{z_1^2 + z_2^2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{z_1^2}{2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{z_2^2}{2}\right).$$

Dall'ultima espressione è evidente che le variabili x_1, x_2 campiono separatamente una gaussiana normalizzata. E' possibile generalizzare la distribuzione normalizzata eseguendo un cambio di variabile della forma: $\tilde{z} = \mu + z\sigma$, con μ media della gaussiana e σ varianza. Questo cambio di coordinate, nel caso preso in esame, permette di avere come vite di regolazione per il problema le temperature T_1 e T_2 , per le due partizioni del volume.

3.3.3 Risultati numerici

I risultati discussi di seguito sono relativi a delle simulazioni effettuate utilizzando il codice scritto analizzando il lavoro di Chernov e Lebowitz, l'indagine della configurazione è stata tuttavia effettuata autonomamente, con lo scopo di osservare il comportamento del pistone e del gas in una situazione che

può essere confrontata con l'esperimento, in cui le molecole sono termalizzate e non generate con una distribuzione, mirata a produrre oscillazioni, come fatto precedentemente. Attraverso il metodo di sopra discusso si sono generate, nelle due partizioni del volume, particelle del gas a temperature diverse. Si è posta come lunghezza del recipiente $L = 30$, le condizioni iniziali del pistone sono $X(0) = 20$ e $V(0) = 0$, si è analizzato, in maniera qualitativa, il moto del pistone e l'andamento verso la termalizzazione delle particelle.

Altri parametri cruciali per il moto sono $\mu = 2663$, massa totale del gas ($\mu \sim L^3$), e $M = 900$, massa del pistone ($M = L^2$). Per quanto riguarda il controllo sulla temperatura è noto che, per un gas all'equilibrio, si ha la velocità distribuita secondo

$$f(v) = \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{1/2} e^{-\frac{mv^2}{2K_B T}}$$

posto $K_B = 1$ e $m = 1$ si ottiene una gaussiana con $\sigma = \sqrt{T}$, nei risultati presentati di seguito sono state poste $\sigma_1 = 1$ e $\sigma_2 = 1/100$, quindi $T_1 = 1$ e $T_2 = 0.0001$.

La traiettoria del pistone $X_L(\tau)$, la velocità $V(\tau)$ e i diagrammi in fase del gas sono in 3.9, 3.10 e 3.11.

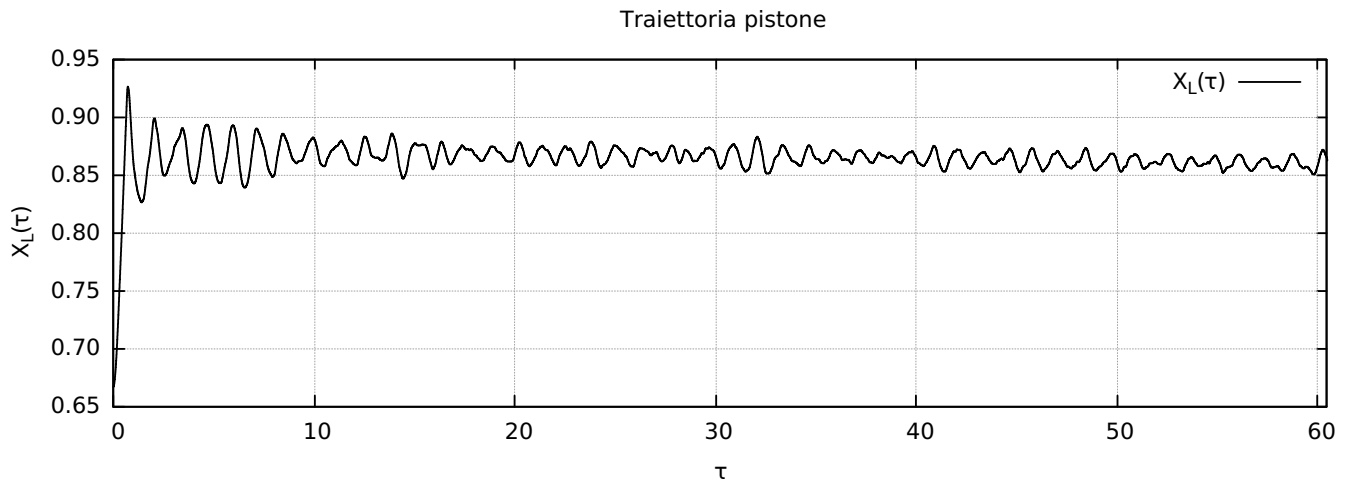


Figura 3.9: Traiettoria del pistone nella particolare situazione fisica.

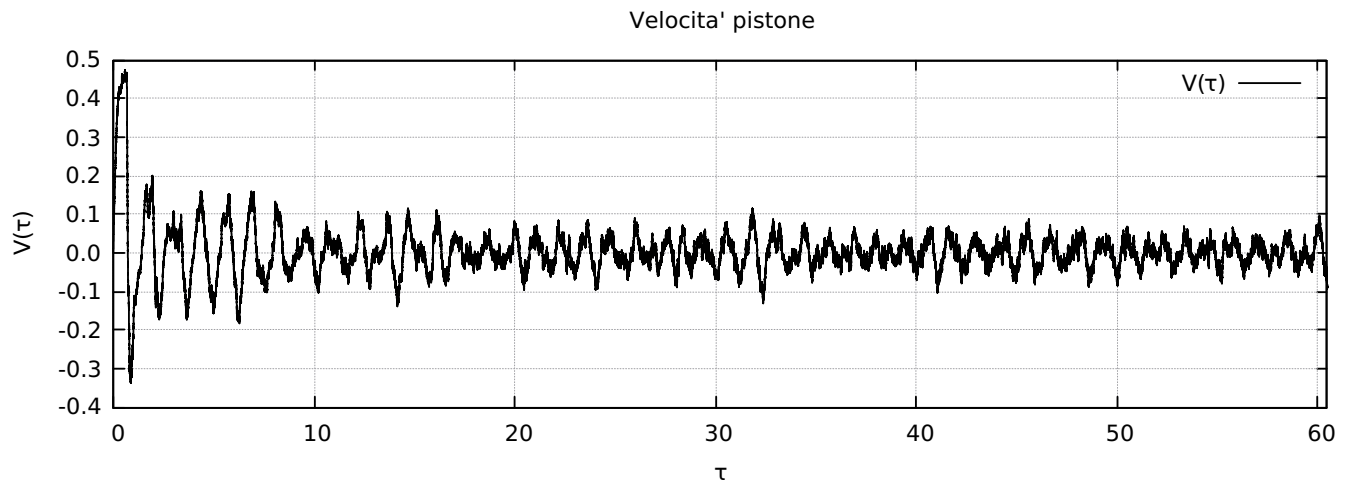


Figura 3.10: Velocità del pistone $V(\tau)$ nella particolare situazione fisica.

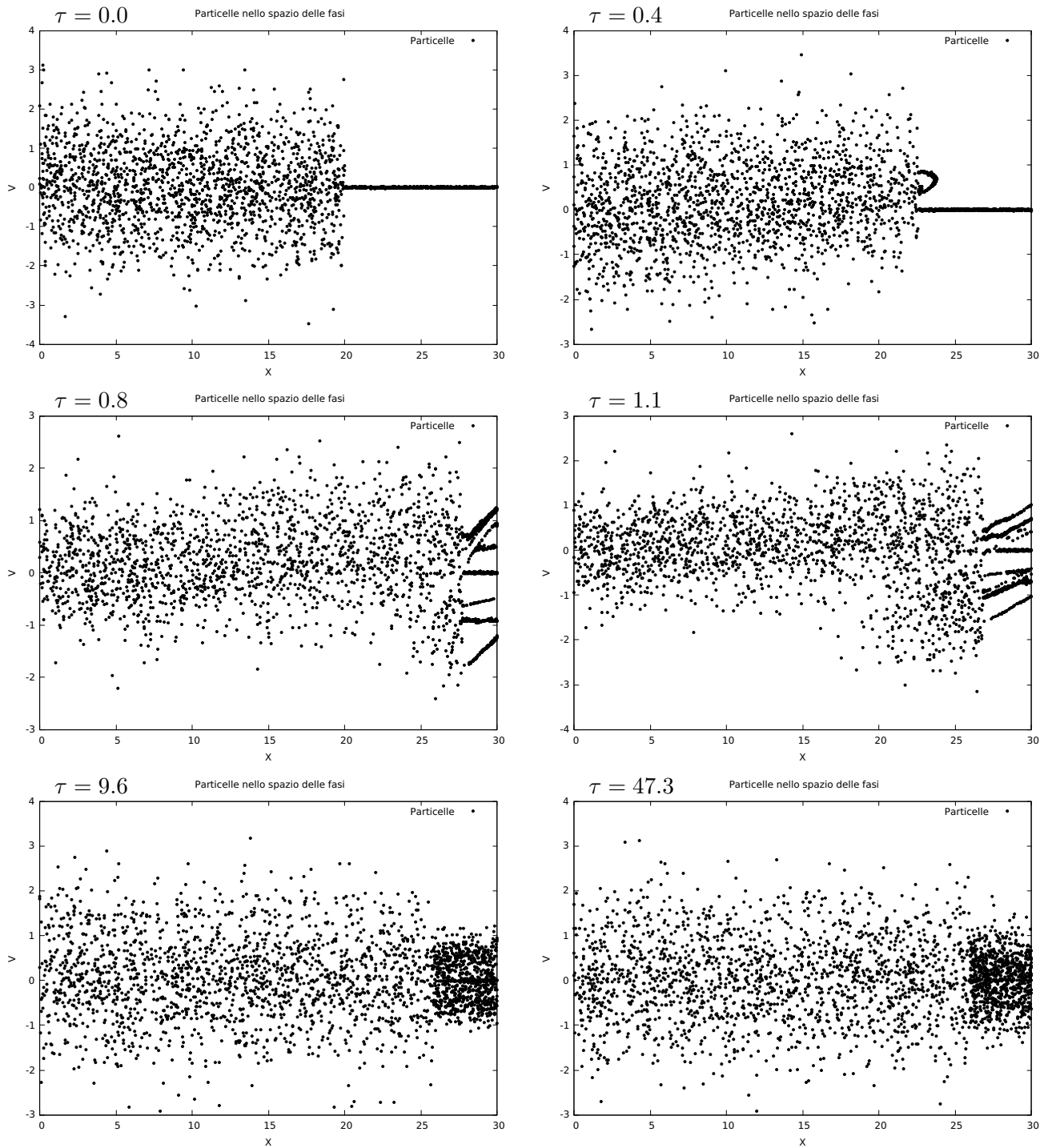


Figura 3.11: Plot delle particelle nello spazio delle fasi.

Dai ritratti in fase e dalle traiettorie si nota come il moto sia composto prevalentemente da due fasi distinte, una prima parte nella quale le particelle generate nella parte destra del volume, a temperatura più bassa, sono meno mobili di quelle della parte sinistra, che spingono sul pistone, il quale compie un'ampia oscillazione fino a “rompere” la distribuzione delle particelle contro cui “spinge”. Questa rottura porta poi ad una serie di oscillazioni periodiche di modesta ampiezza che vanno ad attenuarsi, a $\tau \simeq 10$, istante dopo il quale il moto del pistone appare dovuto principalmente a fluttuazioni e le particelle (immagini 5-6 della figura 3.11) cominciano a termalizzare e a distribuirsi alla temperatura di equilibrio.

Conclusioni

In questa tesi sono stati studiati i diversi aspetti del problema del pistone adiabatico. Inizialmente è stata fatta una fondamentale presentazione del sistema, dalla quale ne è immediatamente sorta la natura affatto banale. Si sono quindi trattati, attraverso lo studio di risultati noti, e con la rielaborazione di simulazioni numeriche i diversi aspetti dell'analisi necessaria per la comprensione della dinamica e della termodinamica del problema.

Si è effettuata, prendendo spunto dal lavoro di E. H. Lieb, un'analisi mediante la termodinamica dell'equilibrio, i cui strumenti si mostrano non sufficienti per la determinazione degli stati di equilibrio. Per avere un controllo matematico sul sistema è possibile agire attraverso una trattazione perturbativa, calcata in tesi da quella di Ya. G. Sinai, in questo limite il parametro di controllo fondamentale è $\varepsilon = m/M$. Si deduce come il moto del pistone, in funzione della variabile riscalata $\tau = t/\sqrt{M}$, nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$ possa essere descritto per scale di tempo dell'ordine $\mathcal{O}(\sqrt{M})$ attraverso l'azione di un potenziale efficace che entra nell'equazione del moto, caratteristica di un problema meccanico ad 1 grado di libertà.

Quindi è stato studiato il limite idrodinamico, per cui $m = \text{cost.}$, $\mu \sim L^3$, massa del gas, e $M \sim L^2$, massa del pistone, qui $L \rightarrow \infty$. Per una corretta comprensione del problema in questa situazione è necessario utilizzare delle simulazioni numeriche. Traendo spunto dai lavori di N. Chernov e J. L. Lebowitz, si sono rielaborati, attraverso un codice, i principali risultati riguardanti la dinamica del sistema: dallo studio dell'instaurarsi di un'oscillazione macroscopica per il pistone, parallelamente alla formazione di "cluster" di particelle, fino al transiente verso la termalizzazione. Su uno dei campioni generati dalle simulazioni è stato anche compiuto uno studio dell'approccio alla termalizzazione attraverso il test statistico a due campioni di Kolmogorov-Smirnov.

È stata riportata una trattazione, dovuta a C. Gruber, del problema, utilizzando la termodinamica fuori dall'equilibrio. Si è arrivati, ripercorrendo passo per passo, il lavoro alla derivazione di un sistema di equazioni differenziali del primo ordine e alla deduzione delle condizioni necessarie e sufficienti soddisfatte dagli stati di equilibrio. Attraverso una parziale rielaborazione del codice adoperato in precedenza si è, quindi, analizzato il comportamento del sistema in una configurazione particolare: partendo da due gas termalizzati a due temperature differenti, e dal pistone non posto alla metà del volume, si è simulata l'evoluzione sia delle particelle del gas nello spazio delle fasi che della traiettoria del pistone in funzione di $\tau = t/L$.

Appendice A

Codice - Collisioni

```
/*DINAMICA DEL PISTONE ADIABATICO*/

#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <vector>
#include <math.h>

using namespace::std;
using std::vector;
int main(){

#define b 1                                /*Densità del pistone*/

vector<long double> pos;
vector<long double> pos1;
vector<long double> vel;
long double pos_pist;
long double pos_pist1;
long double vel_pist;

long double aus = .0, aus2 = .0; /*Variabili ausiliarie per il caricamento*/
int i, j, k, n, m;                /*Contatori*/
int i_star;
int i_prec = -1;
int choice, choice_star;

long double L = 30.0;
long double eps = 2.0/(b*L*L+1.0); /*Massa ridotta*/

long double dt;                   /*Incremento temporale nel moto*/
long double t_end = 2;
long double t_coll;
long double t_star;               /*Tempo di collisione più breve*/
long double t_tot = .0;
long double t_prec_1 = .0, t_prec_2 = .0; /*Punti anomali*/
long double temp1, temp2, temp;   /*Variabili ausiliarie per l'urto*/

int n_urti = 3E+6;                /*Numero di urti*/

ifstream inputfile("conf_0.txt");
ofstream outputfile0("parametri.txt");
ofstream outputfile1("pos_pist.txt");
ofstream outputfile2("vel_pist.txt");
ofstream outputfile3("anomalie.txt");

ofstream output_part1("conf_1.txt");
ofstream output_part2("conf_2.txt");
ofstream output_part3("conf_3.txt");
```

```

/*INIZIALIZZAZIONE VARIABILI CONF. INIZIALE*/
while (inputfile >> aus >> aus2)
{
    pos.push_back(aus);
    pos1.push_back(0);
    vel.push_back(aus2);
}

/*CONFIGURAZIONE INIZIALE*/
outputfile0 << "M = " << b*L*L << "\n"
    << "m = " << pos.size() << std::endl;
pos_pist = L/2;
pos_pist1 = L/2;
vel_pist = 0;

/*CONTEGGIO DELL'URTO*/
for (k = 0; k < n_urti; k++){

    /*RICERCA DEL TEMPO PIU' BREVE*/

    i_prec = i_star;
    t_star = 100.0;
    j = 0;
    dt = 0.01;
    m = 0;

    t_prec_2 = t_tot - t_star;
    t_prec_1 = t_tot;

    /*TEMPO BREVE NORMALE*/
    while (dt*j < t_end) {
        pos_pist1 = pos_pist + vel_pist*j*dt;
        for (i = 0; i < pos.size(); i++){
            if (i != i_prec){
                pos1[i] = pos[i] + vel[i]*j*dt;
            }
            if ((pos1[i]-pos_pist1)/(pos[i]-pos_pist) < 0
                || pos1[i] > L || pos1[i] < 0){

                if (pos1[i] < 0) choice = 0;
                if (((pos1[i]-pos_pist1)/(pos[i]-pos_pist)) < 0) choice = 1;
                if (pos1[i] > L) choice = 2;

                if (choice == 0) { t_coll = -pos[i]/vel[i];}
                if (choice == 1)
                    { t_coll = (pos_pist-pos[i])/(vel[i]-vel_pist);}
                if (choice == 2) { t_coll = (L-pos[i])/vel[i];}

                if (t_coll < t_star){

                    choice_star = choice;
                    i_star = i;
                    t_star = t_coll;
                }
            }
        }
        j++;
    }

    /*MOTO PISTONE*/
    pos_pist += vel_pist*t_star;

    /*URTO*/
    for (n = 0; n < pos.size(); n++){
        if (n != i_star){
            pos[n] += vel[n]*t_star;
        }
    }
}

```

```

    }
    if (choice_star == 0 || choice_star == 2) {
    if (choice_star == 0) pos[i_star] = 0;
    if (choice_star == 2) pos[i_star] = L;
    vel[i_star] = -vel[i_star];
}

    if (choice_star == 1){
    pos[i_star] = pos_pist;

    temp1 = -(1-eps)*vel[i_star] + (2-eps)*vel_pist;
    temp2 = (1-eps)*vel_pist + eps*vel[i_star];

    vel[i_star] = temp1;
    vel_pist = temp2;
    }
    t_tot += t_star;

    /*Controllo tempi negativi*/
    for (long double check : pos ) {
    if (check < 0 || check > L) m += 1;
    }

    /*MOTO REGOLARE*/

    if (t_star >= 0 || m == 0)
    {
    /*Moto del pistone*/
    outputfile1 << t_tot*1.0L/L*1.0 << " " << pos_pist/L << std::endl;
    outputfile2 << t_tot*1.0L/L*1.0 << " " << vel_pist/*L*/ << std::endl;
    }
    /*Caricamento su file anomalie*/
    if (t_star < 0 || m != 0){

    std::cout << "-----ANOMALIA-----" << '\n';
    outputfile3 << "-----" << k << "-----" << std::endl;
    outputfile3 << "x_k = " << pos[i_star]/L << "x_{k-1} = "
    << (pos[i_star]-vel[i_star]*t_star)/L << std::endl;
    outputfile3 << "\n" << "choice ( 0 -> pist , 1 -> dx, 2 -> sx) = "
    << choice << std::endl;
    outputfile3 << "\n" << "t* = " << t_star
    << " " << "i* = " << i_star << std::endl;
    outputfile3 << "t_tot = " << t_tot/L*1.0 << std::endl;
    outputfile3 << "X = " << pos_pist/L << std::endl;
    outputfile3 << "V = " << vel_pist/*L*/ << std::endl;

    for (i = 0; i < pos.size(); i++){
    outputfile3 << "[" << i << "]" << pos[i]/L << " " << vel[i]/L << "\n";
    }
    }

    /*Punti nello spazio delle fasi*/

    if ( k == 2 ){
    for (i = 0; i < pos.size(); i++){output_part1
    << pos[i] << " " << vel[i] << std::endl;}
    }
    if ( k == 15000 ){
    for (i = 0; i < pos.size(); i++){output_part2
    << pos[i] << " " << vel[i] << std::endl;}
    }
    if ( k == 2.8E6 ){
    for (i = 0; i < pos.size(); i++){output_part3
    << pos[i] << " " << vel[i] << std::endl;}
    }
    }
    return 0;
}

```


Bibliografia

- [1] LIEB, E. H. *Some problems in statistical mechanics that I would like to see solved*. Physica A (1999) **263** 491-499.
- [2] GUGGENHEIM, M. *Thermodynamics - An Advanced Treatment for Chemists and Physicists*. North Holland (1986) 7-8.
- [3] CALLEN, H. B. *Thermodynamics*. John Wiley and sons, New York (1963) Appendix C.
- [4] SINAI, Ya. G. *Dynamics of a heavy particle surrounded by a finite number of light particles*. Theoretical and Mathematical Physics (1999) **121** N. 1.
- [5] CHERNOV, N. LEBOWITZ, J. L. *Dynamics of a Massive Piston in an Ideal Gas: Oscillatory Motion and Approach to Equilibrium*. Journal of Statistical Physics (2003) **109**.
- [6] CHERNOV, N. LEBOWITZ, J. L. SINAI, Ya. G. *Scaling Dynamics of a Massive Piston in a Cube Filled with Ideal Gas: Exact Results*. Journal of Statistical Physics (2002) **109**.
- [7] BOX, G.E.P. MULLER, M.E. *A Note on the Generation of Random Normal Deviates*. The Annals of Mathematical Statistics (1958) **29** N. 2 610-611.
- [8] LORETI, M. *Teoria degli errori e fondamenti di statistica (introduzione alla fisica sperimentale)*. GNU-General Public Licence (2006) 225-226.
- [9] https://www.webdepot.umontreal.ca/Usagers/angers/MonDepotPublic/STT3500H10/Critical_KS.pdf.
- [10] GRUBER, C. *Thermodynamics of systems with internal adiabatic constraints: time evolution of the adiabatic piston*. European journal of physics (1999).