2

Ci proponiamo di capire i lavori recenti nel campo della Termodinamica delle deformazioni per sistemi continui, non omogenei, non in equilibrio, con memoria. Si può consultare l'articolo del 1974 di Coleman-Owen su "Archive for Rat. Mec.".

In questa conferenza, in particolare, parleremo dell'esistenza dell'entropia definita come "semipotenziali" e accenneremo ai materiali con memoria definendo la "storia".

I concetti che ci servirà definire e che useremo sono quelli di stato, processo, determinismo, "quantità che dipendono dal processo".

Un sistema dinamico si può schematizzare come una categoria fibrata; cioè, se \mathbb{S} è una categoria di "stati e processi" e \mathbb{C} è una categoria di "configurazioni e deformazioni", un sistema dinamico è una cofibrazione [o offibrazione] $\pi: \mathbb{S} \to \mathbb{C}$.

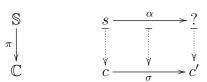
Anticipiamo subito, ciò che definiremo meglio in seguito, che $\mathbb C$ è una categoria di "camini" in uno spacio topologico C. Anche $\mathbb S$ viene costruita a partire da uno spazio topologico "degli stati" S, che dipende dalla natura fisica del sistema (ad esempio, posizione e velocità di una singola particella, oppure lo spazio delle fasi, o lo spazio vettoriale dei campi dei tensori degli sforzi associati a ciascuna configurazione (Noll) o, ancora, campi di scalari, come la temperatura, l'energia interna e la quantità di calore (specifiche), etc. Osserviamo inoltre che $\mathbb S$ non è la categoria dei cammini in S, ma la sottocategoria dei cosidetti "processi ammissibili", cioè quelli compatibili con le "assunzioni costitutive" (o relazioni costitutive) che definiscono specificamente il "materiale" del sistema.

In letteratura la nozione di "processo ciclico" è presente in due versioni: un processo α è ciclico se

- 1. α è un endomorfismo di uno stato s, oppure (più debolemente)
- 2. α è ciclico se $\pi(\alpha)$ è un endomorfismo di una configurazione.

Un sistema dinamico è deterministico se π è una "cofibrazione discreta", cioè vale:

$$\forall \gamma: c \to c' \text{ e } \forall s \text{ tale che } \pi(s) = c, \exists ! \alpha \text{ con } \operatorname{dom}(\alpha) = s \text{ e } \pi(\alpha) = \sigma$$



Facciamo alcune osservazioni sui concetti di stato, processo, determinismo etc. Abbiamo visto che gli stati dipendono dalla natura del sistema, che i

processi non sono arbitrari, ma sono bensì quelli fisicamente possibili per un dato materiali. Si può pensare all'esempio di un gas o di una singola particella. In questo caso $\mathbb C$ è data da posizioni p e da cammini continui (o lisci), mentre gli stati di $\mathbb S$ sono coppie $(p,\vec v)$. Si vede in concreto come sia utile pensare al funtore π come a un dimenticante. Anche in ambito solo meccanico il movimento di un corpo non dipende sollo dalla configurazione: in alcuni materiali (detti "con memoria") esso dipende anche dalla "storia" del corpo que ha quindi una "memoria". Nel definire gli stati occorre quindi considerare almeno anche le storie (deformation histories). Si può pensare a una deformazione come ad un esperimento da noi eseguito sul corpo por portarlo da una configurazione ad un'altra. In un sistema deterministico, con la giusta definizione di stato, ad una tale deformazione deve corrispondere (fissato lo stato iniziale) un unico processo. Altrimenti, occorre modificare la definizione di stato, che non è stata sufficientemente approfondita.

Matematicamente, ciò che si ha è un teorema di esistenza e unicità per un'equazione differenziale a coefficienti che dipendono dal tempo. Lo stato s è allora il valore iniziale.

Vedremo più avanti in dettaglio che un sistema dinamico si può anche pensare in termini (oltre che di stati) di input e di output, come è tipico della teoria dei sistemi e degli automi. Gli input sono da pensare come le deformazioni cui il sistema è sottoposto, mentre gli output sono osservabili fisiche cha a tali deformazioni vengono associate. Più precisamente si tratta di quantità fisiche e non di funzioni di stato, cioè esse sono definite solo lungo cammini e non negli stati. Pertanto si possono schematizzare come funtori $\mathbb{S} \to \mathbb{R}$ (o V) dove \mathbb{R} è visto como monoide cioè come categoria con un solo oggetto *, le cui frecce sono numeri reali, la composizione è la somma etc.. V è più in generale uno spazio di Banach ordinato, visto anch'esso come monoide.

Coleman parla di "azione" (forse pensando al caso del lavoro?)

$$\begin{array}{c}
\mathbb{S} \xrightarrow{a} \mathbb{R} \\
\downarrow \\
\mathbb{C}
\end{array}$$

Noi parleremo di "funtori costitutivi".

La situazione presenta una interessante analogia con i concetti di flusso e di "propagatore", cioè un funtore da una categoria abbastanza banale verso una più grande. Il dominio si può pensare come una categoria di indici. Nel caso particolare in cui il dominio è il monoide \mathbb{R} , si ha appunto un flusso:

$$\mathbb{R} \xrightarrow{f} \mathcal{X}$$
, dove $\mathcal{X} = (C^{\infty}, \text{morf. lisci})$

f è dunque un funtore che "sceglie" uno spazio X in \mathcal{X} , cioè f(*) = X e a 4 ogni tempo r fa corrispondere l'automorfismo $f(r): X \to X$.

Abbiamo così definito un flusso "liscio". Analogamente si può parlare di flusso lineare, etc. Per definire un propagatore, consideriamo un'altra categoria $\overline{\mathbb{R}}$ che è \mathbb{R} visto come ordine, cioè gli oggetti sono i numeri reali e le frecce $i \leq$. Un propagatore è allora un funtore

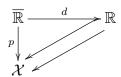
$$\mathbb{R} \xrightarrow{p} \mathcal{X}$$
 e si ha $p(r_1 \leq r_2) \circ p(r_2 \leq r_3) = p(r_1 \leq r_3)$

Così (questo) propagatore può essere visto come uno spazio variabile in modo liscio (cioè una famiglia di spazi indiciati da $\overline{\mathbb{R}}$, tali quindi che tra due spazi ci sia un <u>unico</u> morfismo liscio). Un esempio potrebbe essere una dilatazione (liscia) di uno spazio X attraverso degli stadi X_r .

Ogni flusso è un tipo banale di propagatore e, viceversa, ad ogni propagatore possiamo associare due "flussi de Kan" che sono più vicini "da sopra e da sotto" al propagatore: ciò corrisponde a cambiare un po' gli spazi di stati.

Infatti c'è un rapporto tra $\overline{\mathbb{R}}$ e \mathbb{R} (precisamente un funtore "differenza" $d: \overline{\mathbb{R}} \to \mathbb{R}$ cha manda tutti gli oggetti di $\overline{\mathbb{R}}$ nell'unico oggetto * di \mathbb{R} e le frecce $r_1 \leq r_2$ nelle frecce $r_2 - r_1$ di \mathbb{R} .

Si possono così considerare le estensioni di Kan di p lungo d:



Così, nell'esempio del propagatore visto come "dilatazione" di uno spazio X, l'estensione (sinistra) di p consisterebbe nel pensare alla dilatazione come a un flusso su uno spazio \overline{X} che è il colimite degli X_r , cioè è la configurazione "estremale" della dilatazione.

Portando avanti la nostra analogia e tornando ai funtori costitutivi, osserviamo che vi sono due modi di indiciare con \mathbb{R} (o V) cioè che si può "entrare" in categorie più ricche non solo con funtori \underline{da} \mathbb{R} (o V) ma anche verso \mathbb{R} (V). Tali sonno i funtori costitutivi

$$\mathbb{S} \xrightarrow{a} V$$

(dove V è sempre pensato come monoide) per i quali vale

$$s_1 \xrightarrow{\alpha} s_2 \xrightarrow{\beta} s_3$$

$$a(\alpha \cdot \beta) = a(\alpha) + a(\beta) e a(i_s) = 0.$$

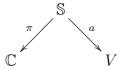
Esempio tipico di funtore costitutivo è quello che ad ogni configurazione associa il campo dei tensori degli sforzi. V è lo spazio (6 dimensionali) di <u>tutti</u> i campi tensoriali. Esempi termodinamici sono i campi scalari delle quantità di calore (acquistato o ceduto) specifiche, dell'energia interna specifica etc.

Si noti che la dizione "funtore costitutivo" è più adeguata di quella classica di funzionale costitutivo: spesso infatti il codominio è uno spazio funzionale e siamo in presenza di veri e propri operatori.

Ricordiamo che \mathbb{C} può essere pensata come la categoria degli input del sistema, mentre gli output sono copie (V, a).

Facciamo un'osservazione di carattere "fisico" sulla costruzione dello spazio degli stati, cioè sul problema della "realizazione". Ad ogni input (deformazione), in corrispondenza a ogni output (funtore costitutivo), avremo in generale più di un valore. (Cioè si tratta di un bimodulo). Ciò corrisponde alla molteplicità di stati e processi associati alla nostra deformazione. C'è un modo ovvio e del tutto empirista di costruire un sistema deterministico: basta definire gli stati associando ad ogni configurazione le possibile storie e i possibili valori di tutti i funzionali (e le loro storie). La situazione è chiaramente ridondante. "Per fortuna" esistono le leggi fisiche e le relazioni costitutive ed è pertanto possibile isolare un certo numero di funzionali costitutivi independenti i cui valori (e storie) daranno lo spazio degli stati. Il problema di un "buon" sistema è allora quello di una "buona" teoria fisica (più che non un problema de "minimalità" degli stati o altre caratteristiche formali).

Abbiamo visto quindi che c'è un bimodulo $\mathbb{C} \longrightarrow V$



che gode della proprietà che π è una fibrazione discreta. C'è un'analogia suggestive con il caso, negli insiemi, delle applicazioni parziali. Un'applicazione parziale da C a V (ora sono insiemi) è data da un sottoinsieme $S\subseteq C$ e da un'applicazione $f:S\to V$. Il seguente diagramma è un pullback e esprime la rappresentabilità delle applicazioni parziali:

$$S \xrightarrow{f} V$$

$$\downarrow p.b. \qquad \downarrow i$$

$$C \xrightarrow{\overline{f}} \tilde{V}$$

dove $\tilde{V} = V + \{*\}$ e \overline{f} è un'applicazione che su S coincide con f e in $C \backslash S$

vale *. Ci sono dunque <u>due</u> possibilità (due valori di verità) se parto da un elemento di C.

Analogamente, nel nostro caso, siamo in presenza di un "funtore parziale", ma in un senso categoriale più che insiemistico. Per andare da \mathbb{C} a V no basta vedere se è possibile o no. Se parto da una configurazione c 7 non posso associarle in modo univoco, ad es., un campo di stress, cioè un elemento di V: devo sapere anche da <u>quale stato</u> parto. Ho quindi che i valori di verità sono gli stati.

$$[a \dots c] = \{s \mid \pi(s) = c\}$$

L'analogia riposa sul fatto che (cfr. l'articolo di Street-Walters) in **Cat** le fibrazioni discrete si possono pensare come sottogetti. Nel diagramma analogo:

 \tilde{V} è il completamento di V per le somme, i funtori da $\mathbb C$ a \tilde{V} sono i "funtori parziali" da $\mathbb C$ a V.

 $\mathcal{S}^{V^{\mathrm{op}}}$ rappresenta i bimoduli, mentre \tilde{V} rappresenta i funtori "parziali".

Definiamo ora i concetti di semipotenziale e di potenziale. Un semipotenziale A per un funtore costitutivo reale a è la scelta di una funzione

$$|\mathbb{S}| \xrightarrow{A} \mathbb{R}$$

tale che per ogni camino $\alpha: s_1 \to s_2$, si abbia

$$a(\alpha) \le A(s_2) - A(s_1)$$

Ciò implica la "disuguaglianza di Clausius" e cioè che se α è un ciclo, $a(\alpha) \leq 0$.

È anche possibile, sebbene meno ovvio, risalire dalla disuguaglianza di Clausius all'esistenza di un semipotenziale.

8

Se invece risulta $a(\alpha) = 0$, il ciclo si dirà reversibile. In questo caso, il semipotenziale diventa un potenziale e vale $a(\alpha) = A(s_2) - A(s_1)$.

Si noti che reversibile significa "conservativo" e non significa affato "invertibile". Anzi, negli esempi sia $\mathbb S$ che $\mathbb C$ sono categorie tali che ogni morfismo è contemporaneamente epi e mono, ma solo l'identità è invertibile.

Possiamo descrivere brevemente in modo informale come un funzionale con la "propietà di Clausius" dia luogo a un semipotenziale. Un funzionale gode della propietà di Clausius in uno stato s_0 ser pre ogni processo approssimativamente ciclico, $a(\alpha)$ è approssimativamente negativo. Si dimostra (Coleman-Owen) che se a gode della proprietà di Clausius in s_0 , allora per ogni stato s c'è un suo intorno tale che i valori di a su cammini che cominciano in s_0 e finiscono in quell'intorno è limitato superiormente. Allora dato s_0 , considero i cammini $\alpha_i: s_0 \to s$ e chiamo $d(s_0, s) = \sup_{\alpha_i: s_0 \to s} a(\alpha_i)$ ($< \infty$ per quanto detto prima). Posso allora definire

$$A_0(s) = d(s_0, s)$$

Con riferimento all'esistenza dell'entropia come semipotenziale, il problema è proprio mostrare che questo sup è finito. È interessante il ruolo giocato dai processi ciclici. Se α è ciclico, $a(\alpha) \leq 0$, ma "non deve" essere troppo negativo. Occorre chiedere che esista uno stato s_0 tale che ogni stato sia da esso raggiungibile e che per ogno precesso ciclico "vicino" all'identità sia $a(\alpha) \approx 0$.

Il funtore costitutivo a è in questo caso (per $\alpha: s_1 \to s_2$) $a(\alpha) = \int_{\alpha} \frac{dq}{T}$, dove q è un funtore $\mathbb{S} \xrightarrow{q} \mathbb{R}$ che rappresenta la quantità di calore ceduto o acquistato dal sistema lungo un processo. T è la temperatura, che è una funzione $|\mathbb{S}| \xrightarrow{T} \mathbb{R}$. Per processi infinitesimi avremo $da = \frac{dq}{T}$, cioè

$$Tda = dq$$

9

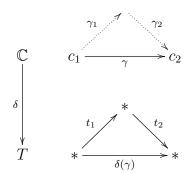
Il punto allora è vedere se in $\mathbb S$ si possono avere processi infinitesimi. La risposta è positiva e si basa sulla definizione di funtore "di Möbius" o di tipo durata, che ora daremo.

Si consideri ad esempio il funtore durata $\delta : \mathbb{C} \to T$ dove $T = \mathbb{R}$ visto come monoide) che ad ogni cammino in \mathbb{C} associa la sua durata. La functorialità dà:

$$c_1 \xrightarrow{\gamma_1} c_2 \xrightarrow{\gamma_2} c_3 \qquad \qquad \delta(\gamma_1 \cdot \gamma_2) = \delta \gamma_1 + \delta \gamma_2$$

Inoltre vale la seguente proprietà (di funtore di Möbius):

$$\forall \gamma, t_1, t_2$$
 tali che $\delta(\gamma) = t_1 \cdot t_2,$
$$\exists ! (\gamma_1, \gamma_2) \quad \text{con} \quad \delta(\gamma_i) = t_i \quad \text{e} \quad \gamma = \gamma_1 \cdot \gamma_2 \quad \text{cioè}$$



La "decomponibilità", ben presente in \mathbb{R} , si entende quindi a \mathbb{S} e ricordando che γ era definita come $[0,\alpha] \to S$, si può osservare che in realtà γ non è definita su un intervallo, ma su un insieme di fattorizzazioni di esso.

Si noti che un determinismo di tipo meccanicistico comporterebbe che δ sia non solo di Möbius, ma addirittura una fibrazione discreta.

10

Vediamo ora con un po' di dettaglio la costruzione della categoria dei cammini in uno spazio topologico.

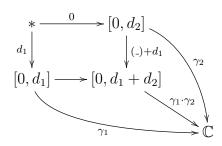
Sia ${\cal C}$ uno spacio topologico. Abbiamo definito come "cammini" di ${\cal C}$ le funzioni continue

 $\gamma:[0,d]\to C,$ dove [0,d] sono intervalli di $\mathbb R,$ tali che $\gamma(0)=c_0,\,\gamma(d)=c_1$; e $\delta(\gamma)=d$

La composizione di due cammini

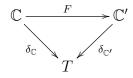
$$[0, d_1] \xrightarrow{\gamma_1} C$$
 e $[0, d_2] \xrightarrow{\gamma_2} C$

è possibile se $\gamma_1(d_1) = \gamma_2(0)$ come illustra il seguente push out (in **Top**)



che inoltre ci spiega perchè $\gamma_1 \cdot \gamma_2 \neq \gamma_2 \cdot \gamma_1$.

Una funzione continua f tra spazi topologici C e C' induce quindi un morfismo tra le categorie dei cammini, che conserva la durata-



Abbiamo, cioè, un funtore

$$\mathbf{Top} \xrightarrow{\mathrm{Path}} \mathbf{Cat}(\mathbf{Top})/\mathbb{R}$$

Torniamo ora al problema di costruire $\mathbb S$ a partire degli output. Avremo quindi dei funtori costitutivi:

$$Path(|S|) \xrightarrow{a} \mathbb{R}$$

11

sottoposti a relazioni costitutive e restrizioni che dipendono dalla natura fisica del sistema, e quindi non saranno definibili che lungo i "processi ammissibili"

Pertanto mentre $\mathbb{C} = \text{Path}(|\mathbb{C}|)$, sarà in generale

$$\mathbb{S} \longrightarrow \operatorname{Path}(|\mathbb{S}|)$$

Parlando dei materiali con memoria, un tipo particolarmente importante di spazio degli stati si costruisce mediante la definizione di storia.

Affrontiamo per ora il caso della cosiddetta "deformation history", cioè la storia relativa alle configurazioni

Per quanto riguarda gli oggetti di S, essi sono "definiti" da

$$\mid \mathbb{S} \mid = \mid \mathbb{C} \mid^{(-\infty,0]}$$

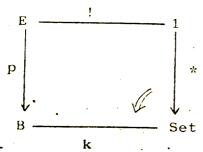
li chiamiamo storie di \mathbb{C} ; questa scrittura ha senso in un topos). Per le frecce, basta osservare che la composizione a destra con un cammino di \mathbb{C} porta a una nuova storia (a meno di una traslazione negativa dei tempi). Le frecce dalla storia s alla storia s_1 sono quindi le frecce di \mathbb{C} tali che $s_1 = s \cdot \gamma$ (UNCLEAR DIAGRAM)

$$s \cdot \frac{}{\gamma} > s_1$$

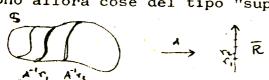
Si avrà la proiezione: $\pi(s) = s(0)$.

Un problema che ci si può porre è quello, dato \mathbb{S} <u>senza</u> memoria, di trovare un \mathbb{S}' che considera anche le storie <u>non solo</u> delle deformazioni, ma di tutte le osservabili presenti in \mathbb{S} . Sarà $|\mathbb{S}'| = |\mathbb{S}|^{(-\infty,0]}$.

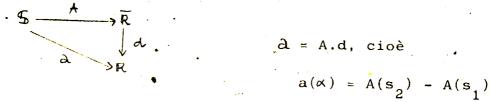
- 1) Oppure "azione del sistema sull'esterno" come nel lavoro di Willems. Comunque, azione mi sembra un concetto più generale di funtore costitutivo (o no?).
- 2) Non c'è chiara evidenza dai miei appunti che tu intendessi **R** proprio nel senso da me interpretato. Se ho capito male tutto ciò che segue sui propagatori è sbagliato.
- 3) Questa, in particolare, risulterebbe fantascienza. Il fatto è che non ho messo le mani su una definizione precisa di propagatore per poter verificare. I fisici e i meccanici ai quali ho chiesto per referènze sanno che i propagatori esistono ma non sanno cosa sono.
- 4) Non sono sicuro che sia un pullback. Nel loro lavoro Street e Walters costruiscono un comma-oggetto. Credo quindi che ci dovrebbe essere una 2-cella. Nella loro notazione è (mullo Vel)



5) Non è chiaro se R debba essere pensato come Arr (R), o come R. Mi è venuta in mente una proposta "fantascientifica" (e probabilmente sbagliata). Potremmo forse definire un semipotenziale come un funtore da \$\infty\$ \rightarrow R, che quindi ad ogni s associa il numero reale A (s) e ad ogni freccia \(\times : s_1 \rightarrow s_2 \) associa l'unica freccia A(s_1) \(\rightarrow A(s_2) \) in R. Le controimmagini di A sono allora cose del tipo "superfici equipotenziali)



Componendo A con d, nel caso conservativo avremo che



Nel caso del semipotenziale avremo invece che



A è un left lifting di a attraverso d

- 6) Qui motivo che sup a (<) < ∞ con argomenti tratti da Coleman & Owen e usati in modo un po' informale. Dagli appunti presi mi pare che tu tralasci le considerazioni "topologiche" che loro fanno. Lo fai per semplificare o perché il nuovo assetto (C invece di C, 5 invece di S) ce lo permette?
- 7) Vedi 5:
- 8) Nell'articolo di Noll (A new theory of simple materials) l'aspetto categoriale delle storie è molto evidente (i.e. che
 l'hom tra due storie è un processo etc...). Però le definisce con [0,∞), mentre nell'articolo più antico era come hai
 detto tu. C'è un motivo per la tua scelta?
- 9) Era questa la "storia universale" che volevi definire? Con Aurelio abbiamo pensato a "Möbius-Conduché versus locale senza tirare fuori niente di buono. Mi sono chiesto se un altro dei tuoi suggerimenti fosse la seguente congettura:

 Se δ è di Möbius, vale Conduché, quindi c'è un aggiunto destro al funtore pullback. Si avrebbe, per degli stati 5 → C → T

Cioè applicare a \$ prima il funtore pullback e poi il suo aggiunto destro, lo trasformerebbe nella 5'cercata, quella con tutte le storie. Hai mai suggerito ciò? In ogni caso la costruzione deve avere un significato fisico, anche ne fata le congettura.

10) Un'altra osservazione. Prendendo sul serio il fatto che C generalizza T, rispetto alla nozione di determinismo, ho pensato ad un'altra analogia con flussi e propagatori, prendendo C al posto di R e Sal posto di d e le fibrazioni discrete al posto del propagatore.

C. ST

che in C (a differenza che in R) cammini diversivossono avere la stessa durata. Quindi tutta la machinery dei gruppi (o semigra un parametro è troppo povera. Forse bisognerebbe considerare

dove p, (con condizioni in più)è ancora una fibrazione discreta In questo caso non si avrebbe più un flusso, ma un flusso "rel zionale" o "fuzzy" o comunque lo si voglia chiamare, che tiene conto della molteplicità dei cammini isocroni di C.