

Meccanica Razionale per Fisica

Lezioni di Meccanica Statistica

Errico Presutti

Giugno 2000

Indice

INTRODUZIONE	1
Eventi significativi nella storia della Meccanica Statistica	3
Parte 1. Meccanica Statistica	9
Capitolo 1. GAS DI LORENTZ	11
1.1. Il gas di Lorentz sul reticolo	12
1.2. Distribuzione degli ostacoli	13
1.3. Il moto in presenza di ostacoli	15
Capitolo 2. PROBABILITÀ IN SPAZI FINITI	21
2.1. Misure e Probabilità	21
2.2. Spazi prodotto	22
Capitolo 3. EQUAZIONE LINEARE DI BOLTZMANN	27
3.1. Dati iniziali aleatori	27
3.2. Identificazione del limite	32
Capitolo 4. REVERSIBILITA'-IRREVERSIBILITA', ENTROPIA	35
4.1. Sistemi di particelle e gas di Lorentz	35
4.2. L'entropia	36
4.3. Reversibilità ed irreversibilità	38
Capitolo 5. EQUAZIONE DI BOLTZMANN	41
5.1. Derivazione euristica	41
5.2. Limite di Boltzmann-Grad	45
Capitolo 6. EQUILIBRIO E DISTRIBUZIONE DI MAXWELL	51
6.1. Entropia nell'equazione di Boltzmann	51
6.2. Stati di equilibrio, distribuzione di Maxwell	54
Capitolo 7. TERMODINAMICA DEL GAS DI BOLTZMANN	57
7.1. L'equazione di stato per il gas di Boltzmann	57
7.2. Pressione cinetica e pressione termodinamica	59
7.3. Principi variazionali	61
7.4. Complementi	65
Capitolo 8. MISURE DI GIBBS NEL MODELLO DI ISING	69

8.1.	Il modello di Ising	69
8.2.	Spazio delle fasi ed energia nel modello di Ising	71
8.3.	Limite termodinamico per una successione di cubi	74
8.4.	Limite termodinamico per una successione di van Hove	76
8.5.	La termodinamica del modello di Ising	78
Capitolo 9.	MISURE DI GIBBS PER SISTEMI DI PARTICELLE	81
9.1.	Stabilità della materia	81
9.2.	Gli ensemble statistici	85
Capitolo 10.	L'IPOTESI ERGODICA	89
10.1.	Sistemi ergodici, frequenze di visite, decomposizione ergodica	89
10.2.	I biliardi di Sinai e il Teorema KAM	95
10.3.	La questione ergodica e le osservabili macroscopiche	97
Parte 2.	Complementi	99
Appendice A.	Teoria dello Scattering	101
A.1.	Il problema dei due corpi	101
A.2.	Forze centrali	102
A.3.	Scattering da potenziale	104
A.4.	Trasformazioni di misure tra spazi Euclidei	108
A.5.	La sezione d'urto	115
A.6.	Applicazioni alla Teoria Cinetica	118
Appendice B.	Appendice B. Complementi sul gas di Lorentz	125
B.1.	Limite macroscopico con ostacoli di due tipi	125
B.2.	Limite macroscopico per la densità di particelle	128
B.3.	Paradossi	132
B.4.	Equilibrio, equilibrio locale e limiti idrodinamici	135
Appendice C.	L'equazione di Broadwell	141
Appendice D.	Complementi sul modello di Ising	145
D.1.	Gas sul reticolo	145
D.2.	Convessità della pressione	147
D.3.	La disuguaglianza di Hölder	149
Appendice E.	Proprietà delle misure microcanoniche	151
E.1.	Dimostrazione della (9.28)	151
E.2.	Invarianza temporale delle misure micro-canoniche	152
Appendice F.	Il Teorema di Ricorrenza di Poincaré	155
Appendice G.	Il teorema di Perron-Frobenius	159
Appendice.	Bibliografia	163

Appendice. Bibliografia	167
-----------------------------------	-----

INTRODUZIONE

La goccia d'acqua che osserviamo ad occhio nudo, ci appare come un qualcosa di continuo e regolare, ma ad un'osservazione accurata con sistemi di misura sofisticati, scopriamo una struttura fine molecolare, atomica, subatomica.... Se invece ci allontaniamo vediamo la nostra goccia d'acqua come parte minuscola di un mare, che, allontanandoci ancora, ci appare ora come parte minuscola di un oceano, e, proseguendo, della terra, del sistema solare...

La natura ha dunque una struttura gerarchica fatta a livelli, ogni livello ha le sue caratteristiche e una teoria fisica che le spiega o cerca di spiegarle. Le teorie sono spesso molto diverse tra loro, così andando dalle grandi alle piccole scale, passiamo successivamente dalla teoria della relatività generale alla meccanica dei fluidi, alla meccanica hamiltoniana, alla meccanica quantistica, alla teoria dei campi... In prima approssimazione, ogni livello è indipendente dagli altri, ma, a volte, alcuni fenomeni non possono essere spiegati senza studiare quelli sottostanti. La Meccanica Statistica è la disciplina che studia questo problema relativamente alla connessione tra le grandezze macroscopiche, termodinamiche e idrodinamiche che caratterizzano un fluido sulla scala dei centimetri o dei chilometri in termini delle interazioni microscopiche intermolecolari delle sue componenti che in generale avvengono sulla scala dell'angstrom. Il passaggio tra questi due livelli (che chiameremo semplicemente macroscopico e microscopico) coinvolge una drastica riduzione di informazione se pensiamo che un elemento di fluido (per esempio un centimetro cubo d'acqua) può contenere 10^{23} molecole e, macroscopicamente, il suo stato è descritto da pochi parametri, densità, temperatura,...

Intervengono perciò nel passaggio dal microscopico al macroscopico, complessi fenomeni di natura statistica per cui le singole componenti contribuiscono a comportamenti collettivi in cui perdono la propria individualità. Per citare un ben noto e sorprendente fenomeno in un campo totalmente diverso, si sa che “con grande accuratezza” è possibile predire il comportamento elettorale di una nazione di 50 milioni di persone dalla conoscenza del voto di qualche migliaio di elettori, pur essendo i singoli cittadini liberi di esprimere il voto a loro completo gradimento. L'insorgere di un concetto statistico nello studio della meccanica (legato appunto al cambio di scala dal microscopico al macroscopico) è tra i più affascinanti e dibattuti sia da un punto di vista strettamente scientifico, che concettuale e filosofico.

Assumerò un atteggiamento molto pragmatico sulla questione, osservando che, almeno per quanto riguarda l'equilibrio, il problema è risolto dalla famosa formula di Gibbs, che afferma che la probabilità di osservare all'equilibrio una data configurazione è proporzionale

a $\exp\{-E/kT\}$, dove E è l'energia della configurazione, k la costante di Boltzmann e T la temperatura assoluta. Sebbene “teoricamente risolto” il problema rimane totalmente aperto da un punto di vista pratico, poiché il calcolo di grandezze di interesse termodinamico è di estrema complessità: queste infatti, per loro stessa natura, coinvolgono un gran numero di variabili, troppe persino per le capacità di un moderno computer. In un modello semplice come quello di Ising, che studieremo nel Capitolo 8, il numero di configurazioni cresce come 2^N , N il numero di variabili elementari, spin, che in un modello realistico dovrebbe essere dell'ordine di 10^{23} .

Anche se comunemente accettata come valida, la formula di Gibbs non è dimostrata rigorosamente. Per farlo occorrerebbero considerazioni di tipo dinamico che, per esempio, permettano di dimostrare che nell'evoluzione temporale gli stati convergono asintoticamente a quelli di Gibbs. Ma questo problema in particolare e, più in generale tutta la Meccanica Statistica del non equilibrio, sono in uno stato se non precario certamente molto meno sviluppato che in equilibrio. L'analisi delle equazioni del moto con moltissime incognite, come nei sistemi macroscopici, solleva problemi formidabili la cui soluzione è probabilmente ancora molto lontana.

In casi particolari si sono fatti però notevoli progressi, l'intero programma della Meccanica Statistica è per esempio realizzato con successo nel caso dei gas rarefatti, che hanno anche notevole interesse pratico come nelle applicazioni a problemi di aerodinamica e nel rientro a terra dei satelliti. Questa è l'area di ricerca della Teoria Cinetica dei Gas, nata con i lavori di Boltzmann che hanno aperto la strada allo sviluppo moderno della Meccanica Statistica. Percorreremo in questo volume la stessa strada, iniziando dal caso più semplice del gas di Lorentz, un modello introdotto per studiare gli elettroni di conduzione in un metallo e quindi l'origine microscopica della resistenza elettrica. Vedremo che nel limite macroscopico il gas è descritto da un'equazione lineare di Boltzmann che risulta irreversibile, nonostante il sistema da cui è derivata segua le leggi reversibili della meccanica. La soluzione di questo paradosso ci aiuterà a comprenderne la natura in situazioni più complesse come nella derivazione dell'equazione di Boltzmann. Otterremo così una formula (di validità generale) per l'entropia e mediante essa ricostruiremo la legge di stato del gas di Boltzmann, che è quella dei gas perfetti. Proveremo inoltre la validità, in quest'ambito, dei principi variazionali della termodinamica. Faremo successivamente l'ipotesi che la loro validità si estenda a sistemi più generali, ed usando l'espressione ricavata precedentemente per l'entropia, sarà infine possibile dedurre la formula di Gibbs. A questo punto avremo tutte le nozioni necessarie per affrontare alcune delle questioni principali in Meccanica Statistica, quali la stabilità della materia, l'equivalenza degli ensemble, l'ipotesi ergodica e il limite termodinamico.

Ho dato sin qui per acquisita l'esistenza di una struttura microscopica sottostante i fenomeni macroscopici. Sebbene tale nozione appaia oggi familiare, essa è tutt'altro che evidente. L'averne intuito e poi dimostrato l'esistenza è tra le più significative ed affascinanti testimonianze del potere dell'ingegno umano e della sua capacità di comprendere e controllare la natura. Come si sia arrivati a questo, attraverso quali tentativi e teorie si sia poi determinata l'attuale forma della Meccanica Statistica, è argomento imprescindibile per chi cerchi una reale e profonda comprensione della teoria. Non ho le capacità per

aiutare il lettore in questa direzione né credo questo sia il contesto adatto per tale tentativo. Per ovviare, almeno parzialmente, riporterò qui appresso una cronologia degli eventi più significativi nella storia della Meccanica Statistica, che ho tradotto dall'Appendice A del libro di Grandy, [23], sulla Meccanica Statistica.

Eventi significativi nella storia della Meccanica Statistica

- 400 a.C. Leucippo di Mileto e Democrito di Abdera ipotizzano che la materia sia composta da piccole parti indivisibili. Nasce l'atomismo (Roller, 1981).
- 1716. Hermann (1716) osserva che il calore ha origine dal moto delle molecole e afferma che nei gas la pressione è proporzionale a $n\bar{v}$, (affermazione non corretta!).
- 1727. Inizia la teoria cinetica con i lavori di Eulero (1727). Si afferma che l'aria consiste di molecole, si formula una teoria dell'umidità, si osserva che la pressione e la temperatura sono manifestazioni macroscopiche di azioni molecolari. Si deriva l'equazione di stato per i gas: $P = nv^2/3$, (anch'essa non corretta).
- 1738. Nella sua opera, *Hydrodynamics*, Daniel Bernoulli, (1738), riproduce con maggiori dettagli i risultati di Eulero e propone v^2 per definire una scala di temperature. Presenta argomenti in favore della conservazione dell'energia e afferma che il calore non è altro che moto di atomi.
- 1782. Eulero (1782) propone ora $v^2/2$, per definire il calore. È il primo serio tentativo per sostituire la temperatura fenomenologica con una definizione puramente meccanica, in termini di moti molecolari.
- 1798. Il Conte Rumford (Thompson, 1798) propone l'equivalenza tra lavoro e calore e che il calore è una manifestazione del moto delle particelle. In retrospettiva, ciò segna l'inizio della fine della "teoria del calore".
- 1814. Laplace (1825) illustra i vantaggi che possono derivare dall'uso della teoria della probabilità in fisica.
- 1816. Laplace (1816) spiega la velocità del suono con un corretto trattamento adiabatico.
- 1821. Herapath (1821) pubblica una teoria cinetica approssimata, e con essa spiega i cambiamenti di stato, la diffusione e la propagazione del suono.
- 1824. Sadi Carnot (1824) intuisce la seconda legge della termodinamica: una macchina a calore non può essere più efficiente di una reversibile.
- 1825. La relazione tra calore e moti di particelle è discussa in gran dettaglio da Seguin, (1825).
- 1842. Robert Mayer (1842) chiarisce su basi teoriche (filosofiche) l'importanza dell'energia e delle leggi di conservazione in tutte le loro forme.
- 1843. Waterstone (1893) fonda una teoria cinetica matematicamente completa: $P = nv^2/3$, osservando la proporzionalità tra temperatura e velocità quadratica media. Sviluppa quindi una semplice legge di equipartizione ed osserva che il cammino libero medio, \bar{L} , si comporta come n^{-3} . La prima teoria cinetica realmente percorribile.
- 1845. Nel periodo 1840-49 Joule (1845) dimostra sperimentalmente l'equivalente meccanico del calore.

- 1847. Helmholtz (1847) collega conservazione dell'energia e teoria cinetica nella prima legge della termodinamica.
- 1851. Joule (1851) riproduce i lavori di Waterstone senza menzionare “medie” e riottiene l'espressione della pressione.
- 1853. Thomson (1853) migliora i risultati di Joule e, con quelli di Waterstone, mette un punto fermo sulla relazione $P = n\bar{v}^2/3$.
- 1856. Krönig fa una rassegna dello stato dell'arte in teoria cinetica. Sebbene non aggiunga nulla ed anzi introduca qualche errore, il suo prestigio dà grande supporto alla teoria.
- 1857. Clausius (1857), forse già nel 1850, rende le nuove idee più specifiche e distingue i tre stati della materia in termini di proprietà molecolari.

A questo punto la “teoria del calore” sta morendo rapidamente e la teoria cinetica e più o meno ben formalizzata, anche se non universalmente accettata. Si parla di “medie” ma non si dice in modo chiaro cosa ciò significhi. La Meccanica Statistica inizia col lavoro:

- 1858. Clausius (1858) introduce esplicitamente la prima nozione di probabilità in teoria cinetica e dice cosa debba intendersi per “media”. Definisce formalmente il cammino libero medio, L , e lo distingue dalla distanza media tra particelle ($\ell \approx n^{-3}$). Intuisce la necessità di una condizione di propagazione del caos, Stoßzahlansatz, ma non riesce a formularla esplicitamente.
- 1860. Maxwell (1859,1860) propone una versione della teoria cinetica molto vicina a quella attuale. Deriva la distribuzione statistica di sistemi di particelle puntiformi, trova che $L = 2(mkT)^{1/2}/3\pi^{3/2}d^2$, con d il raggio della “sfera d'influenza” di una particella e predice che la viscosità di un gas è indipendente dalla velocità. È la prima previsione basata sulla teoria cinetica di una proprietà non nota precedentemente.
- 1865. Clausius (1865) introduce il concetto di entropia e le dà un nome. Loschmidt (1865) usa la teoria cinetica per ottenere una stima di d , $d \approx 10^{-8}$ cm.
- 1866. Boltzmann (1866) pubblica il suo primo articolo di meccanica statistica e afferma che il suo fine è di ottenere la prima e la seconda legge della termodinamica come teoremi puramente meccanici.
- 1867. Appare la seconda teoria di Maxwell (Maxwell 1867) in cui si risolvono alcune delle difficoltà presenti nella prima e si formalizza la teoria cinetica. Nello stesso anno Maxwell inventa “il diavoleto di Maxwell” e sottolinea la natura probabilistica della seconda legge (Maxwell, 1867,1870).
- 1870. Kelvin discute sulle dimensioni degli atomi e Clausius enuncia il teorema del viriale.
- 1872. Nascono l'equazione di Boltzmann, la “Stoßzahlansatz” e il teorema H (Boltzmann, 1872).
- 1877. Boltzmann (1877a,b) sottolinea la natura probabilistica della seconda legge in accordo con Maxwell e introduce il metodo dei valori più probabili. Dice che $S = \ln W$ ma non lo scrive esplicitamente.

- 1878. Appare il lavoro fondamentale di Gibbs, “On the equilibrium of heterogeneous systems” (Gibbs, 1878).
- 1896. Appare il libro di Boltzmann “Vorlesungen über Gastheorie”, (Boltzmann, 1896).
- 1902. Appare il libro di Gibbs “Elementary Principles in Statistical Mechanics, (Gibbs, 1902).
- 1906. Planck (1906) quantifica le idee di Boltzmann e scrive $S = \ln W$.
- 1908. Perrin (1916) conferma il punto di vista atomista con i suoi esperimenti sul moto Browniano.
- 1911. Gli Ehrenfest pubblicano le loro famose e influenti critiche alla meccanica statistica (Ehrenfest ed Ehrenfest, 1911)
- 1948. Shannon (1948) generalizza la nozione di entropia.

Interrompo a questo punto concludendo la sezione con una bibliografia delle opere citate:

Bibliografia

- Bernoulli, D. 1738, *Hydrodynamica*, Argentorati.
- Boltzmann, L.: 1866, “Über die mechanischen Bedeutung des zweiten Hauptsatzes der Wärmetheorie”, *Wien Ber.* **53**, 195.
- Boltzmann, L.: “Studien über das Gleichgewicht der lebendigen Kraft zwischen bewegten materiellen Punkten”, *Wien. Ber.* **58**, 517.
- Boltzmann, L.: 1871, “Wärmetheorie aus den Sätzen über das Gleichgewicht der lebendigen Kraft”, *Wien. Ber.* **63**, 712.
- Boltzmann, L.: 1872, “Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen”, *Wien. Ber.* **66**, 62.
- Boltzmann, L.: 1877a, “Bemerkungen über einige Probleme der mechanischen Wärmetheorie”, *Wien. Ber.* **75**, 62.
- Boltzmann, L.: 1877b, “Über die Beziehung zwischen dem zweiten Hauptsatzes der mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung respektive den Sätzen über das Wärmegleichgewicht”, *Wien. Ber.* **76**, 373.
- Boltzmann, L.: 1887, “Über die mechanischen Analogien des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik”, *J. r. ang. Math.* **100**, 201.
- Boltzmann, L.: 1895, “On Certain Questions of the Theory of Gases”, *Nature* **51**, 413, 581.
- Boltzmann, L.: 1896, “Entgegnung auf der Wärme theoretischen Betrachtungen des Hrn. E. Zermelo”, *Wied. Ann.* **57**, 773.
- Boltzmann, L.: 1896, *Vorlesungen über Gastheorie*, Barth, Leipzig (Part I, 1896; Part II, 1898).
- Carnot, S.: 1824, *Reflexions sur la puissance motrice du feu et sur les machines propres à développer cette puissance*, Bachelier, Paris.
- Clausius, R.: 1857, “Über die Art der Bewegung, welche wir Wärme nennen”, *Ann. d. Phys. [2]* **100**, 353.
- Clausius, R.: 1858, “Über die mittlere Länge der Wege, welche bei der Molekularbewegung gasförmiger Körper von den einzelnen Molekülen zurückgelegt werden, nebst einigen anderen Bemerkungen über die mechanischen Wärmetheorie”, *Ann. d. Phys. [2]* **105**, 239.

- Clausius, R.: 1865, “Über verschiedene für die Anwendung bequeme Formen der Hauptgleichungen der mechanische Wärmetheorie”, *Ann. d. Phys.* [2] **125**, 390.
- Clausius, R.: 1870, “Über einen auf die Wärme anwendbaren mechanischen Satz”, *Ann. d. Phys.* [2] **141**, 124.
- Ehrenfest, P., and T. Ehrenfest: 1911, Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik, in Vol. IV, Part 32, *Encyklopädie der Mathematischen Wissenschaften*, Teubner, Leipzig.
- Euler, L.: 1727, “Tentamen explicationis phaenomenorum seris”, *Comm. Acad. Sci. Petrop.* **2**, 347.
- Euler, L.: *Acta Acad. Sci. Petrop.* **1**, 162.
- Gibbs, J.W.: 1876, “On the Equilibrium of Hetrogeneous Substances”, *Trans. Conn. Acad.* **3**, 108, 343.
- Gibbs, J.W.: 1902, *Elementary Principles in Statistical Mechanics*, Yale Univ. Press, New Haven.
- Herapath, J.: 1821, “A Mathematical Inquiry into the Causes, Laws and Principal Phenomena of Heat, Gases, Gravitation, etc.”, *Ann. Phil.* [2] **1**, 273, 340, 401.
- Hermann, J.: 1716, *Phoronomia sive de viribus et motibus corporum soidorum et fuuidorum libri duo*, Amsterdam.
- Joule, J.P.: 1845, *Phil. Mag.* [3] **27**, 205.
- Joule, J.P.: 1851, “Some Remarks on Heat and the Constitution of Elastic Fluids”, *Mem. Manchester Lit. Phil. Soc.* **9**, 107.
- Krönig, A.K.: 1856, “Grundzüge einer Theorie der Gase”, *Ann. d. Phys.* [2] **99**, 315.
- Laplace, P.S.: 1816, *Ann. Phys. Chim.* **3**, 288.
- Laplace, P.S.: 1825, *Essai philosophique sur les probabilités*, 5th ed. Bachelier, Paris.
- Maxwell, J.C.: 1859, “Letter to G.G. Stokes on 30 May”, in J. Larmor (ed.), *Memoir and Scientific Correspondence of the late George Gabriel Stokes*, vol. 2, Cambridge Univ. Press, Cambridge.
- Maxwell, J.C.: 1860, “Illustrations of the Dynamical Theory of Gases” – full references on p. 30 of this volume.
- Maxwell, J.C. 1867, “On the Dynamical Theory of Gases”, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **157**, 49.
- Maxwell, J.C.: 1867, “Letter to P.G. Tait on 11 December”, in C.G. Knott, *Life and Scientific Work of Peter Guthrie Tait*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1911.
- Maxwell, J.C.: 1870, “Letter to J.W. Strutt on 6 December”, in R.J. Strutt, *Life of John William Strutt, Third Baron Rayleigh*, Univ. Wisconsin Press, Madison 1968.
- Mayer, J.R.: 1842, “Bemerkungen über die Kräfte der unbelebten Natur”, *Ann. Chemie und Pharmacie* **42**, 233.
- Perrin, J.: 1916, *Atoms*, Van Nostrand, Princeton.
- Planck, M.: 1906, *Vorlesungen über die Theorie der Wärmestrahlung*, J.A. Barth, Leipzig.
- Seguin, M.: 1825, “Letter to Dr. Brewster on the Effects of Heat and Motion”, *Edimburg J. Sci.* **3**, 276.
- Shannon, C.E.: 1948, “A mathematical Theory of Communication”, *Bell System Tech. J.* **27**, 379, 623.
- Thompson, B. (Count Rumford): 1798, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **80**.
- Thomson, W. (Lord Kelvin): 1853, “On the Mechanical Action of Heat, and the Specific Heats of Air”, *Cambridge and Dublin Math. J.* **96**, 270.
- Thomson, W.: 1870: “The Size of Atoms”, *Nature* **1**, 551.
- von Helmholtz, H.: 1847, *Über die Erhaltung der Kraft*, G. Reimer, Berlin.

- Waterston, J.J.: “On the Physics of Media that are Composed of Free and Perfectly Elastic Molecules in a State of Motion”, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **183A**, 79. [Published posthumously; first submitted in 1843; abstract published in *Proc. Roy. Soc. (London)* **5**, (1846)].

Parte 1

Meccanica Statistica

CAPITOLO 1

GAS DI LORENTZ

Per gas di Lorentz si intende un sistema di particelle che si muovono in una regione in cui sono presenti ostacoli disposti in modo aleatorio e con bassa densità. Si suppongono inoltre trascurabili sia la mutua interazione tra le particelle che la correlazione tra le posizioni degli ostacoli. Il modello è stato originariamente introdotto per studiare un gas di elettroni di conduzione in un metallo. Gli ostacoli sono allora le impurità presenti nel cristallo, che, deflettendo gli elettroni, contribuiscono, almeno in parte, alla resistenza elettrica del materiale. Anche un fluido ideale che attraversa un mezzo poroso può ricordare la situazione precedente: in questo caso il fluido si muove nella direzione in cui è spinto, ma, a causa delle fluttuazioni della permeabilità del mezzo, viene deviato e diffonde. Immaginarci il gas di Lorentz è anche chiamato il “vento di Lorentz”, pensandolo come un vento in una foresta i cui alberi ne ostacolano il cammino.

In tutti questi esempi la posizione degli ostacoli ha natura chiaramente aleatoria, dipendendo da un gran numero di cause su cui l'osservatore ha generalmente scarso controllo e che producono risultati diversi da un esperimento all'altro. Le questioni di maggior interesse fisico, come risulta chiaramente da questi esempi, riguardano l'entità e la natura delle deviazioni che un fascio di particelle subisce quando penetra nella regione in cui si trovano gli ostacoli. Si cercano delle risposte “globali”, che prescindano, per quanto possibile, dalla particolarità del singolo esperimento. Si tratta quindi di un problema di scattering, che non appare però nella formulazione abituale, non vi è infatti un solo scatteratore, ovvero il campo di forze non è localizzato, ma è presente in regioni nettamente distinte l'una dall'altra e distribuite in modo aleatorio.

Il prototipo di gas di Lorentz è un sistema di particelle puntiformi che collidono elasticamente su delle sfere fisse nello spazio, tutte di stesso raggio, e con centri distribuiti aleatoriamente. Si suppone inoltre, e questa è l'ipotesi fondamentale che caratterizza un gas di Lorentz, che la distanza tra i centri delle sfere sia in media molto maggiore del raggio delle stesse. Al fine di semplificare la trattazione considererò una versione discreta e bidimensionale del sistema.

1.1. Il gas di Lorentz sul reticolo

Supporrò le particelle puntiformi, identiche, di massa m e che si muovono nel piano. Con \mathcal{V} indicherò l'insieme delle quattro velocità:

$$e_1 = (1, 0); \quad e_2 = (0, 1); \quad e_3 = (-1, 0); \quad e_4 = (0, -1) \quad (1.1)$$

e farò l'ipotesi che le velocità iniziali delle particelle siano tutte in \mathcal{V} .

In assenza di interazione una particella si muove di moto rettilineo uniforme

$$(q_t, v_t) = (q_0 + v_0 t, v_0) \quad (1.2)$$

quindi l'insieme \mathcal{V} è banalmente conservato dal moto libero. L'introduzione di ostacoli causa variazioni della velocità delle particelle agli istanti di collisione. In generale dopo un urto la velocità non sarà più in \mathcal{V} . Ciò non accade però nel caso speciale in cui gli ostacoli sono segmentini fissi inclinati di $\pi/4$ rispetto all'orizzontale e gli urti elastici. Avremo in questo caso due tipi di ostacoli corrispondenti alle due diverse rotazioni di $\pi/4$, oraria e antioraria, a partire dalla direzione orizzontale, come in Fig. 1.1 Un urto è una trasformazione di \mathcal{V} in sé che esprime la velocità uscente in termini di quella entrante. Ricordando l'ipotesi che gli urti siano elastici, avremo: ostacolo 1 (rotazione antioraria)

$$e_2 \rightarrow e_1; \quad e_1 \rightarrow e_2; \quad e_3 \rightarrow e_4; \quad e_4 \rightarrow e_3 \quad (1.3)$$

ostacolo 2 (rotazione oraria)

$$e_1 \rightarrow e_4; \quad e_4 \rightarrow e_1; \quad e_3 \rightarrow e_2; \quad e_2 \rightarrow e_3; \quad (1.4)$$

L'insieme di queste regole è indicato simbolicamente dall'espressione $T(b, v)$: $b = 1, 2$ specifica la natura dell'ostacolo, $v \in \mathcal{V}$ la velocità entrante e $T(b, v)$ quella uscente, come determinata dalle (1.3)-(1.4).

Per semplificare ulteriormente la trattazione supporrò che anche le posizioni delle particelle siano discretizzate. A tal scopo basta supporre che i centri degli ostacoli siano in punti del reticolo \mathbb{Z}^2 , che la lunghezza degli ostacoli sia per esempio $\sqrt{2}$, (in questo modo solo il centro dell'ostacolo ha intersezione con \mathbb{Z}^2), e che la posizione iniziale di ogni particella sia in un qualche sito del reticolo, $q_0 \in \mathbb{Z}^2$. Se si osserva il moto agli istanti interi, $t \in \mathbb{Z}$, si avrà $q_t \in \mathbb{Z}^2$. Le velocità cambiano solo ai momenti di urto, cioè quando una particella raggiunge un sito su cui si trova [il centro di] un ostacolo. Allora la sua velocità v cambia secondo la regola $T(b, v)$ di sopra. Si può dunque pensare ad un ostacolo come ad una deformazione del reticolo che impedisce l'attraversamento rettilineo di un sito, come in Fig. 1.2.

Il modello è un esempio, tra i più semplici, di automi cellulari, cioè di sistemi di particelle sul discreto la cui evoluzione avviene a tempi interi. Le regole di evoluzione così discretizzate hanno il vantaggio di poter essere facilmente implementate sul computer. Con il progredire della tecnologia informatica i cellular automata hanno avuto un sviluppo vertiginoso. Sono oramai largamente utilizzati per simulare, non solo qualitativamente, l'evoluzione dei fluidi reali e, in generale, dei sistemi complessi, in alternativa, almeno in una prima fase dello studio, alla vera osservazione sperimentale, che spesso presenta costi e difficoltà notevoli.

1.2. Distribuzione degli ostacoli

La condizione che la distanza tipica tra gli ostacoli sia molto maggiore delle dimensioni di ciascuno di essi, che è caratteristica del gas di Lorentz, può essere realizzata introducendo un parametro $\epsilon > 0$, che si farà tendere a 0, e imponendo che il cammino libero medio, cioè la distanza media percorsa tra un urto e l'altro, sia dell'ordine di ϵ^{-1} .

Abbiamo così due “scale spaziali”, quella reticolare in cui la lunghezza unitaria è la distanza tra due siti contigui, e quella determinata dagli ostacoli, in cui la lunghezza unitaria (scelta in funzione del cammino libero medio) è uguale a ϵ^{-1} , se misurata in unità reticolari. Chiameremo microscopica la prima unità di lunghezza e macroscopica la seconda. Da un confronto con la fisica, dove i fenomeni atomici avvengono sulla scala dell'angstrom e i fenomeni macroscopici sulla scala per esempio del centimetro, ϵ^{-1} è, in questo caso, un centimetro misurato in angstrom, il suo valore è quindi 10^8 . Tornerò più avanti su questo punto quando parlerò del gas di Boltzmann.

In conclusione, la stessa posizione ha due coordinate, q e r , la prima microscopica e la seconda macroscopica e, per quando detto,

$$r = \epsilon q \quad (1.5)$$

Da un lato è naturale osservare il moto della particella in coordinate microscopiche, poiché essa si muove sul reticolo \mathbb{Z}^2 . In queste unità però gli urti sono “lontanissimi” l'uno dall'altro, per evidenziarli conviene dunque passare a coordinate macroscopiche. Come vedremo questo cambiamento di scale e una procedura di limite, $\epsilon \rightarrow 0$, sono la chiave per derivare le leggi macroscopiche dell'evoluzione. La netta separazione tra la scala microscopica e quella macroscopica dovrebbe nei sistemi fisici reali essere responsabile per la simultanea presenza delle due descrizioni, quella microscopica reversibile e quella macroscopica irreversibile. Ci proponiamo di riconoscere questo meccanismo nel caso più semplice del gas di Lorentz.

Per avere un cammino libero medio dell'ordine di ϵ^{-1} (sul reticolo, in unità microscopiche quindi) basterà imporre, come vedremo, che la densità degli ostacoli sia in media ϵ . Conviene, per comodità tecnica, considerare solo regioni limitate di \mathbb{Z}^2 , supporremo quindi che non vi siano ostacoli al di fuori del quadrato Λ_ϵ di centro l'origine e di lato proporzionale a ϵ^{-2} . Si noti che il lato di Λ_ϵ diverge, quando $\epsilon \rightarrow 0$, non solo in unità microscopiche, ma anche in quelle macroscopiche e in modo tale che le particelle inizialmente a distanza $\leq c\epsilon^{-1}$ dall'origine (cioè a distanza macroscopica finita) non raggiungeranno mai il bordo di Λ_ϵ nel tempo in cui le osserveremo, (infatti il tempo crescerà solo proporzionalmente a ϵ^{-1}). Perciò, a tutti gli effetti, lo spazio in cui sono distribuiti gli ostacoli può considerarsi infinito.

Il prossimo argomento riguarda la scelta della probabilità delle varie configurazioni di ostacoli. Considererò nel seguito ϵ e ρ positivi, e, dato ρ , valori di ϵ tali che $\epsilon\rho < 1$. La probabilità che vi sia un ostacolo in $q \in \Lambda_\epsilon$ è allora posta uguale a $\epsilon\rho$, quindi $1 - \epsilon\rho$ sarà la probabilità di non avere ostacoli in q . Richiedo inoltre che le probabilità in siti diversi siano indipendenti. Specificherò dopo le probabilità che l'ostacolo sia di tipo 1 o 2, prima vorrei discutere ad un livello euristico il significato della precedente definizione, nel capitolo successivo formalizzerò queste definizioni.

Per fissare le idee, consideriamo il caso particolarissimo in cui $\rho = 1$ e $\epsilon = 2/36$ e prendiamo Λ_ϵ uguale al quadrato in \mathbb{Z}^2 di lato 401 e centro 0. Si può allora realizzare una configurazione di ostacoli (senza specificarne il tipo) con le seguenti operazioni. Dopo aver ordinato in modo arbitrario i punti di Λ_ϵ (per esempio in senso lessicografico, partendo dal sito più in alto a sinistra e procedendo verso destra; esaurita la prima riga si ricomincia dal sito più a sinistra della seconda e così via) lanciamo successivamente, per ogni $q \in \Lambda_\epsilon$, due dadi (non truccati!). Se la somma è 2 o 12 si mette un ostacolo in q , che altrimenti viene lasciato vuoto. L'ipotesi che gli ostacoli siano indipendenti corrisponde al fatto che la regola di assegnazione di un ostacolo ad un sito non viene alterata nel corso dell'operazione dall'esito delle precedenti. Al termine si avrà una configurazione di ostacoli la cui probabilità è per definizione la probabilità che l'esito del lancio dei dadi la produca esattamente.

Finita la digressione euristica, daremo ora definizioni precise. Una configurazione di ostacoli è una funzione \underline{b} su Λ_ϵ a valori 0,1,2, cioè una successione $\underline{b} = \{b(q)\}$ a valori in $\{0, 1, 2\}$, indicizzata da $q \in \Lambda_\epsilon$. Il valore 0 corrisponde ovviamente all'assenza di ostacoli, 1 alla presenza di un ostacolo di tipo 1 e 2 a uno di tipo 2.

Dato $p \in [0, 1]$ definiamo la probabilità $P^\epsilon(\underline{b})$ della configurazione di ostacoli \underline{b} come

$$P^\epsilon(\underline{b}) = [1 - \rho\epsilon]^{n_0(\underline{b})} [\rho\epsilon p]^{n_1(\underline{b})} [\rho\epsilon(1 - p)]^{n_2(\underline{b})} \quad (1.6)$$

dove, per $i = 0, 1, 2$, $n_i(\underline{b})$ è il numero di siti q in Λ_ϵ in cui $b(q) = i$:

$$n_i(\underline{b}) = \text{cardinalità di } \{q \in \Lambda_\epsilon : b(q) = i\} \quad (1.7)$$

La (1.6) può essere riscritta come

$$P^\epsilon(\underline{b}) = \prod_{q \in \Lambda_\epsilon} \pi^\epsilon(b(q)) \quad (1.8)$$

avendo posto

$$\pi^\epsilon(0) = 1 - \rho\epsilon; \quad \pi^\epsilon(1) = \rho\epsilon p; \quad \pi^\epsilon(2) = \rho\epsilon(1 - p) \quad (1.9)$$

da cui risulta evidente che la somma di tutte le probabilità è correttamente normalizzata, essendo uguale a 1. Ciò si deduce sommando prima sui valori di $b(q_1)$, q_1 il primo elemento di Λ_ϵ : osservando che l'unica dipendenza da $b(q_1)$ è in $\pi^\epsilon(b(q_1))$, la somma di questi termini è 1 e ci si riduce all'espressione precedente in $\Lambda_\epsilon \setminus \{q_1\}$; procedendo iterativamente si dimostra che la somma delle probabilità è effettivamente uguale a 1.

La (1.8) si interpreta dicendo che $P^\epsilon(\underline{b})$ è il prodotto delle probabilità che i singoli siti q siano occupati come specificato da $b(q)$, evidenzia quindi la struttura di prodotto di una probabilità di eventi indipendenti.

Nel seguito di questo capitolo ci limiteremo al caso più semplice in cui $p = 1$, nel seguito accennerò al caso fisicamente più interessante in cui $p = 1/2$, che è però matematicamente molto più delicato da studiare. Nel precedente esempio del lancio dei dadi, possiamo usare nel caso $p = 1/2$ la regola per cui se la somma è 2 si assegna l'ostacolo di tipo 2, se 12 di tipo 1. Se nessuno di questi eventi si verifica allora il sito è lasciato vuoto.

1.3. Il moto in presenza di ostacoli

Considereremo per ora una singola particella inizialmente nell'origine e con velocità e_1 . L'estensione a casi più generali sarà discussa nei capitoli successivi.

Si ricordi che ai tempi interi la particella è in \mathbb{Z}^2 e che la velocità ha una discontinuità quando è in un sito in cui si trova un ostacolo. Definiremo v_t ad un istante d'urto come uguale alla velocità entrante, quella cioè subito prima dell'urto.

Assegnata una configurazione \underline{b} di ostacoli e una condizione iniziale (q_0, v_0) , definiamo ricorsivamente l'orbita (q_t, v_t) , $t \geq 1$, come

$$v_{t+1} = T(b(q_t), v_t), \quad q_{t+1} = q_t + v_{t+1} \quad (1.10)$$

Volendo sottolineare la dipendenza dalle condizioni iniziali e dalla configurazione di ostacoli, scriveremo anche

$$(q_t, v_t) = T_t(\underline{b}, q_0, v_0) \quad (1.11)$$

Invertendo le velocità, l'orbita viene ripercorsa all'indietro, quindi il moto è reversibile e il flusso T_t può essere definito anche per $t < 0$, ponendo $T_{-t} = T_t^{-1}$, $t \geq 0$. Torneremo su questo argomento nei Capitoli 3 e 4.

Reversibilità del moto. Il moto così definito (e avendo assegnato la configurazione di ostacoli) è reversibile nell'accezione classica del termine, cioè se ad un dato istante si inverte la velocità il punto percorre all'indietro la traiettoria. Le velocità nel moto all'indietro sono opposte alle velocità del moto in avanti, pur di confrontare ai tempi d'urto le velocità uscenti del moto all'indietro con quelle entranti del moto in avanti, e viceversa.

Si noti che per ogni t il valore (q_t, v_t) è completamente determinato da \underline{b} , a condizione iniziale fissata. Poiché questo è proprio il caso che consideriamo, (q_t, v_t) è una funzione di \underline{b} , in linguaggio probabilistico (q_t, v_t) è una variabile aleatoria, nello spazio delle configurazioni di ostacoli \underline{b} , su cui è definita la probabilità P^ϵ . L'orbita (q_t, v_t) , $t \in \mathbb{Z}$, è “un processo stocastico”.

Come già detto vogliamo studiare l'orbita macroscopica della particella e non i suoi dettagli microscopici. Le osservabili rilevanti sono perciò le “osservabili macroscopiche”, queste sono funzioni $\phi(r, v)$, $v \in \mathcal{V}$, che dipendono solo dai valori dello stato macroscopico, posizione e velocità, della particella. In particolare perciò, le osservabili macroscopiche non dipendono dal rapporto tra scala macroscopica e microscopica, rapporto determinato da ϵ . Fissato cioè lo stato macroscopico (r, v) , al variare di ϵ varierà la posizione microscopica q della particella, $r = \epsilon q$, ma non il valore dell'osservabile $\phi(r, v)$. Supporremo che $\phi(r, v)$ sia una funzione limitata, e, per ogni v , infinite volte differenziabile rispetto a r .

La posizione macroscopica r_t varia lentamente nel tempo e solo dopo tempi dell'ordine di ϵ^{-1} il suo valore potrà mutare significativamente. Si introduce perciò una coordinata macroscopica anche per il tempo: indicando con t il tempo in unità microscopiche e con τ in coordinate macroscopiche, poniamo

$$\tau = \epsilon t \quad (1.12)$$

L'osservazione della variabile macroscopica ϕ fatta al tempo macroscopico τ fornisce dunque il valore

$$\phi(r_t, v_t) \equiv \phi(\epsilon q_t, v_t), \quad t = [\epsilon^{-1}\tau] \quad (1.13)$$

che dipende, tramite q_t e v_t , dalla realizzazione della configurazione di ostacoli \underline{b} . Poiché vogliamo una risposta che prescindia dai particolari valori di \underline{b} , considereremo “il valore medio di $\phi(r_t, v_t)$ ”: la media, o aspettazione o integrale, di una funzione $f(\underline{b})$ rispetto alla misura P^ϵ , che indicheremo con $E^\epsilon(f)$, è definita come

$$E^\epsilon(f) = \sum_{\underline{b}} P^\epsilon(\underline{b}) f(\underline{b}) \quad (1.14)$$

Come osservato precedentemente, q_t e v_t sono per ogni t funzioni di \underline{b} , a condizioni iniziali fissate, dunque $\phi(r_t, v_t)$ è una funzione $f(\underline{b})$ a cui si può applicare la (1.14).

Il teorema che segue costituisce il risultato principale di questo capitolo. Vi si enuncia una proprietà di invarianza di scala per il sistema che abbiamo introdotto che prelude alla determinazione di equazioni macroscopiche per il gas di Lorentz, come si vedrà nei capitoli successivi. Dimostreremo qui una proprietà apparentemente sorprendente e di importanza fondamentale per il seguito, cioè che il valore medio di ϕ , a tempo macroscopico τ fissato, risulta sostanzialmente indipendente da ϵ per piccoli valori di ϵ , ovvero che ha limite ben definito quando $\epsilon \rightarrow 0$. Ciò significa che l'osservazione macroscopica del sistema non dipende più dal valore del rapporto tra scala macroscopica e microscopica (rappresentato appunto da ϵ). Questo fenomeno di invarianza di scala caratterizza la transizione dal microscopico al macroscopico e viene considerato come la condizione da verificare per affermare che un sistema “abbia comportamenti macroscopici”.

Teorema 1.3.1. *Sia $p = 1$ nella (1.6), $q_0 = 0$ e $v_0 = e_1$. Allora per ogni “funzione test” $\phi(r, v)$ e per ogni $\tau > 0$ esiste il limite*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} E^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_{\epsilon^{-1}\tau}, v_{\epsilon^{-1}\tau}) \right) =: \Gamma(\phi, \tau) \quad (1.15)$$

e $\Gamma(\phi, \tau)$ è la somma della serie convergente

$$\Gamma(\phi, \tau) = e^{-\rho\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \int_0^\tau d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \phi(v_0\tau_1 + \cdots + v_n(\tau - \tau_n), v_n) \quad (1.16)$$

dove $v_0 = e_1$, $v_1 = e_2$, $v_2 = e_1, \dots$.

Dimostrazione.

La (1.16) ha un significato molto trasparente. τ_1, \dots, τ_n sono i tempi macroscopici prima di τ in cui la particella urta. La velocità è perciò v_0 fino a τ_1 , v_1 da τ_1 a τ_2 e così via, con le v_i come nell'enunciato del teorema. Si ricordi infatti che stiamo considerando il caso con ostacoli solo di tipo 1. La posizione macroscopica della particella è allora data dalla espressione che appare nel primo argomento di ϕ nella (1.16). Rimane da calcolare il limite della probabilità di avere urti ai tempi τ_1, \dots, τ_n . Per l'omogeneità della distribuzione degli

ostacoli è ragionevole che i tempi d'urto siano uniformemente distribuiti, di qui l'integrale in $d\tau_1 \dots d\tau_n$. Poiché la probabilità di trovare un ostacolo è proporzionale a ρ si spiega anche il fattore ρ^n nella (1.16). Infine il primo termine $e^{-\rho\tau}$ si interpreta come il coefficiente di normalizzazione: ponendo infatti $\phi \equiv 1$ nella (1.16) si verifica che $\Gamma(\phi, \tau) = 1$, come deve essere poiché l'aspettazione sulla sinistra della (1.15) vale 1 per ogni valore di ϵ , se $\phi \equiv 1$.

La dimostrazione del teorema segue questa impostazione e si basa nel riconoscere nel membro di sinistra della (1.15), per ogni valore di ϵ , i termini analoghi a quelli descritti sopra e nel verificarne la convergenza nel limite $\epsilon \rightarrow 0$.

L'intera dimostrazione è resa semplice dall'ipotesi chiave che vi sia un solo tipo di ostacoli, nel caso in esame di tipo 1. A causa di questa assunzione, infatti, l'orbita (q_t, v_t) non ripassa mai per uno stesso sito, cioè $q_t \neq q_s$ se $s \neq t$. Infatti le velocità sono ad ogni istante e_1 o e_2 , inizialmente e_1 , e_2 dopo il primo urto, poi ancora e_1 e così via. La non auto-intersezione della traiettoria rende facile, come vedremo, il calcolo della probabilità di una traiettoria e quindi la verifica della (1.15).

Fissato $t = [\epsilon^{-1}\tau]$, indicherò con \mathcal{T} una qualunque delle possibili traiettorie (q_s, v_s) , $0 \leq s \leq t$, ricordando che $(q_0, v_0) = (0, e_1)$. Le possibili traiettorie \mathcal{T} sono in corrispondenza biunivoca con l'insieme $\{n; t_1, \dots, t_n\}$, dove n è un numero intero non negativo (minore di t) e t_i sono interi tali che $0 \leq t_1 < \dots < t_n \leq t - 1$. La corrispondenza tra \mathcal{T} e $\{n; t_1, \dots, t_n\}$ è stabilita interpretando n come numero di urti e t_i come l'istante in cui avviene l'iesimo urto. Infatti, se $v_{s+1} - v_s$ è diverso da 0, allora e solo allora s è un istante d'urto, quindi la conoscenza di \mathcal{T} specifica gli istanti d'urto nell'intervallo $[0, t - 1]$; viceversa la conoscenza degli istanti d'urto nell'intervallo $[0, t - 1]$ specifica ovviamente la traiettoria fino all'istante $t - 1$ e, specificando la velocità di uscita in q_{t-1} (in quanto fornisce l'informazione se all'istante $t - 1$ vi sia un urto) determina anche q_t e v_t . In particolare, perciò, q_t e v_t sono funzioni di $\{n; t_1, \dots, t_n\}$, esplicitamente

$$q_t = v_0 t_1 + v_1(t_2 - t_1) + \dots + v_n(t - t_n), \quad v_{2k} = e_1, \quad v_{2k+1} = e_2 \quad (1.17)$$

Il primo passo nella dimostrazione del Teorema 1.3.1 è la seguente uguaglianza:

$$E^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_t, v_t) \right) = \sum_{n \leq t} \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} (1 - \rho\epsilon)^{t-n} (\rho\epsilon)^n \phi(\epsilon q_t, v_t) \quad (1.18)$$

con q_t e v_t come nella (1.17).

La (1.18) ricorda chiaramente la (1.16) che sarà infatti ottenuta nel limite $\epsilon \rightarrow 0$. Si veda anche la spiegazione euristica della (1.16) all'inizio di questa dimostrazione.

Dimostrazione della (1.18)

La dimostrazione della (1.18) è quasi evidente per chi abbia familiarità con il calcolo delle probabilità, infatti $(\rho\epsilon)^n$ è la probabilità di avere ostacoli in n siti fissati. $(1 - \rho\epsilon)^{t-n}$ è la probabilità che non vi siano ostacoli in $(t - n)$ siti fissati. La somma su $t_1 \dots t_n$ corrisponde a sommare le probabilità di tutte le traiettorie che incontrano n ostacoli (entro t). Quello che segue è questo argomento con maggiori dettagli.

Se una configurazione di ostacoli \underline{b} produce una traiettoria \mathcal{T} , scriveremo $\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}$. Se $\mathcal{T} \neq \mathcal{T}'$, allora

$$\{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}\} \cap \{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}'\} = \emptyset$$

quindi possiamo organizzare la somma sulle configurazioni di ostacoli, sommando prima sulle traiettorie e poi su tutte le configurazioni che le producono:

$$\sum_{\underline{b}} = \sum_{\mathcal{T}} \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}}$$

Useremo questa formula per calcolare l'aspettazione (1.15), (si veda la (1.14)). $\phi(\epsilon q_t, v_t)$ è determinato univocamente da \mathcal{T} e non dalla particolare configurazione di ostacoli che produce \mathcal{T} . Si ha allora

$$E^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_t, v_t) \right) = \sum_{\mathcal{T}} \phi(\epsilon q_t, v_t) \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}} P^\epsilon(\underline{b}) \quad (1.19)$$

L'ultima somma è per definizione la probabilità della traiettoria \mathcal{T} .

Per calcolare la probabilità di \mathcal{T} è conveniente introdurre nuove rappresentazioni per \mathcal{T} . Iniziamo osservando che \mathcal{T} è in corrispondenza biunivoca con la sua parte spaziale $\{q_s; 0 \leq s \leq t\}$, in quanto le variazioni di direzione nella traiettoria determinano gli istanti d'urto (osservando che il primo urto avviene quando la traiettoria assume direzione verticale, in quanto $v_0 = e_1$ è la velocità subito prima dell'istante 0). Equivalentemente, \mathcal{T} è caratterizzata da $Q = \{q_s, 0 \leq s \leq t-1\}$ con in più il valore di $\underline{b}(q_{t-1})$, cioè se all'istante $t-1$ avvenga o meno un urto. Alternativamente, e questa sarà la rappresentazione che useremo nel seguito, le traiettorie \mathcal{T} , ovvero gli insiemi $\{n, t_1, \dots, t_n\}$, sono in corrispondenza biunivoca con gli insiemi $\{Q, (b^*(q))_{q \in Q}\}$, dove Q è come sopra e $(b^*(q))_{q \in Q}$ è la specificazione del valore degli ostacoli in Q , che, per quanto discusso precedentemente, è completamente determinata da Q , eccetto per l'ultimo sito.

Da quest'ultima caratterizzazione di \mathcal{T} se ne deduce che \mathcal{T} determina \underline{b} completamente in Q e solo in Q , la configurazione di ostacoli al di fuori di Q non influenza \mathcal{T} . In formule e indicando \mathcal{T} mediante $\{Q, (b^*(q))_{q \in Q}\}$,

$$\{\underline{b} : \underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}\} = \{\underline{b} : b(q) = b^*(q), \text{ per ogni } q \in Q\}$$

cioè l'insieme delle configurazioni di ostacoli che producono \mathcal{T} sono tutte e sole quelle che hanno i valori $b^*(q)$ in Q . Nel prossimo capitolo vedremo che questo è un esempio di insieme cilindrico: Q è la "base del cilindro, b^* la sua "specificazione".

Si ha quindi:

$$\begin{aligned} \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}} P^\epsilon(\underline{b}) &= \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}} \left\{ \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b(q)) \right\} \left\{ \prod_{q \notin Q} \pi^\epsilon(b(q)) \right\} \\ &= \left\{ \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) \right\} \left\{ \sum_{b(q), q \notin Q} \prod_{q \notin Q} \pi^\epsilon(b(q)) \right\} \end{aligned} \quad (1.20)$$

Invertendo la somma con il prodotto nell'ultimo termine si ha

$$\sum_{b(q), q \notin Q} \prod_{q \notin Q} \pi^\epsilon(b(q)) = \prod_{q \notin Q} \left\{ \sum_{b(q)} \pi^\epsilon(b(q)) \right\} = 1$$

poiché la parentesi graffa è, per ogni q , uguale a 1. Quindi la probabilità di un cilindro, quando la misura è prodotto, è il prodotto delle probabilità relative alla specificazione $b^*(q)$, $q \in Q$, si veda il Teorema 2.2.3.

Si ha perciò

$$\sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}} P^\epsilon(\underline{b}) = \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) = (1 - \rho\epsilon)^{t-n} (\rho\epsilon)^n \quad (1.21)$$

Ricordando che le traiettorie \mathcal{T} sono in corrispondenza biunivoca con le specificazioni n , t_1, \dots, t_n del numero di collisioni e degli istanti in cui avvengono, possiamo scrivere

$$\sum_{\mathcal{T}} = \sum_{n=0}^t \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n \leq t-1}$$

Abbiamo quindi completato la dimostrazione della (1.18) e della (1.17).

Proseguendo nella dimostrazione del teorema, indichiamo con $\|\phi\|_\infty$ il sup di ϕ che è per ipotesi finito. Allora la somma nella (1.18) è maggiorata dalla serie:

$$\begin{aligned} & \|\phi\|_\infty \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} (\rho\epsilon)^n \\ & \leq \|\phi\|_\infty \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{t_1=0}^t \dots \sum_{t_n=0}^t (\rho\epsilon)^n \leq \|\phi\|_\infty \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\epsilon\rho(t+1)]^n}{n!} \end{aligned}$$

Per calcolare il numero di ennuple t_1, \dots, t_n che appaiono nella somma si osserva che tale numero è uguale a $n!$ per il numero di ennuple non ordinate in $[0, t-1]$ composte da numeri distinti. Quest'ultimo è uguale a $t(t-1) \dots (t-n+1)$ [infatti possiamo scegliere t_1 in t modi, poi t_2 in $t-1$ modi e così via] ed è quindi maggiorato da t^n , che coincide con il numero di ennuple in $[0, t-1]$ composte da numeri non necessariamente distinti.

La serie è (in ϵ) uniformemente convergente, si ricordi che $t = \lceil \epsilon^{-1}\tau \rceil$. D'altra parte ogni termine della serie converge, infatti, fissato n ,

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^n \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} \phi(\epsilon q_{t_i}, v_{t_i}) &= \int_0^\tau d\tau_1 \dots \int_{\tau_{n-1}}^\tau d\tau_n \phi(v_0\tau_1 + \dots \\ &\quad \dots + v_n(\tau - \tau_n), v_n) \end{aligned}$$

L'espressione sulla sinistra è infatti, ricordando la (1.17), la somma di Riemann dell'integrale sulla destra. Inoltre, nella (1.18), per n fissato,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (1 - \rho\epsilon)^{t-n} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (1 - \rho\epsilon)^t = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (1 - \rho\epsilon)^{\epsilon^{-1}\tau} = e^{-\rho\tau}$$

Con una diversa rappresentazione del dominio d'integrazione, in cui si integra per primo τ_n , poi τ_{n-1} e così via, si ottiene l'espressione (1.16). Il Teorema è quindi dimostrato, poiché il limite della serie è uguale alla serie dei limiti, per l'uniforme convergenza provata precedentemente. \square

CAPITOLO 2

PROBABILITÀ IN SPAZI FINITI

Nel capitolo precedente ho usato nozioni di Calcolo delle Probabilità che ora formalizzerò nel contesto di spazi con un numero finito di elementi. Dopo aver ricordato alcune delle più importanti nozioni mi focalizzerò sul caso di maggior interesse in Meccanica Statistica, quello cioè degli spazi prodotto i cui elementi sono successioni con un numero finito di valori. Il modello di Ising, che studieremo nel Capitolo 8, ne è un classico esempio. Ma, mentre in Meccanica Statistica le misure significative sono quelle di Gibbs, qui considereremo il caso più semplice, ma comunque importante, di variabili indipendenti e misure prodotto. Dopo aver dimostrato la disuguaglianza di Chebishev, la useremo per provare la Legge dei Grandi Numeri.

2.1. Misure e Probabilità

Indicherò con Ω uno spazio con un numero finito di elementi, con ω il generico elemento di Ω e con $\mathcal{B}(\Omega)$ la famiglia di tutti i sottoinsiemi di Ω . (Nell'estensione a spazi con un numero infinito di elementi, $\mathcal{B}(\Omega)$ potrebbe non essere la collezione di tutti gli insiemi, nel caso di spazi Euclidei e misure di Lebesgue, \mathcal{B} è costituito dagli insiemi Boreliani).

Definizione 2.1.1. Una misura μ su Ω è una funzione a valori reali su $\mathcal{B}(\Omega)$, tale che $\mu(\emptyset) = 0$ e

$$\mu(A) = \sum_{\omega \in A} \mu(\omega), \quad \text{per ogni } A \in \mathcal{B}(\Omega) \quad (2.1)$$

(dove ω in $\mu(\omega)$ deve intendersi come elemento di $\mathcal{B}(\Omega)$).

Una misura μ a valori non negativi è una probabilità se

$$\mu(\Omega) = 1 \quad (2.2)$$

In tal caso gli elementi ω sono “gli eventi elementari”, gli insiemi A sono eventi, $\mu(A)$ è la probabilità che si verifichi l'evento A .

Dalla (2.1) discende la proprietà di additività delle misure, cioè

$$\mu\left(A_1 \cup \cdots \cup A_n\right) = \sum_{i=1}^n \mu(A_i), \quad \text{se } A_i \cap A_j = \emptyset \text{ per ogni } i \neq j \quad (2.3)$$

e la disuguaglianza

$$\mu(A) \geq \mu(B), \quad \text{se } B \subset A \quad (2.4)$$

Esempi

- Ω è un insieme di punti materiali ω di massa $\mu(\omega)$, talvolta pensati come una versione discretizzata di un fluido. $\mu(A)$ è allora la massa della parte A del fluido e le (2.3)-(2.4) sono evidenti conseguenze della positività della massa.
- Ω è uno spazio di eventi aleatori, per esempio $\Omega = \{1, \dots, 90\}$ è l'insieme delle possibili prime estrazioni in un dato giorno su una data ruota del lotto. Gli elementi di $\mathcal{B}(\Omega)$ sono "gli eventi e [se il gioco è onesto] $\mu(\omega) = 1/90$ (per ogni ω).

Si può scommettere sull'uscita di un numero (evento elementare) ma anche su un evento composto, per esempio sull'uscita di un numero pari, $A = \{2, 4, \dots, 88, 90\}$, la cui probabilità è la somma delle probabilità degli eventi elementari che lo compongono, quindi $\mu(\{\text{esce un numero pari}\}) = 1/2$.

Teorema 2.1.2 (La disuguaglianza di Chebishev). *Siano a e κ numeri positivi, allora*

$$\mu(\{f \geq a\}) \leq a^{-\kappa} E_\mu(|f|^\kappa) \quad (2.5)$$

Dimostrazione.

$$\mu(\{f \geq a\}) = \sum_{\omega: f(\omega) \geq a} \mu(\omega) \leq \sum_{\omega: f(\omega) \geq a} \mu(\omega) \frac{f(\omega)^\kappa}{a^\kappa} \leq \sum_{\omega \in \Omega} \mu(\omega) \frac{|f(\omega)|^\kappa}{a^\kappa}$$

da cui la (2.5). □

Usando la disuguaglianza di Chebishev per $|f|$ invece che per f otteniamo un miglioramento della (2.5):

$$\mu(\{|f| \geq a\}) \leq a^{-\kappa} E_\mu(|f|^\kappa) \quad (2.6)$$

2.2. Spazi prodotto

In questa sezione studieremo il caso in cui $\Omega = S^I$, con S e I insiemi di cardinalità finita. Ω è dunque il prodotto di I copie dello spazio S ; i suoi elementi s_I sono successioni indicizzate dall'indice $i \in I$ con valori in S :

$$s_I = \{s_I(i), i \in I\}, \quad s_I(i) \in S \quad (2.7)$$

Esempi

- $\Omega = \{b(q), q \in \Lambda_\epsilon\}$, lo spazio delle configurazioni di ostacoli nel quadrato Λ_ϵ di \mathbb{Z}^2 ; $S = \{0, 1, 2\}$ e $I = \Lambda_\epsilon$.
- Il modello di Ising, $S = \{-1, 1\}$ e $I = \Lambda$, Λ un insieme finito in \mathbb{Z}^d . Quindi $\Omega = \{\sigma_\Lambda(x), x \in \Lambda\}$, $\sigma_\Lambda(x)$ è lo spin in x (momento magnetico, orientato verso l'alto se lo spin vale $+1$ e verso il basso se vale -1). σ_Λ è la configurazione di spin in Λ .
- Gioco del lotto e lancio di una moneta: $S = \{1, \dots, 90\}$ nel primo caso e $S = \{T, C\}$ (testa e croce) nel secondo; in entrambi I è l'insieme delle estrazioni o dei lanci che si vogliono considerare.

Definizione 2.2.1 (Insiemi cilindrici). *Sia $A \subset I$ e $s_A^* = \{s^*(i), i \in I\}$, $s^*(i) \in S$. L'insieme*

$$C_{\{A\}}^{\{s_A^*\}} := \left\{ s_I : s_I(i) = s^*(i) \quad \text{per ogni } i \in A \right\} \quad (2.8)$$

è un cilindro elementare, A la sua “base”, s_A^ la corrispondente “specificazione”. Un cilindro di base A è unione di cilindri elementari tutti di base A .*

Una funzione $f(s_I)$ è cilindrica con base A se f è costante su ogni cilindro $C_{\{A\}}^{\{s_A^\}}$, ovvero se l'immagine inversa dei punti del suo codominio sono cilindri di base A .*

Esempi

- La terminologia viene dal caso in cui $S = \mathbb{R}$, $I = \{1, 2, 3\}$. Ω è allora l'usuale spazio Euclideo \mathbb{R}^3 , interpretando $1, 2, 3$ come x, y, z . L'insieme $C_{\{1\}}^{\{s_1^*\}}$ è il piano yz che passa per il punto dell'asse x di ascissa s_1^* . $C_{\{1,2\}}^{\{s_1^*, s_2^*\}}$ è la retta verticale che interseca il piano xy nel punto di coordinate (s_1^*, s_2^*) . Un esempio di cilindro non elementare è l'usuale cilindro di \mathbb{R}^3 di raggio 1 e di asse l'asse z : $C = \{s_I : s_I(1)^2 + s_I(2)^2 = 1\}$. C è l'unione di tutti i cilindri elementari fatti dalle rette verticali che intersecano il piano xy nei punti della circonferenza di raggio 1 e centro 0.
- Con riferimento al gas di Lorentz, l'insieme delle configurazioni di ostacoli in cui in 0 vi è un ostacolo di tipo 1 è un esempio di insieme cilindrico. Più in generale, la base del cilindro è l'insieme dei siti dove si specifica il valore degli ostacoli. Abbiamo dimostrato nel capitolo precedente che una traiettoria \mathcal{T} è in realtà un insieme cilindrico la cui base e specificazione sono determinate da \mathcal{T} .
- Un esempio di funzione cilindrica di interesse fisico è, nel contesto del modello di Ising, la densità di magnetizzazione in un sottoinsieme Δ della regione Λ in cui il modello è definito:

$$m_\Delta(\sigma_\Lambda) = \frac{1}{|\Delta|} \sum_{x \in \Delta} \sigma_\Lambda(x)$$

Un ruolo significativo nello studio della probabilità in spazi prodotto è giocato dalle misure prodotto:

Definizione 2.2.2 (Misure prodotto). *Una probabilità μ su S^I è una “misura prodotto” con marginale π , se π è una misura di probabilità su S e se per ogni configurazione $s_I = \{s_I(i), i \in I\}$,*

$$\mu(s_I) = \prod_{i \in I} \pi(s_I(i)) \quad (2.9)$$

Teorema 2.2.3. *Se μ è una misura prodotto con marginale π per ogni A e per ogni s_A*

$$\mu(C_A^{s_A}) = \prod_{i \in A} \pi(s_A(i)) \quad (2.10)$$

e per ogni funzione cilindrica f con base A , identificando $f(s_I) = f(s_A)$,

$$E_\mu(f) = \sum_{s_A} f(s_A) \prod_{i \in A} \pi(s_A(i)) \quad (2.11)$$

Dimostrazione.

Si ha

$$\mu(C_A^{s_A}) = \sum_{s'_I} \mathbf{1}_{s'_I(i)=s_A(i), i \in A} \prod_j \pi(s'_I(j))$$

Sommando successivamente su tutti gli $s'_I(j)$ con $j \notin A$ si ottiene la (2.10), la (2.11) è dimostrata analogamente. \square

Si osservi che, come conseguenza delle (2.10) e (2.11), se A e B sono insiemi disgiunti in I e s_A e s_B sono elementi in S^A e S^B ,

$$\mu(C_A^{s_A} \cap C_B^{s_B}) = \mu(C_A^{s_A}) \mu(C_B^{s_B}) \quad (2.12)$$

e se f e g sono funzione cilindriche con basi A e B disgiunte

$$E_\mu(fg) = E_\mu(f) E_\mu(g) \quad (2.13)$$

In una misura prodotto, perciò, gli eventi cilindrici con basi disgiunte sono indipendenti, in generale due eventi A e B sono indipendenti rispetto alla misura di probabilità μ se

$$\mu(A \cap B) = \mu(A) \mu(B) \quad (2.14)$$

ovvero se la probabilità di A condizionata a B , $\mu(A|B)$ è uguale a alla probabilità di A , $\mu(A|B) = \mu(A)$ avendo posto:

Definizione 2.2.4 (Probabilità condizionata). *Se $\mu(B) > 0$, la probabilità di A condizionata a B è*

$$\mu(A|B) := \frac{\mu(A \cap B)}{\mu(B)} \quad (2.15)$$

A e B sono indipendenti se $\mu(A|B) = \mu(A)$.

Si noti che la nozione di indipendenza è simmetrica in A e B : infatti se $\mu(A|B) = \mu(A)$ si ha anche $\mu(B|A) = \mu(B)$. Inoltre se $\{B_1, \dots, B_n\}$ è una partizione di Ω in insiemi disgiunti, “atomi”, allora, per ogni insieme A

$$\mu(A) = \sum_{i=1}^n \mu(B_i) \mu(A|B_i) \quad (2.16)$$

con la convenzione che

$$\mu(B_i) \mu(A|B_i) = 0 \text{ se } \mu(B_i) = 0$$

Frequenze e legge dei grandi numeri

Ad ogni elemento s_I di S^I possiamo associare la frequenza con cui appare un dato valore $s \in I$ e quindi una probabilità $\nu = \nu_{s_I}$ su S mediante la formula

$$\nu_{s_I}(s) = \frac{1}{|I|} \sum_{i \in I} \mathbf{1}_{s_I(i)=s} \quad (2.17)$$

dove $|I|$ è la cardinalità di I e $\mathbf{1}_{s_I(i)=s}$ è la funzione che vale 1 se $s_I(i) = s$ e 0 altrimenti. La misura $\nu_{s_I}(s)$ è quindi la media empirica o frequenza di s nella “realizzazione s_I ”. Sia ora μ una misura prodotto con marginale π . È “ben noto” che se I ha “molti” elementi allora le misure ν_{s_I} e π sono “essenzialmente” uguali. L’enunciato preciso è la legge dei grandi numeri:

Teorema 2.2.5 (Legge dei grandi numeri). *Sia π una misura su S . Esiste allora una costante $c > 0$ tale che per ogni I , $\delta > 0$ e $s \in S$, indicando con μ la misura prodotto su S^I con marginale π ,*

$$\mu\left(\left\{s_I : |\nu_{s_I}(s) - \pi(s)| > \delta\right\}\right) \leq c\delta^{-2}|I|^{-1} \quad (2.18)$$

Dimostrazione.

Chiamiamo $I = \{1, \dots, N\}$, osservando che

$$\nu_{s_I}(s) - \pi(s) = \frac{1}{N} \sum_{i \in I} \mathbf{1}_{s(i)=s} - \pi(s) = \frac{1}{N} \sum_{i \in I} \{\mathbf{1}_{s(i)=s} - \pi(s)\}$$

Usando la disuguaglianza di Chebishev con $\kappa = 2$, ci si riduce allora al calcolo dell’aspettazione di

$$\frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j \in I} [\mathbf{1}_{s(i)=s} - \pi(s)][\mathbf{1}_{s(j)=s} - \pi(s)] + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N [\mathbf{1}_{s(i)=s} - \pi(s)]^2 \quad (2.19)$$

Quando $i \neq j$ usiamo la (2.11) per concludere

$$E_\mu\left([\mathbf{1}_{s(i)=s} - \pi(s)][\mathbf{1}_{s(j)=s} - \pi(s)]\right) = 0$$

mentre

$$E_\mu\left([\mathbf{1}_{s(i)=s} - \pi(s)]^2\right) = \pi(s)[1 - \pi(s)]^2 + [1 - \pi(s)]\pi(s)^2$$

Abbiamo perciò ottenuto la (2.18) con $c = \pi(s)[1 - \pi(s)]$. □

CAPITOLO 3

EQUAZIONE LINEARE DI BOLTZMANN

In questo capitolo completeremo l'analisi del limite macroscopico del gas di Lorentz, iniziata col Teorema 1.3.1, calcolando, il limite della densità di probabilità di un generico stato (r, v) al tempo τ . Si vedrà che tale densità limite, $F_\tau(r, v)$, è soluzione di una versione lineare della equazione di Boltzmann, che si identifica quindi come l'equazione che regola l'evoluzione macroscopica del gas di Lorentz.

3.1. Dati iniziali aleatori

Nel contesto del Teorema 1.3.1, la probabilità di trovare la particella al tempo t in (q, v) è

$$P^\epsilon(\{q_t = q, v_t = v\}) = \sum_{\underline{b}: T_t(\underline{b}, 0, e_1) = (q, v)} P^\epsilon(\underline{b}) \quad (3.1)$$

avendo indicato con $T_t(\underline{b}, q, v)$ lo stato al tempo t quando la particella è al tempo 0 in (q, v) e la configurazione di ostacoli è \underline{b} . La corrispondente densità di probabilità è

$$\epsilon^{-2} P^\epsilon(\{q_t = q, v_t = v\})$$

in quanto ϵ^2 è il volume, in unità macroscopiche, della cella unitaria del reticolo \mathbb{Z}^2 .

Come detto nell'introduzione a questo capitolo, siamo interessati al limite di questa densità di probabilità per $\epsilon \rightarrow 0$, tenendo fisso lo stato macroscopico (r, v) della particella e il tempo macroscopico τ , vogliamo perciò studiare il limite di

$$\rho_\tau^\epsilon(r, v) = \epsilon^{-2} P^\epsilon(\{q_{[\epsilon^{-1}\tau]} = [\epsilon^{-1}r], v_{[\epsilon^{-1}\tau]} = v\}) \quad (3.2)$$

dove $[\epsilon^{-1}r]$ è il vettore in \mathbb{Z}^2 le cui componenti sono le parti intere delle componenti di $\epsilon^{-1}r$; analogamente $[\epsilon^{-1}\tau]$ è la parte intera di $\epsilon^{-1}\tau$.

Purtroppo il limite di $\rho_\tau^\epsilon(r, v)$ non esiste; l'affermazione è evidente per $\tau = 0$ dove

$$P^\epsilon(\{q_0 = q, v_0 = v\}) = \begin{cases} 1 & \text{se } (q, v) = (0, e_1) \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Quindi $\rho_0^\epsilon(r, v) \rightarrow \infty$ se $(r, v) = (0, e_1)$ e a 0 altrimenti. È vero che il risultato si potrebbe leggere dicendo che $\rho_\tau^\epsilon(r, v)$ converge ad una delta di Dirac, ma volendo rimanere nell'ambito delle funzioni regolari, non possiamo che concludere che $\rho_\tau^\epsilon(r, v)$ non converge. Le cose

non si aggiustano escludendo $\tau = 0$, infatti la patologia persiste anche per $\tau > 0$, come si potrebbe vedere usando l'argomento presentato più avanti, dopo la (3.5).

Il limite di $\rho_\tau^\epsilon(r, v)$ considerato sinora “è un limite forte”. Si può sperare in meglio considerando limiti deboli, quindi non richiedendo più una convergenza puntuale, ma solo convergenza di integrali di $\rho_\tau^\epsilon(r, v)$ con funzioni test:

$$\sum_v \int dr \rho_\tau^\epsilon(r, v) \phi(r, v) \quad (3.3)$$

Trascurando le variazioni di $\phi(r, v)$ in una celletta del reticolo (si può dimostrare che ciò è lecito nel limite $\epsilon \rightarrow 0$) dovremo quindi studiare il limite di

$$\sum_{q,v} \epsilon^2 \rho_\tau^\epsilon(\epsilon q, v) \phi(\epsilon q, v) = \sum_{q,v} \phi(\epsilon q, v) P^\epsilon(\{q_t = q, v_t = v\}) \quad (3.4)$$

Infatti il fattore divergente ϵ^{-2} nella (3.2) si compensa con il fattore di volume ϵ^2 , dando luogo all'ultima espressione nella (3.4). Il limite della (3.4) è proprio quello considerato nel Teorema 1.3.1, dove si dimostra che è uguale $\Gamma(\phi, \tau)$. Se $\Gamma(\phi, \tau)$ avesse la forma

$$\Gamma(\phi, \tau) = \sum_v \int dr F_\tau(r, v) \phi(r, v) \quad (3.5)$$

allora, per confronto con la (3.3), sarebbe naturale interpretare $F_\tau(r, v)$ come la densità di probabilità dello stato (r, v) al tempo τ , a limite macroscopico effettuato. Diremmo allora che ρ_τ^ϵ “converge in senso debole” alla densità $F_\tau(r, v)$.

Sfortunatamente neanche questo tentativo ha successo: la rappresentazione (3.5) infatti non è valida nella situazione in esame. Basta infatti considerare il primo termine, $n = 0$, della somma (1.16), che è uguale a $e^{-\rho\tau} \phi(e_1\tau, e_1)$. Se volessimo rappresentarlo come nell'espressione a destra della (3.5), avremmo una misura concentrata sullo stato $(e_1\tau, e_1)$, quindi con “densità infinita” in $(e_1\tau, e_1)$. Gli altri termini della somma sono un po' “meno”, ma comunque, singolari, come si vedrà nella sezione di esercizi. Come nel caso della convergenza forte l'origine delle difficoltà è tutta nel dato iniziale che è fortemente singolare. Benché la distribuzione degli ostacoli sia aleatoria, la dinamica non è sufficientemente stocastica per regolarizzare la singolarità iniziale. Lo stato nel limite $\epsilon \rightarrow 0$ rimane infatti singolare e non descrivibile in termini di una densità $F_\tau(r, v)$, anche se non è più concentrato su un singolo stato microscopico.

Le patologie scompaiono se consideriamo stati iniziali aleatori. Richiediamo dunque che a $\tau = 0$ lo stato macroscopico sia descritto da una densità di probabilità $F_0(r, v)$, che si suppone appunto non negativa, regolare, per ogni $v \in \mathcal{V}$, e a supporto compatto. Dovendo essere una densità di probabilità si deve avere

$$\sum_{v \in \mathcal{V}} \int dr F_0(r, v) = 1 \quad (3.6)$$

(in quanto la probabilità totale è 1).

Volendo ottenere F_0 nel limite $\epsilon \rightarrow 0$, si può scegliere come probabilità dello stato iniziale (q, v) quando $\epsilon > 0$,

$$Q^\epsilon(q, v) = c_\epsilon \epsilon^2 F_0(\epsilon q, v) \quad (3.7)$$

con c_ϵ la costante di normalizzazione:

$$c_\epsilon \sum_{q,v} \epsilon^2 F_0(\epsilon q, v) = 1 \quad (3.8)$$

Poiché la somma nella (3.8) è una somma di Riemann relativa all'integrale nella (3.6), se ne deduce che $c_\epsilon \rightarrow 1$ per $\epsilon \rightarrow 0$.

La densità di probabilità $\rho_0^\epsilon(r, v)$ è uguale a $\epsilon^{-2} Q^\epsilon([\epsilon^{-1}r], v)$ e poiché $c_\epsilon \rightarrow 1$,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-2} Q^\epsilon([\epsilon^{-1}r], v) = F_0(r, v) \quad (3.9)$$

La densità di probabilità al tempo 0 converge quindi in senso forte alla densità $F_0(r, v)$.

La convergenza è anche debole: infatti se $\phi(r, v)$ è una funzione test,

$$E_{Q^\epsilon}(\phi(\epsilon q, v)) \equiv \sum_{q,v} Q^\epsilon(q, v) \phi(\epsilon q, v) = \sum_{q,v} c_\epsilon \epsilon^2 F_0(\epsilon q, v) \phi(\epsilon q, v)$$

L'ultimo termine, a meno del fattore moltiplicativo c_ϵ , (che tende a 1) è una somma di Riemann. Si ha quindi

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} E_{Q^\epsilon}(\phi(\epsilon q, v)) = \sum_v \int dr F_0(r, v) \phi(r, v) \quad (3.10)$$

Abbiamo dunque scelto la probabilità $Q^\epsilon(q, v)$ dello stato iniziale, la distribuzione degli ostacoli $P^\epsilon(\underline{b})$ è la stessa che nel Capitolo 1, rimane dunque da definire la probabilità congiunta degli ostacoli e dello stato iniziale. Noi faremo l'ipotesi di "caos iniziale", ipotesi che ha un ruolo essenziale in questa trattazione e nell'analisi di limiti cinetici in generale. L'ipotesi consiste nel supporre che le configurazioni di ostacoli e gli stati iniziali della particella, siano tra loro indipendenti. Lo spazio è adesso l'insieme degli elementi $\{\underline{b}, q, v\}$, cioè una configurazione di ostacoli e uno stato iniziale, e la probabilità \mathcal{P}^ϵ in questo spazio è, per l'ipotesi di indipendenza,

$$\mathcal{P}^\epsilon((\underline{b}, q, v)) = P^\epsilon(\underline{b}) Q^\epsilon(q, v) \quad (3.11)$$

L'aspettazione relativa a \mathcal{P}^ϵ sarà indicata con \mathcal{E}^ϵ , il valore medio dell'osservabile macroscopica ϕ è quindi

$$\mathcal{E}^\epsilon(\phi(\epsilon q_t, v_t)) = \sum_{(q,v)} \sum_{\underline{b}} Q^\epsilon(q, v) P^\epsilon(\underline{b}) \phi(\epsilon q_t, v_t) \quad (3.12)$$

dove $(q_t, v_t) = T_t(\underline{b}, q, v)$, $t \geq 0$, è una variabile aleatoria nello spazio $\{\underline{b}, q, v\}$, facciamo riferimento alle notazioni introdotte in (1.11).

Teorema 3.1.1. *Per ogni funzione test ϕ e per ogni $\tau \geq 0$, ponendo $t = [\epsilon^{-1}\tau]$ (la parte intera di $\epsilon^{-1}\tau$) si ha:*

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_t, v_t) \right) &= \sum_{v_0 \in \mathcal{V}} \int dr F_0(r, v_0) e^{-\rho\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \int_0^\tau d\tau_n \cdots \\ &\cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \phi \left(r + v_0\tau_1 + \cdots + v_n(\tau - \tau_n), v_n \right) \mathbf{1}_{v_1=v_0^\perp, \dots, v_n=v_{n-1}^\perp} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Il limite nella (3.13) può essere riscritto come

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_t, v_t) \right) = \sum_{v \in \mathcal{V}} \int dr F_\tau(r, v) \phi(r, v) \quad (3.14)$$

con

$$\begin{aligned} F_\tau(r, v) &= e^{-\rho\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \int_0^\tau d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 F_0 \left(r - v_0\tau_1 - \cdots \right. \\ &\left. \cdots - v_n(\tau - \tau_n), v_0 \right) \mathbf{1}_{v_n=v, v_{n-1}=v_n^\perp, \dots, v_0=v_1^\perp} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Infine, indicando con $[\epsilon^{-1}r]$, $r \in \mathbb{R}^2$, il vettore in \mathbb{Z}^2 le cui componenti sono le parti intere delle componenti di $\epsilon^{-1}r$, si ha, per ogni (r, v) e $\tau \geq 0$,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-2} \mathcal{P}^\epsilon \left(\{q_t = [\epsilon^{-1}r], v_t = v\} \right) = F_\tau(r, v) \quad (3.16)$$

Dimostrazione.

La dimostrazione delle (3.13) è simile a quella delle (1.15)-(1.16). Si parte dall'identità

$$\mathcal{E}^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_t, v_t) \right) = \sum_{q_0, v_0} Q^\epsilon(q_0, v_0) \sum_{\underline{b}} P^\epsilon(\underline{b}) \phi(\epsilon q_t(\underline{b}, q_0, v_0), v_t(\underline{b}, q_0, v_0))$$

avendo posto $(q_t(\underline{b}, q_0, v_0), v_t(\underline{b}, q_0, v_0)) = T_t(\underline{b}, q_0, v_0)$.

Procedendo come nella dimostrazione del Teorema 1.3.1, introduciamo le traiettorie \mathcal{T} , che, noti q_0 e v_0 , sono ancora caratterizzate dal numero di urti n e dai tempi d'urto t_1, \dots, t_n . Dati questi parametri si definisce infatti

$$q_t = q_t(q_0, v_0, t_1, \dots, t_n) = q_0 + v_0 t_1 + v_1(t_1 - t_0) + \cdots + v_n(t - t_n)$$

con le v_i come nell'enunciato del presente teorema; indicheremo anche $v_t(n, v_0) = v_n$. Si ha allora, usando queste notazioni,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_t, v_t) \right) &= \\ &\sum_{n \leq t} (1 - \rho\epsilon)^{t-n} (\rho\epsilon)^n \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} \sum_{q_0, v_0} Q^\epsilon(q_0, v_0) \phi \left(\epsilon q_t(q_0, v_0, t_1, \dots, t_n), v_t(v_0, n) \right) \end{aligned}$$

La serie in n è maggiorata esattamente come nel Teorema 1.3.1 e possiamo quindi fare il limite termine a termine, ottenendo così la (3.13).

Per dimostrare le (3.14)-(3.15) basta fare un cambio di variabili nella (3.13). Per il limite di $\mathcal{E}^\epsilon(\phi(\epsilon q_t, v_t))$, si ottiene allora l'espressione

$$e^{-\rho\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \sum_{v_0} \int dr \phi(r, v_n) \int_0^\tau d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 F_0 \left(r - v_0\tau_1 - \cdots \right. \\ \left. \cdots - v_n(\tau - \tau_n), v_0 \right) \mathbf{1}_{v_1=v_0^\perp, \dots, v_n=v_{n-1}^\perp} \quad (3.17)$$

Per ogni n la corrispondenza tra v_0 e v_n è biunivoca, possiamo quindi sommare su v_n invece che su v_0 , ottenendo così la (3.14) con $F_\tau(r, v)$ dato dalla (3.15).

Dimostriamo infine la (3.16). Indico con $T_t(\underline{b}, q, v)$ la terna $(\underline{b}, q_t, v_t)$ con (q_t, v_t) lo stato evoluto per un tempo $t > 0$ a partire dallo stato (q, v) al tempo 0, quando la configurazione degli ostacoli è \underline{b} . $T_{-t}(\underline{b}, q, v)$, $t > 0$, indica l'inversa della $T_t(\underline{b}, q, v)$, e, per la reversibilità del moto,

$$T_{-t}(\underline{b}, q, v) = R\hat{T}_t R(\underline{b}, q, v) \quad (3.18)$$

dove $R(\underline{b}, q, v) = (\underline{b}, q, -v)$ è l'operazione di inversione della velocità; $\hat{T}_t(\underline{b}, q, v)$ è il moto in avanti nel tempo, in cui però la convenzione sulle velocità agli istanti d'urto è opposta a quella usata sinora: v_t è la velocità uscente invece di quella entrante, agli istanti t di collisione, per questo ho introdotto il nuovo simbolo \hat{T}_t .

Ciò posto, abbiamo

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^\epsilon \left(\{q_t = q^*, v_t = v^*\} \right) &= \sum_{q, v} c_\epsilon \epsilon^2 F_0(\epsilon q, v) \sum_{\underline{b}} P^\epsilon(\underline{b}) \mathbf{1}_{T_t(\underline{b}, q, v) = (q^*, v^*)} \\ &= c_\epsilon \epsilon^2 \sum_{\underline{b}} P^\epsilon(\underline{b}) \sum_{q, v} \mathbf{1}_{T_{-t}(\underline{b}, q^*, v^*) = (q, v)} F_0(\epsilon q, v) \\ &= c_\epsilon \epsilon^2 \sum_{\underline{b}} P^\epsilon(\underline{b}) \sum_{q, v} \mathbf{1}_{\hat{T}_t(\underline{b}, q^*, -v^*) = (q, -v)} F_0(\epsilon q, v) \end{aligned} \quad (3.19)$$

A parte il prefattore $c_\epsilon \epsilon^2$ l'ultimo termine è l'aspettazione della osservabile macroscopica $F_0(r, v)$ al tempo t , ma con l'evoluzione \hat{T}_t . Per questa vale l'analogo del Teorema 1.3.1 e, ricordando che $c_\epsilon \rightarrow 1$, otteniamo

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-2} \mathcal{P}^\epsilon \left(\{q_t = [\epsilon^{-1}r], v_t = v\} \right) = e^{-\rho\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \sum_{v_0} \int_0^\tau d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 F_0 \left(r - v_0\tau_1 - \cdots \right. \\ \left. \cdots - v_n(\tau - \tau_n), v_n \right), \quad v_0 = v, \quad v_1 = v^\perp, \dots$$

Quest'ultima espressione si trasforma nella (3.15) con il cambio di variabili

$$\tau'_1 = \tau - \tau_n, \quad \tau'_2 = \tau - \tau_{n-1}, \dots, \tau'_n = \tau - \tau_1; \quad v'_0 = v_n, \quad v'_1 = v_{n-1}, \dots, v'_n = v_0$$

Il Teorema 3.1.1 è dimostrato. \square

3.2. Identificazione del limite

Vedremo ora che la $F_\tau(r, v)$ è soluzione di una equazione alle derivate parziali, che quindi si interpreta come l'equazione di evoluzione [macroscopica] del gas di Lorentz. L'equazione si ottiene semplicemente calcolando la derivata rispetto al tempo della (3.15):

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_\tau(r, v)}{\partial \tau} = & -\rho F_\tau(r, v) - v \nabla_r F_\tau(r, v) \\ & + e^{-\rho \tau} \sum_{n=1}^{\infty} \rho^n \int_0^\tau d\tau_{n-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 F_0 \left(r - v_0 \tau_1 - \dots \right. \\ & \left. \dots - v_{n-1}(\tau - \tau_{n-1}), v_0 \right) \mathbf{1}_{v_n=v, v_{n-1}=v_n^\perp, \dots, v_0=v_1^\perp} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Poiché v_n appare solo nella funzione caratteristica, possiamo riscrivere quest'ultima come

$$\mathbf{1}_{v_{n-1}=v^\perp, \dots, v_0=v_1^\perp}$$

e quindi l'ultimo termine nella (3.20) è uguale a $\rho F_\tau(r, v^\perp)$. Abbiamo perciò dimostrato che

$$\frac{\partial F_\tau(r, v)}{\partial \tau} + v \nabla_r F_\tau(r, v) = \rho F_\tau(r, v^\perp) - \rho F_\tau(r, v) \quad (3.21)$$

In Meccanica dei Continui l'espressione sulla sinistra nella (3.21) è chiamata “la derivata sostanziale” di F_τ , quella sulla destra è “il termine di collisione”.

Presenterò adesso una derivazione assiomatica della (3.21), come in Meccanica dei Continui. Poiché abbiamo una deduzione rigorosa, il procedimento è solo inteso a chiarire il tipo di ragionamenti che si utilizzano e che userò anche io nel seguito, in casi in cui mancherà il supporto di vere dimostrazioni, o perché troppo complesse o perché non esistenti.

Sia dunque Λ una regione regolare e limitata di \mathbb{R}^2 . Per ogni $v \in \mathcal{V}$ e $\tau \geq 0$ la derivata della probabilità che la particella sia nella regione Λ al tempo τ con velocità v è

$$\frac{d}{d\tau} \int_{\Lambda} dr F_\tau(r, v) \quad (3.22)$$

Un contributo alla (3.22) viene dal termine di trasporto nella (3.21), che è il secondo nel membro di sinistra. Questo contributo alla (3.22) tiene conto di eventi in cui la particella è in Λ al tempo τ con velocità v ma ne esce, senza urtare, nell'intervallo $[\tau, \tau + d\tau]$, si veda la Fig.3.1. Vi è anche un analogo termine che corrisponde a situazioni in cui la particella ha velocità v al tempo τ ed è fuori di Λ , ma vi entra, senza urtare, tra τ e $\tau + d\tau$. Per calcolare questi termini, chiamiamo $n(r)$ il versore normale alla “superficie” $\partial\Lambda$ in r orientato verso l'esterno di Λ . Sia r tale che $v \cdot n(r) \geq 0$ e $d\ell$ l'elemento di lunghezza su $\partial\Lambda$, allora la probabilità di uscire attraverso $d\ell$ da Λ nel tempo $d\tau$ è

$$F_\tau(r, v)[v \cdot n(r)d\tau d\ell]$$

La parentesi quadra è infatti il volumetto nello spazio delle fasi che esce da Λ attraverso $d\ell$ nel tempo $d\tau$ e F_τ la densità di probabilità. Analogo argomento può essere ripetuto per il

flusso entrante, cioè quando $v \cdot n(r) \leq 0$ ottenendosi, complessivamente, che il contributo alla (3.22) dovuto al flusso attraverso $\partial\Lambda$ è

$$- \int_{\partial\Lambda} d\ell F_\tau(r, v) v \cdot n(r) \quad (3.23)$$

Nel “derivare” la (3.23) ho trascurato le collisioni, il motivo è che nell’argomento risulta coinvolta una regione superficiale in cui quindi la quantità di ostacoli è trascurabile. Ciò non è più vero quando se ne considera l’effetto in tutta la regione Λ . La probabilità che la particella venga deflessa da un ostacolo che si trova in x nell’intervallo di tempo $[\tau, \tau + d\tau]$ è allora dell’ordine di $\epsilon^2 F_\tau(\epsilon x, v) |v| \epsilon^{-1} d\tau$. Infatti per urtare in x entro $\tau + d\tau$, la particella al tempo τ dovrà trovarsi in uno dei siti dell’intervallo tra x e $x - v\epsilon^{-1}d\tau$, lungo l’asse coordinato parallelo a v , (supponendo che non vi siano altri ostacoli in questi siti, la cui probabilità è di ordine superiore). Trascurando, per lo stesso motivo, anche le variazioni di F , si ottiene infine il termine voluto, $\epsilon^2 F_\tau(\epsilon x, v) |v| \epsilon^{-1} d\tau$.

La probabilità che l’ostacolo sia in x è $\rho\epsilon$, perciò la probabilità complessiva dell’evento, assumendo che particella ed ostacoli siano non correlati, è il prodotto delle probabilità, quindi $\rho\epsilon^2 F_\tau(\epsilon x, v) |v| d\tau$. Sommando sugli x tali che $\epsilon x \in \Lambda$, ricordando che $|v| = 1$, identificando la somma su x , moltiplicata per ϵ^2 , con l’integrale in dr , otteniamo allora il termine

$$- \int_{\Lambda} dr \rho F_\tau(r, v)$$

Il segno meno deriva dal fatto che questi urti causano una diminuzione della probabilità di trovare la particella in Λ .

Vi è un termine analogo di guadagno, $\rho\epsilon^2 F_\tau(\epsilon x, v^\perp) |v^\perp| d\tau$ che corrisponde agli urti in Λ in cui la velocità entrante è v^\perp e quindi quella uscente è v . In totale perciò

$$\frac{d}{d\tau} \int_{\Lambda} dr F_\tau(r, v) = - \int_{\partial\Lambda} d\ell F_\tau(r, v) v \cdot n(r) + \int_{\Lambda} dr \rho [F_\tau(r, v^\perp) - F_\tau(r, v)] \quad (3.24)$$

Per il teorema della divergenza (la formula (3.15) assicura la necessaria regolarità) possiamo ridurre l’integrale superficiale ad un integrale di volume, ottenendo

$$\int_{\Lambda} dr \left\{ \frac{\partial F_\tau(r, v)}{\partial \tau} + \nabla \cdot v F_\tau(r, v) - \rho [F_\tau(r, v^\perp) - F_\tau(r, v)] \right\} = 0 \quad (3.25)$$

Per l’arbitrarietà di Λ e poiché l’integrando è continuo, se ne deduce che esso deve essere identicamente nullo, si è perciò “ricavata” la (3.21). Si noti infatti che la divergenza di $v F_\tau$, cioè il termine $\nabla \cdot v F_\tau(r, v)$, è uguale al prodotto scalare di v con il gradiente di F_τ , cioè $v \cdot \nabla F_\tau(r, v)$.

Il termine “derivata sostanziale” fa riferimento ad una “derivata totale rispetto al tempo” della $F_\tau(r, v)$, in cui si calcola la variazione della probabilità in un punto seguendolo nel suo moto libero. Un “osservatore lagrangiano”¹ è, in generale, un osservatore che si muove con la velocità del “fluido” (in questo caso il fluido è rappresentato dalla densità di probabilità $F_\tau(r, v)$). La coordinata lagrangiana r corrisponde al tempo τ alla coordinata

¹L’osservatore fisso è detto “euleriano” e le corrispondenti coordinate, euleriane.

Euleriana $r + v\tau$, (se il fluido ha velocità v e si trascurano gli urti). La densità in coordinate lagrangiane è quindi, per definizione,

$$G_\tau(r, v) := F_\tau(r + v\tau, v) \quad (3.26)$$

La derivata sostanziale $dF_\tau/d\tau$ di F_τ è definita come la derivata parziale di G_τ rispetto al tempo: per ogni $r \in \mathbb{R}^2$,

$$\frac{dF_\tau(r, v)}{d\tau} = \frac{\partial F_\tau(r, v)}{\partial \tau} + v \cdot \nabla_r F_\tau(r, v) \quad (3.27)$$

L'equazione senza collisioni ($\rho = 0$) usando queste notazioni diventa

$$\frac{dF_\tau(r, v)}{d\tau} = 0, \quad \text{ovvero} \quad \frac{\partial G_\tau(r, v)}{\partial \tau} = 0 \quad (3.28)$$

Quindi il termine di collisione è l'unico che fa cambiare “in modo sostanziale” la densità, da cui il nome di derivata sostanziale.

Dalla (3.28), $G_\tau(r, v) = G_0(r, v)$. Quindi per la (3.26), $F_\tau(r + v\tau, v) = F_0(r, v)$, per cui, ponendo $r' = r + v\tau$,

$$F_\tau(r', v) = F_0(r' - v\tau, v) \quad (3.29)$$

La validità della (3.29) può essere facilmente verificata controllando che è soluzione della (3.21) con $\rho = 0$.

CAPITOLO 4

REVERSIBILITA'-IRREVERSIBILITA', ENTROPIA

In questo capitolo vedremo che l'equazione (3.21) che descrive l'evoluzione macroscopica del gas di Lorentz è dissipativa. Introduciamo a tal scopo un funzionale che nel seguito identificheremo con l'entropia e che, calcolato sulle soluzioni della (3.21), risulterà essere una funzione crescente (in generale strettamente crescente) del tempo. Questo ci porta direttamente ed inevitabilmente alla discussione del problema della irreversibilità e del famoso paradosso per cui sarebbe contraddittorio derivare le leggi irreversibili della termodinamica da modelli meccanici la cui dinamica è reversibile. Il paradosso è stato al centro di accesi dibattiti sui fondamenti della Meccanica Statistica e riappare ogni volta che si discute la transizione dal microscopico al macroscopico. Il caso del gas di Lorentz è particolarmente istruttivo al riguardo in quanto la semplicità del modello permette risposte chiare ed esaurienti.

4.1. Sistemi di particelle e gas di Lorentz

L'equazione macroscopica (3.21) risponde ad una delle richieste fatte all'inizio della nostra trattazione sul gas di Lorentz, in cui si chiedeva che l'evoluzione (macroscopica) non dipendesse dalle individuali configurazioni di ostacoli, ma solo da loro proprietà globali. Nella (3.21) gli ostacoli appaiono unicamente tramite il parametro ρ , che ne rappresenta la densità, e soddisfano quindi pienamente la proprietà desiderata.

A guardar bene però, il risultato non è veramente quello voluto, infatti la (3.21), o meglio la sua soluzione, $F_\tau(r, v)$ descrive la densità di probabilità di una particella del gas (nel limite macroscopico). È questa probabilità che obbedisce alla (3.21). Se guardassimo le singole traiettorie queste potrebbero ancora (e infatti dipendono) dalla particolare realizzazione della configurazione di ostacoli. La loro media converge a qualcosa che dipende dagli ostacoli solo tramite ρ , ma questo è in un certo senso ovvio in quanto facendo l'aspettazione abbiamo sommato su tutte le possibili configurazioni di ostacoli. Quindi l'irreversibilità della (3.21) (che sarà dimostrata nella prossima sezione) non è necessariamente in contrasto con la reversibilità delle traiettorie prima del limite. Nella Sezione B.3 dell'Appendice B vedremo però che è possibile riformulare il paradosso reversibilità-irreversibilità anche in questo contesto.

Consideriamo dunque il caso fisicamente più rilevante di un gas di particelle di Lorentz. Nella Appendice B faremo vedere che sotto un'ipotesi di "caos iniziale" che generalizza quella del Capitolo 3, con probabilità che tende a 1 la densità del gas converge ad una densità limite $f_\tau(r, v)$, la cui evoluzione temporale è regolata dalla (3.21). Quindi, l'evoluzione della densità di un gas di particelle diventa, nel limite macroscopico, deterministica ed indipendente dalla particolare realizzazione della configurazione di ostacoli, obbedendo alla legge di evoluzione (3.21). Con la sola analisi dei capitoli precedenti si arrivava a dire che solo "in media" (rispetto alle realizzazioni delle configurazioni di ostacoli) una particella (o anche la densità di particelle) evolve secondo la (3.21); con il nuovo risultato si può invece affermare che le singole traiettorie della densità (nel limite macroscopico) si comportano secondo la (3.21). Il confondere le due affermazioni corrisponde al sostenere che è lo stesso se tutti guadagnano un milione al mese oppure se la metà delle persone non riceve niente e l'altra metà due milioni.

4.2. L'entropia

La dissipatività dell'equazione (3.21) sarà provata introducendo "il funzionale di entropia $S(f)$ e mostrando che $S(f_t)$, f_t una soluzione della (3.21), è una funzione crescente del tempo.

Definizione 4.2.1 (L'entropia). *L'entropia $S(f)$ di una funzione $f(r, v) \geq 0$, C^∞ in r per ogni $v \in \mathcal{V}$ e a supporto compatto (si scriverà $f \in \mathcal{C}$) è*

$$S(f) = - \sum_{v \in \mathcal{V}} \int dr f(r, v) \log f(r, v) \quad (4.1)$$

Si osservi che la funzione $f(r, v) \log f(r, v)$ si estende ad una funzione continua ponendola uguale a 0 dove la f si annulla e che l'entropia è in realtà definita purché $f(r, v) \log f(r, v)$ sia sommabile. ■

Sia f_t la soluzione della (3.21) (scrivendo f_t invece che F_τ) con dato iniziale $f_0 \in \mathcal{C}$, f_t ha dunque l'espressione (3.20). Da questa si vede che per ogni t , $f_t \in \mathcal{C}$ (il supporto di f_t è contenuto nella sfera di raggio $R + t$, se la sfera di raggio R contiene il supporto di f_0) e che:

Teorema 4.2.2. *$S(f_t)$ è una funzione differenziabile di t ,*

$$\frac{dS(f_t)}{dt} =: I(f_t) \geq 0 \quad (4.2)$$

$I(f)$ è “la produzione di entropia” e vale

$$I(f) = \rho \sum_{v \in \mathcal{V}} \int dr \frac{1}{2} [f(r, v) - f(r, v^\perp)] \log \frac{f(r, v)}{f(r, v^\perp)} \quad (4.3)$$

(v^\perp è la velocità entrante in un urto con un ostacolo di tipo 1 che ha come velocità uscente v). $I(f)$, infine, verifica la seguente disuguaglianza:

$$I(f) \geq 2\rho \sum_v \int dr \left(\sqrt{f(r, v^\perp)} - \sqrt{f(r, v)} \right)^2 \quad (4.4)$$

Dimostrazione.

Chiamando $K(f) = -f \log f$ e $K'(f) = -1 + \log f$ la sua derivata rispetto a f , abbiamo

$$\frac{dS(f_t)}{dt} = \sum_v \int dr \frac{d}{dt} K(f_t(r, v)) = \sum_v \int dr K'(f_t(r, v)) \frac{df_t(r, v)}{dt}$$

Usando la (3.21) otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{dS(f_t)}{dt} = & - \sum_v \int dr v \cdot \nabla K(f_t(r, v)) - \sum_v \int dr \rho \{ f_t(r, v^\perp) - f_t(r, v) \} \\ & - \sum_v \int dr \log f_t \rho \{ f_t(r, v^\perp) - f_t(r, v) \} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Il primo termine si annulla per il teorema della divergenza ricordando che f_t ha supporto compatto. Il secondo termine è nullo poiché

$$\sum_v f_t(r, v^\perp) = \sum_v f_t(r, v)$$

Si osservi poi che la parentesi graffa nell'ultimo integrale nella (4.5) cambia segno quando si scambiano v e v^\perp , quindi scrivendo nella (4.5)

$$\log f_t(r, v) = \frac{1}{2} [\log f_t(r, v) + \log f_t(r, v^\perp)] + \frac{1}{2} [\log f_t(r, v) - \log f_t(r, v^\perp)] \quad (4.6)$$

solo la parte antisimmetrica sopravvive, ottenendosi così la (4.3).

Per provare la (4.4) basterà dimostrare che se $a \geq b > 0$, allora

$$(a - b) \log \frac{a}{b} \geq 4(\sqrt{a} - \sqrt{b})^2 \quad (4.7)$$

Si ponga $x = (a/b)^{1/2}$. La disuguaglianza da provare diventa allora

$$(x + 1) \log x \geq 2(x - 1), \quad x \geq 1$$

che può essere facilmente verificata. \square

Il membro di destra nella (4.4) è manifestamente non negativo, l'espressione (4.4) è detta “la forma di Dirichlet” associata alla (3.21). Dalla (4.4) segue che ogni soluzione

stazionaria della (3.21) verifica necessariamente, per ogni r , la condizione di equilibrio $f(r, v) = f(r, v^\perp)$.

4.3. Reversibilità ed irreversibilità

Inizio con una “dimostrazione” che quanto fatto sinora deve essere sbagliato! L'argomento si basa sulla reversibilità della dinamica microscopica [del gas di Lorentz] per cui se ad un dato tempo si invertono le velocità delle particelle del gas, il moto che ne consegue descrive l'orbita precedente percorsa all'indietro con velocità invertite. Tale proprietà si mantiene nel limite che quindi deve godere di tale proprietà di reversibilità. Vedremo però, usando la monotonia dell'entropia, che la (3.21) non è reversibile e quindi non può essere l'equazione che descrive il limite macroscopico del gas di Lorentz! Questo è il famoso paradosso sulla reversibilità ed irreversibilità, ma prima di “difenderci” da questo attacco, dimostriamo che effettivamente la (3.21) è un'equazione dissipativa e non reversibile.

Nel nostro contesto l'inversione di velocità è un operatore \mathcal{I} che agisce sulle funzioni $f(r, v)$:

$$(\mathcal{I}f)(r, v) = f(r, -v)$$

Sia f_t , $t > 0$, una soluzione della (3.21); $g = \mathcal{I}f_t$ e g_t la soluzione della (3.21) con dato iniziale g . Supponiamo che per qualche r , $f(r, v) \neq f(r, v^\perp)$; vogliamo allora dimostrare che

$$\mathcal{I}g_t \neq f \tag{4.8}$$

Useremo una proprietà che segue direttamente dalla definizione di $S(\cdot)$, cioè che per ogni f

$$S(\mathcal{I}f) = S(f)$$

Si ha allora

$$S(\mathcal{I}g_t) = S(g_t) \geq S(g) = S(f_t) > S(f) \tag{4.9}$$

L'ultima disuguaglianza è stretta perché, per l'ipotesi fatta su f e usando la (4.4), $dS(f_t)/dt > 0$ a $t = 0$. Quindi $\mathcal{I}g_t$ ha entropia maggiore di f e non può dunque essere uguale a f . ■

La conclusione $\mathcal{I}g_t \neq f$ avrebbe potuto essere raggiunta direttamente dalla (3.21), ma ho preferito presentare questo argomento perché apparentemente di validità più generale. Si osservi inoltre che, per quanto detto nella Sezione 4.1, traiettoria per traiettoria la densità converge a quella dell'equazione limite e non solo in media. Quindi gran parte delle traiettorie, tutte nel limite, hanno un comportamento irreversibile con un'entropia che cresce.

Siamo dunque di fronte ad una contraddizione, apparentemente nata dall'affermazione che una dinamica reversibile converge ad una irreversibile. Nell'Appendice B esaminerò in dettaglio le singole parti dell'argomento trovandone l'errore. Dirò qui brevemente che l'origine del paradosso è da cercarsi nel fatto che quando si invertono le velocità delle particelle al tempo t , la distribuzione in quell'istante non è indipendente da quella degli

ostacoli. Non è quindi corretta l'affermazione secondo cui il moto successivo convergerebbe alla soluzione della (3.21), che appunto si basa su un'ipotesi di indipendenza. Non vi è dunque contraddizione con quanto dimostrato, né poteva esservi essendo la dimostrazione rigorosa. Rimane comunque da spiegare l'origine di questo “non paradosso”, da dove nasca cioè l'irreversibilità nel gas di Lorentz. L'elemento chiave di questa transizione è più evidente nel caso di una singola particella. Infatti il suo stato si “randomizza” durante l'evoluzione, cioè se si ignora come sia fatta la configurazione iniziale degli ostacoli, allora, ad ogni passo, lo stato della particella diventa sempre più imprevedibile. Contemporaneamente però la conoscenza del moto della particella specifica la configurazione di ostacoli: l'entropia della particella sta dunque crescendo, ma quella degli ostacoli diminuisce. La somma [si può dimostrare che] rimane invece costante, in accordo col fatto che il sistema complessivamente è reversibile.

Il fatto che il moto della particella specifichi almeno parzialmente la configurazione degli ostacoli, è, potenzialmente, “molto pericoloso”. Questi infatti potrebbero influenzare il moto successivo. L'ipotesi di caos iniziale, per cui ostacoli e stato iniziale della particella sono indipendenti, non è più verificata a tempi t positivi e non si può quindi, a priori, applicare il risultato di convergenza per studiare l'evoluzione dopo t . Si osservi che esattamente questo era stato l'argomento usato per dirimere il paradosso per cui se al tempo t si invertono le velocità, il sistema torna nello stato iniziale se $\epsilon > 0$ e non più dopo il limite $\epsilon \rightarrow 0$. Nel caso che consideriamo, la correlazione che si stabilisce tra moto della particella e distribuzione degli ostacoli è ininfluenza per il futuro e catastrofica per il passato. La proprietà di non influenza nel futuro è legata a una sorta di “propagazione del caos”. Questa afferma (nel contesto particolare che consideriamo) che se ad un qualunque istante ridistribuiamo gli ostacoli indipendentemente da quanto successo prima, il moto futuro non cambia (per una particella e con probabilità che tende ad uno per il sistema di particelle; cambia invece completamente il moto all'indietro nel tempo). Nel caso di ostacoli di tipo 1 questa proprietà è evidente, perché i siti visitati nel passato non saranno più incontrati nel futuro. Ma la propagazione del caos rimane vera in generale, sia quando vi sono ostacoli di entrambi i tipi che per un gas di particelle. Nel limite l'evoluzione della particella (o della densità di particelle) è descritta da una equazione chiusa (in cui cioè le configurazioni di ostacoli non appaiono esplicitamente), quindi l'entropia della particella o del gas di particelle cresce e l'equazione macroscopica ha natura dissipativa. Si chiarisce così in modo relativamente semplice, almeno in questo contesto, come avvenga la transizione dal reversibile all'irreversibile, questione che ha avuto grande rilevanza nei fondamenti della Meccanica Statistica. Il lettore potrà trovare nell'Appendice B ulteriori dettagli sull'argomento.

CAPITOLO 5

EQUAZIONE DI BOLTZMANN

All'equazione di Boltzmann sono dedicati tre capitoli: il primo (questo) alla derivazione, il secondo (Capitolo 6) allo studio delle soluzioni stazionarie, il terzo (Capitolo 7) allo studio delle proprietà termodinamiche. Basata sulle intuizioni originarie di Boltzmann, la trattazione parte da modelli puramente meccanici e arriva con deduzioni rigorose all'equazione di Boltzmann. L'analisi delle soluzioni stazionarie (dell'equazione di Boltzmann) permette poi di identificare gli stati di equilibrio (caratterizzati da distribuzioni Maxwelliane delle velocità) e successivamente l'equazione di stato e l'intera termodinamica, che, per il gas di Boltzmann, è quella dei gas perfetti

L'equazione di Boltzmann è usata per descrivere gas in condizioni di estrema rarefazione e, per questi sistemi, la teoria, nel suo insieme, realizza tutto il programma della Meccanica Statistica, spiegando in modo esauriente e convincente il passaggio dal microscopico al macroscopico. L'equazione di Boltzmann non ha solo grande importanza teorica, ma è anche molto usata nelle applicazioni. Tutti i problemi di aereodinamica ad alta quota, per esempio, si riferiscono a gas in condizioni di estrema rarefazione ed è in molti casi necessario ricorrere all'equazione di Boltzmann per spiegare comportamenti per cui le equazioni idrodinamiche sono inadeguate.

5.1. Derivazione euristica

L'equazione di Boltzmann descrive l'evoluzione della densità $f_\tau(r, v)$ di molecole in gas in condizioni di estrema rarefazione. [$f_\tau(r, v)$ è il numero di molecole per unità di volume $dr dv$ dello spazio delle fasi di singola particella]. Causa l'ipotesi di rarefazione, una singola molecola del gas di Boltzmann si muove liberamente per lunghi tratti (di dimensioni macroscopiche) e solo ogni tanto subisce urti all'apparenza casuali. La situazione ricorda dunque per questi aspetti quanto accade nel gas di Lorentz, pur di interpretare le altre molecole nel gas come gli ostacoli del gas di Lorentz. Ovviamente si tratta solo di un'analogia, perché gli ostacoli ora si muovono, e soprattutto il loro stato (posizione e velocità) cambia dopo ogni urto. Si stabilisce così una correlazione tra molecole, che, nell'analogia col gas di Lorentz, è una correlazione tra particelle ed ostacoli: come discusso nel Capitolo 4 ciò è della "massima pericolosità, al fine della derivazione e della validità dell'equazione macroscopica. Sebbene questo sia il punto delicato e più significativo della

teoria, se procediamo trascurando completamente questi problemi (ipotesi di propagazione del caos) e applichiamo, opportunamente tradotte, le considerazioni svolte per il gas di Lorentz, otteniamo “il risultato corretto, cioè l’equazione di Boltzmann. È più semplice da trattare il caso in cui le velocità sono discrete, come nel gas di Lorentz. Esiste un modello di particelle che pur urtando tra loro hanno le stesse velocità che nel gas di Lorentz. Questo è il gas di Broadwell che è brevemente discusso nell’Appendice C, la cui lettura sarebbe perciò opportuno anteporre; noi qui proseguiamo con l’equazione di Boltzmann e poi con una discussione di come si possa ottenerla, supponendo applicabili le formule della Teoria dello Scattering (ipotesi di propagazione del caos).

L’equazione di Boltzmann

L’equazione di Boltzmann è

$$\frac{\partial f_\tau(r, v)}{\partial \tau} + v \nabla f_\tau(r, v) = Q(f_\tau)(r, v) \quad (5.1)$$

dove $f_\tau(r, v)$ è la densità di particelle, più precisamente è il numero di molecole per unità di volume macroscopico nello spazio delle fasi (r, v) , (si deve pensare r misurato in unità macroscopiche, per esempio centimetri); ∇ è il gradiente rispetto a r , $v \cdot \nabla$ è $|v|$ volte la derivata direzionale nella direzione di v ; $Q(f_\tau)$ è il termine di collisione (Q sta per sottolineare la dipendenza quadratica in f_τ):

$$\begin{aligned} Q(f_\tau)(r, v) = & \int dv_1 \int d\omega |v - v_1| [\epsilon_0^{d-1} \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega}] \\ & \times [f_\tau(r, v'_1) f_\tau(r, v') - f_\tau(r, v_1) f_\tau(r, v)] \end{aligned} \quad (5.2)$$

Le velocità v' e v'_1 sono funzioni di v , v_1 e ω : ω è l’angolo solido che il vettore $v' - v'_1$ forma con $v - v_1$ e v' e v'_1 sono allora determinate dalla conservazione di quantità di moto ed energia:

$$v' + v'_1 = v + v_1; \quad v'^2 + v_1'^2 = v^2 + v_1^2$$

v e v_1 sono le velocità entranti, v' e v'_1 quelle uscenti, $d\sigma(\omega)/d\omega$ è la corrispondente sezione d’urto differenziale. Nella (5.2), $d\sigma(\omega)/d\omega$ è espressa in unità microscopiche (per cui la sezione d’urto totale è πR_0^2 , R_0 il range del potenziale in unità microscopiche). $d\sigma(\omega)/d\omega$ è uguale alla sezione d’urto di una singola particella nel campo di potenziale della forza intermolecolare quando la velocità entrante è $(v - v_1)$ e quella uscente $(v' - v'_1)$. Infine ϵ_0^{d-1} è un fattore adimensionale di conversione tra unità macroscopiche e microscopiche, (per esempio $\epsilon_0 = 10^{-8}$ è il rapporto tra angstrom e centimetri) ed $\epsilon_0^{d-1} d\sigma(\omega)/d\omega$ è la sezione d’urto in unità macroscopiche.

Riprendendo le considerazioni euristiche dell’inizio della sezione, considereremo le molecole del gas alla stregua di ostacoli. Nel gas di Lorentz la probabilità di avere un ostacolo è proporzionale a ϵ_0 , avendo fissato uguale a ϵ_0 il rapporto tra scala macroscopica e microscopica. In Lorentz il numero di ostacoli in un volume macroscopico è dell’ordine di $\epsilon_0 \epsilon_0^{-d}$ (ϵ_0^{-d} è il numero di siti presenti in un volume macroscopicamente unitario). Quindi i valori

tipici di f_τ , in base all'analogia col gas di Lorentz, sono dell'ordine di ϵ_0^{-d+1} . Si osservi allora che la (5.1) "si bilancia: entrambi i lati della (5.1) sono infatti dello stesso ordine, ϵ_0^{-d+1} . Il fattore ϵ_0^{d-1} presente nella (5.2) compensa infatti la dipendenza quadratica in f_τ nella (5.2). Queste considerazioni saranno riprese con maggior dettaglio nella sezione successiva.

Interpretazione della (5.2)

Il termine di trasporto, $v \cdot \nabla f_\tau$, nella (5.1) è come nel gas di Lorentz, (3.21), e non richiede ulteriori commenti. Il termine di collisione, $Q(f_\tau)$ è anche esso analogo a quello nella (3.21), ricordando che la densità di ostacoli ρ deve essere qui sostituita da f_τ , in accordo a quanto detto precedentemente. Il termine di collisione nell'equazione di Boltzmann è perciò quadratico e l'equazione non lineare: molte delle sue caratteristiche e la procedura stessa per derivarla (come vedremo) dipendono proprio da questo fatto, che assume dunque importanza fondamentale.

Nella (3.21) appaiono solo due termini perché si hanno solo due tipi di collisioni. Nella (5.2) vi sono infinite possibili collisioni e quindi invece di somme abbiamo integrali. Nel gas di Broadwell (in cui le velocità sono le stesse che nel gas di Lorentz) il termine di collisione è esattamente quello che si avrebbe con la sostituzione $\rho \rightarrow f_\tau$. In sostanza il termine di collisione è quello che si ottiene pensando alle altre molecole come ostacoli e "rimane solo da contare correttamente gli urti". Questo è quanto fatto dalla Teoria dello Scattering: la (5.2) ha la stessa espressione che si ottiene usando le formule di Teoria dello Scattering. Ricordiamo dalla Sezione A.6 della Appendice A che la Teoria dello Scattering fornisce delle espressioni per:

- il numero di particelle prodotte per unità di tempo e di volume ($dqdv$) in seguito agli urti
- quante molecole vengono deflesse, per unità di tempo e di volume

Quest'ultima ha l'espressione (A.85) che riportiamo per comodità del lettore:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\text{densità di partic. con veloc. } v \text{ deflesse entro } t \right) \\ = -\rho(v) \int dv_1 \rho(v_1) |v - v_1| [\pi R_0^2] \end{aligned} \quad (5.3)$$

(R_0 il range dell'interazione). Ricordando che πR_0^2 è la sezione d'urto totale:

$$\pi R_0^2 = \int d\omega \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega}$$

la (5.3) diventa (a meno del fattore ϵ_0^{d-1}) il termine di perdita, quello col segno meno, nella (5.2), se

$$\rho(v) \rightarrow f_\tau(r, v) \quad (5.4)$$

Commenteremo dopo questa identificazione e proseguiamo coi risultati di teoria dello Scattering, riportando la (A.83):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\text{densità di partic. prodotte con veloc. } v \text{ entro } t \right) \\ = \int dv_1 \int_{\Sigma} d\omega \rho(v') \rho(v'_1) |v - v_1| \frac{d\sigma}{d\omega} \end{aligned} \quad (5.5)$$

Nel secondo membro è naturale pensare a v' e v'_1 come alle velocità entranti e a v e v_1 come a quelle uscenti; ma le proprietà di reversibilità del moto rendono la sezione d'urto invariante per lo scambio di velocità entranti e uscenti, possiamo quindi leggere nella (5.5) v e v_1 come entranti v' e v'_1 come uscenti e ω come l'angolo solido tra $v' - v'_1$ e $v - v_1$. Con la sostituzione (5.4) allora la (5.5) è (a meno del fattore ϵ_0^{d-1}) il termine di guadagno (quello col segno più) nella (5.2).

Il calcolo che porta alle (5.3) e (5.5) si basa sul seguente schema: si fissa una coppia di punti nello spazio delle fasi di singola particella e si considera poi il moto di due particelle con quelli come dati iniziali. Si calcolano le velocità uscenti dall'urto e gli altri parametri di interesse nello scattering e si fa l'ipotesi che il contributo dovuto alla data coppia di dati abbia un peso proporzionale al prodotto della densità calcolate per i dati valori. Integrando poi su tutte le coppie si ottiene il contributo complessivo allo scattering.

L'ipotesi che il contributo allo scattering sia il prodotto delle densità è ovviamente una ipotesi di indipendenza delle distribuzioni dei fasci incidenti. Come discusso nella Appendice A, tale ipotesi non è più verificata dalle distribuzioni uscenti in quanto gli urti creano delle correlazioni tra le velocità. Quindi anche se ad un dato tempo lo schema di calcolo proposto dalla Teoria dello Scattering fosse applicabile, è tutt'altro che ovvio, anzi apparentemente contraddittorio, che lo si possa ancora usare ad istanti successivi. La validità dell'equazione di Boltzmann coinvolge perciò una proprietà di propagazione del caos, per certi aspetti analoga a quella molto più evidente che è presente nel gas di Lorentz. A prescindere dall'ipotesi di indipendenza (che per altro è l'aspetto più significativo del problema) dobbiamo spiegare nella sostituzione (5.4) come sia possibile che a destra vi sia una dipendenza da spazio e tempo mentre sulla sinistra ciò non accada. Come vedremo questo aspetto è anche legato alla presenza del fattore ϵ_0^{d-1} che è assente nelle (5.3) e (5.5). Tutto ciò si spiega con un cambio di scale del tutto analogo a quello nel gas di Lorentz. Dobbiamo dunque ricordare che la f_{τ} nell'equazione di Boltzmann è la densità di particelle in unità macroscopiche di spazio e tempo. Chiamando $f_t^*(q, v)$ il numero di molecole per unità di volume in cui lo spazio è misurato in unità microscopiche ($r \rightarrow q$) ed usando anche coordinate microscopiche per il tempo, si avrà

$$f_t^*(q, v) = \epsilon_0^d f_{\tau}(r, v), \quad t = \epsilon_0^{-1} \tau, \quad q = \epsilon_0^{-1} r \quad (5.6)$$

Si osservi che $f_t^*(q, v)$ soddisfa la stessa equazione di Boltzmann (5.2) con il termine di collisione che però non ha il fattore ϵ_0^{d-1} . In questo schema la dipendenza dal tempo t e dallo spazio q è molto lenta, si può quindi pensare che l'approssimazione in (5.4) non sia troppo brutale. Trascurando dunque la dipendenza spaziale (d'altra parte abbiamo già spiegato l'origine del termine di trasporto nella (5.1)) supponiamo dunque che f^* sia solo

funzione di t e v . Si ha allora dalla (5.6)

$$\frac{\partial f_\tau}{\partial \tau} = \epsilon_0^{-d-1} \frac{\partial f_t^*}{\partial t} \quad (5.7)$$

Riferendoci per semplicità solo al termine di perdita, (5.3), il rateo $(\partial f_t^*/\partial t)^-$ con cui in seguito agli urti si “perdono” particelle con velocità v è per la (5.3)

$$\left(\frac{\partial f_t^*(v)}{\partial t} \right)^- = -f_t^*(v) \int dv_1 f_t^*(v_1) |v - v_1| [\pi R_0^2] \quad (5.8)$$

dove R_0 è il range dell’interazione e

$$\int d\omega \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega} = \pi R_0^2 \quad (5.9)$$

è la sezione d’urto totale. Riesprimendo f_t^* in termini di f_τ nella (5.8), usando la (5.7) e la (5.6) otteniamo

$$\epsilon_0^{d+1} \left(\frac{\partial f_\tau}{\partial \tau} \right)^- = -\epsilon_0^{2d} f_\tau(v) \int dv_1 f_\tau(v_1) |v - v_1| [\pi R_0^2] \quad (5.10)$$

Dividendo per ϵ_0^{d+1} , il membro di destra diventa il “termine di perdita” nella (5.2). Per il termine di guadagno l’argomento è del tutto simile ed è omissso.

5.2. Limite di Boltzmann-Grad

Specifichiamo innanzitutto le situazioni fisiche in cui è lecito applicare l’equazione di Boltzmann. In un solido o in un liquido in condizioni normali vi sono circa 10^{24} molecole per cm^3 , le distanze intermolecolari sono perciò dell’ordine dell’angstrom, (come anche, grosso modo, la portata delle forze), la densità di molecole per cm^3 è quindi dell’ordine di ϵ_0^{-d} . Nei gas rarefatti, per cui l’equazione di Boltzmann è una buona approssimazione, le molecole sono molte di meno. Per un ordine di grandezza, si pensi di dividere un cubo di 1 cm di lato in tanti parallelepipedi ciascuno lungo 1 cm e di sezione 1 angstrom^2 (quindi dell’ordine del range delle forze intermolecolari). La condizione di rarefazione richiede che in media vi sia circa una particella per parallelepipedo, in totale perciò in un gas rarefatto il numero di molecole per cm^3 è 10^{16} contro le 10^{24} presenti normalmente in un liquido, (ma in molte situazioni che si incontrano in pratica il numero è anche di molto inferiore). La densità vale allora circa ϵ_0^{-d+1} e l’equazione (5.1) fornisce una buona approssimazione dell’evoluzione reale della densità nel gas. Come vedremo a queste densità corrispondono cammini liberi medi macroscopici (dell’ordine del centimetro).

Ovviamente se la densità è ancora più piccola l’approssimazione risulterà corrispondentemente più accurata e infinitamente precisa nel limite ideale in cui la densità si annulla. È proprio in questo limite, il limite di Boltzmann-Grad, che si deriva l’equazione di Boltzmann. Contrariamente a quanto potrebbe pensarsi, infatti, il limite di densità

nulla conserva molte informazioni sulla fisica del sistema. Ovviamente occorre seguire la corretta procedura, che è appunto quella che definisce il limite di Boltzmann-Grad. Il tutto inizia con l'osservare una proprietà di invarianza di scala soddisfatta dalla (5.1): data una funzione non negativa, limitata e regolare $F(r, v)$ si consideri la famiglia

$$f^{(\epsilon)}(r, v) = \epsilon F(\epsilon r, v) \quad (5.11)$$

di dati iniziali per la (5.1). Se F ha supporto spaziale nella regione Λ , allora $f^{(\epsilon)}$ ha supporto in $\epsilon^{-1}\Lambda$. La trasformazione (5.11) dunque corrisponde ad amplificare le regione in cui il gas è racchiuso e, contemporaneamente, a diminuirne la densità.

Sia $f_\tau^{(\epsilon)}(r, v)$ la soluzione della (5.1).¹ Allora

$$F_\tau(r, v) := \epsilon^{-1} f_{\epsilon^{-1}\tau}^{(\epsilon)}(\epsilon^{-1}r, v) \quad (5.12)$$

non dipende da ϵ , sic!, in quanto soddisfa la (5.1), come è facile controllare, e il suo dato iniziale è $F(r, v)$, entrambi quindi indipendenti da ϵ .

Consideriamo adesso un gas la cui densità iniziale dipende da ϵ come nella (5.11). La sua densità ai tempi successivi sarà sempre più vicina a $f_\tau^{(\epsilon)}$ quanto più ϵ è piccolo, perché la condizione di rarefazione è sempre più accuratamente soddisfatta. Quindi se si normalizza la densità come nella (5.12), si troverà corrispondentemente un valore che converge a F_τ nel limite in cui $\epsilon \rightarrow 0$ e quindi soddisfa l'equazione di Boltzmann (5.1). Affinché ciò veramente accada occorre tuttavia che l'equazione di Boltzmann fornisca una approssimazione molto accurata dell'evoluzione del sistema, corretta sino al primo ordine in ϵ , (poiché nella (5.12) si moltiplica per ϵ^{-1}) e per tempi che crescono come ϵ^{-1} , (quali appunto quelli che intevengono nella (5.12)). Ciò è quanto si dimostra quando si deriva l'equazione di Boltzmann da sistemi meccanici, come vedremo nel resto della sezione.

Iniziamo l'analisi a livello microscopico definendo il modello meccanico. Il più semplice è quello in cui una molecola è rappresentata da una sferetta rigida di raggio R dell'ordine della portata delle forze intermolecolari. Le interazioni tra molecole sono allora schematizzate da urti elastici tra sferette. Sebbene l'equazione di Boltzmann sia stata derivata per sistemi più generali, considererò nel seguito per semplicità questo modello, che è infatti spesso usato in Teoria Cinetica. Studieremo dunque un sistema di sfere rigide, identiche, di massa m e di diametro $2R$, che hanno urti elastici quando si incontrano e si muovono liberamente tra un urto e il successivo. Le regole d'urto sono le seguenti: un urto avviene non appena due particelle (cioè i loro centri) sono a distanza $2R$: sia n il versore congiungente il centro della particella 0 al centro della particella 1. Decomponiamo le velocità v e v_1 delle due particelle prima dell'urto scrivendo

$$v = v^\perp + v^{\text{par}}; \quad v_1 = v_1^\perp + v_1^{\text{par}} \quad (5.13)$$

con v_i^{par} il vettore componente di v_i lungo n , mentre v_i^\perp è la velocità nel piano perpendicolare a n . Le velocità dopo l'urto sono v' e v'_1 :

$$v' = v^\perp + v_1^{\text{par}}; \quad v'_1 = v_1^\perp + v^{\text{par}} \quad (5.14)$$

¹Sto quindi supponendo che per questi dati iniziali esista e sia unica una funzione regolare e limitata soluzione della (5.1).

cioè le velocità lungo n si scambiano mentre quelle perpendicolari rimangono invariate, (questa regola si applica al caso di masse uguali). Non occorre definire la dinamica nel caso di urti simultanei di più particelle perché si può dimostrare che questi avvengono in insiemi di misura di Lebesgue nulla, saranno perciò trascurati nelle considerazioni successive.

Si ricordi che ω è l'angolo solido tra la velocità relativa uscente e quella entrante e che dalla (5.14) segue

$$|v' - v'_1| = |v - v_1| \quad (5.15)$$

quindi nella (5.2) si può sostituire $|v - v_1|$ con $|v' - v'_1|$, si confronti con il calcolo della sezione d'urto nella §A.5.

Ricordo infine che la sezione d'urto differenziale per collisioni tra due sfere rigide di diametro $2R$ è, in tre dimensioni,

$$\frac{d\sigma(\omega)}{d\omega} = \frac{(2R)^2}{4}, \quad \int d\omega \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega} = \pi(2R)^2 \quad (5.16)$$

(si osservi che il range dell'interazione è $R_0 = 2R$).

La forma esplicita della sezione d'urto non interviene direttamente se non per il fatto che è la stessa per un urto $(v, v_1) \rightarrow (v', v'_1)$ e per l'opposto, $(v', v'_1) \rightarrow (v, v_1)$. Questa proprietà è in realtà verificata in generale da forze di tipo centrale si veda la Sezione §A.5.

L'equazione di Boltzmann è derivata nel limite di Boltzmann-Grad in cui $\epsilon \rightarrow 0$. Il limite traduce a livello di particelle le relazioni (5.11) e (5.12). Per ogni $\epsilon > 0$ consideremo un sistema con N_ϵ^* sferette, dove

$$N_\epsilon^* = \text{parte intera di } \left[\left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0} \right)^{-d+1} N \right], \quad N > 0 \text{ indipendente da } \epsilon \quad (5.17)$$

La (5.17) si ottiene integrando la (5.11) in r e v . L'integrale di $f^{(\epsilon)}$ (uguale al numero totale di particelle quando il fattore di scala vale ϵ), è allora ϵ^{-d+1} volte l'integrale di F . Quindi il numero totale di particelle deve essere scalato come nella (5.17); N è il valore che ha N_ϵ^* per $\epsilon = \epsilon_0$. N_ϵ^* dunque diverge nel limite $\epsilon \rightarrow 0$, ma, si noti, più lentamente di ϵ^{-d} . D'altra parte, in accordo alla (5.11), lo spazio scalerà come ϵ^{-1} , cioè se $|\Lambda|$ è il volume in cui sono racchiuse le particelle quando $\epsilon = 1$, allora, nelle stesse coordinate microscopiche, il volume in cui esse sono racchiuse quando il parametro di scala vale ϵ sarà $\epsilon^{-d}|\Lambda|$: la densità di particelle per unità di volume microscopico è quindi proporzionale a ϵ , in accordo con la (5.11). Perciò nel limite $\epsilon \rightarrow 0$ il gas diventa sempre più rarefatto.

L'extra fattore ϵ nella (5.17), a causa del quale la densità è proporzionale a ϵ , è lo stesso che rende il cammino libero medio di ordine macroscopico. Per dimostrare questa affermazione conviene, come d'altra parte è d'uso in Teoria Cinetica, cambiare coordinate e usare quelle macroscopiche. Si ricordi che la coordinata macroscopica associata alla posizione microscopica q è $r = \epsilon q$. In queste coordinate il raggio delle sferette, R_ϵ , dipende perciò da ϵ , $R_\epsilon = \epsilon R$. La relazione (5.17) si può allora riscrivere come

$$N_\epsilon^* = \text{parte intera di } \left\{ \left(\frac{R_\epsilon}{\epsilon_0 R} \right)^{-d+1} N \right\} \quad (5.18)$$

In coordinate macroscopiche la densità (= numero di particelle per unità macroscopica di volume) diverge come il numero di particelle, poiché il volume macroscopico non varia

con ϵ . Ma in questo limite anche R_ϵ si annulla e “il volume efficace spazzato” da una particella con velocità v in un tempo τ (entrambi in coordinate macroscopiche) è il volume del cilindro di altezza $v\tau$ e base il cerchio di diametro $4R_\epsilon$ (in $d = 3$, o il segmento di lunghezza $4R_\epsilon$ in $d = 2$), si veda Fig. 5.1. Il volume è quindi

$$c_d(2R_\epsilon)^{d-1}v\tau, \quad c_d = \begin{cases} 2 & \text{se } d = 2 \\ \pi & \text{se } d = 3 \end{cases}$$

Perciò il numero “medio” n^* di particelle in tale volume è, supponendo le particelle distribuite uniformemente in Λ ,

$$n^* = c_d(2R_\epsilon)^{d-1}v\tau \frac{N_\epsilon^*}{|\Lambda|} = \frac{c_d}{|\Lambda|}(2R_\epsilon)^{d-1}v\tau \left(\frac{R_\epsilon}{\epsilon_0 R}\right)^{-d+1} N = \frac{Nv\tau c_d(\epsilon_0 2R)^{d-1}}{|\Lambda|} \quad (5.19)$$

avendo identificato la parentesi graffa nella (5.18) con la sua parte intera. Quindi, benché il numero di particelle N_ϵ^* diverga, n^* risulta indipendente da ϵ . Dopo aver sostituito v con il suo valore medio, si definisce il tempo medio d’urto come il valore di τ per cui $n^* = 1$ nella (5.19). Il tempo medio d’urto moltiplicato per la velocità media è, per definizione, il cammino libero medio. Il limite che stiamo considerando è quindi quello in cui il raggio delle sferette va a 0, il loro numero diverge, mentre il cammino libero medio ed il tempo medio d’urto hanno limiti finiti.

Il vantaggio delle coordinate microscopiche è di rendere evidente che le leggi del moto non cambiano con ϵ . Variano il numero di particelle, i dati iniziali e le osservabili che si studiano, ma non le forze, (nel caso specifico il raggio delle sferette). In queste coordinate il limite di Boltzmann-Grad è un limite di basse densità e l’equazione di Boltzmann perciò un’equazione per gas rarefatti. Lo svantaggio delle coordinate microscopiche è che la regione in cui il gas è racchiuso e le osservabili macroscopiche in generale (come nella (5.20) qui sotto) variano con ϵ , inoltre occorre riscaldare anche i tempi, che in unità microscopiche divergono come ϵ^{-1} . Specularmente, i vantaggi della descrizione microscopica divengono svantaggi in quella macroscopica e viceversa.

Il moto di una configurazione di particelle in coordinate macroscopiche è $\{r_i(\tau), v_i(\tau)\}$, $1 \leq i \leq N_\epsilon^*$, τ è il tempo macroscopico. Indico con $\{r_i, v_i\}$ la condizione iniziale in tale moto. Data una funzione test $\phi(r, v)$, si definisce allora il campo di densità di particelle

$$X_{\tau, \phi}^\epsilon(\{r_i, v_i\}) = \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0}\right)^{d-1} \sum_{i=1}^{N_\epsilon^*} \phi(r_i(\tau), v_i(\tau)) \quad (5.20)$$

Il fattore ϵ^{d-1} (invece che ϵ^d) è dovuto all’ipotesi di rarefazione. Si può comunque capire subito che ϵ^{d-1} è la corretta normalizzazione, in quanto inversamente proporzionale al numero di termini presenti nella somma. Per l’interpretazione fisica della (5.20) si sostituisce ϕ nella (5.20) con $\mathbf{1}_\Lambda(r)$, cioè la funzione caratteristica di una regione Λ supposta di volume unitario. Si vede allora che $X_{\tau, \phi}^\epsilon$ diventa uguale a $N_\epsilon^*(\epsilon/\epsilon_0)^{d-1} = N$, avendo trascurato parti frazionarie. Se supponiamo che il comportamento per $\epsilon \rightarrow 0$ sia descritto da $f_\tau(r, v)$

e sia già ben approssimato quando $\epsilon = \epsilon_0$, allora abbiamo

$$X_{\tau,\phi}^{\epsilon_0}(\{r_i, v_i\}) \approx \int_{\Lambda} dr \int_{\mathbb{R}^3} dv f_{\tau}(r, v), \quad \phi(r, v) = \mathbf{1}_{\Lambda}(r)$$

quindi $f_{\tau}(r, v)$ ha il significato di densità di molecole per unità di volume macroscopico. Per più generali funzioni test

$$X_{\tau,\phi}^{\epsilon_0}(\{r_i, v_i\}) \approx \int dr \int_{\mathbb{R}^3} dv f_{\tau}(r, v)$$

La densità $f_{\tau}(r, v)$ è perciò identificata come il coefficiente che moltiplica la funzione test nell'integrale in $dr dv$. Per arrivare veramente (senza approssimazioni) ad un tale integrale occorre però fare il limite $\epsilon \rightarrow 0$, argomento che discuterò nel seguito.

La formulazione del risultato di convergenza all'equazione di Boltzmann che presenterò è più debole di quanto realmente dimostrato, ma forse più semplice da esporre. Sia dunque assegnata una densità iniziale $f_0(r, v)$, che gioca il ruolo di $F(r, v)$ nella (5.11) e che rappresenta la densità di molecole per cm^3 . Supporrò che $f_0(r, v) \geq 0$, sia una funzione regolare, nulla se $r \notin \Lambda$, con Λ una regione regolare e limitata. Richiedo inoltre che esistano a e b strettamente positivi per cui

$$0 \leq f_0(r, v) \leq be^{-av^2} \quad (5.21)$$

Supporrò infine che

$$\int dr \int dv f_0(r, v) = N \quad (5.22)$$

stesso N che nella (5.17).

Allora, dato f_0 esiste $\tau_0 > 0$ e, per ogni ϵ , una configurazione di particelle, (sferette), $\{r_i^{(\epsilon)}, v_i^{(\epsilon)}\}$, $i = 1, \dots, N_{\epsilon}^*$, in modo tale che per ogni funzione test ϕ in un qualche assegnato insieme numerabile, e per ogni $0 \leq \tau \leq \tau_0$ si ha

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} X_{\tau,\phi}^{\epsilon}(\{r_i^{(\epsilon)}, v_i^{(\epsilon)}\}) = \int dr \int dv f_{\tau}(r, v) \phi(r, v) \quad (5.23)$$

dove f_{τ} soddisfa l'equazione di Boltzmann (5.1) con dato iniziale f_0 .

Per una diretta applicabilità pratica del risultato occorrerebbe che il limite fosse già raggiunto per $\epsilon = \epsilon_0$. L'analisi che porta alla derivazione della (5.1) non consente purtroppo di valutare la rapidità di convergenza e quindi verificare la validità di una tale affermazione. Un altro punto debole della teoria è che le configurazioni iniziali per cui vale la (5.23) non sono note esplicitamente, se ne dimostra l'esistenza ma non se ne sa esibire alcuna. Anche con questi difetti, la teoria, e in particolare la dimostrazione della (5.23), costituiscono uno tra i più interessanti e significativi risultati della fisica-matematica recente. La dimostrazione è intimamente legata alla validità della "propagazione del caos" e segue, rendendole rigorose, le intuizioni originarie di Boltzmann. Sebbene non eccessivamente complessa da un punto di vista tecnico, la prova richiede comunque troppe considerazioni preliminari per essere qui riportata ed è quindi omessa. Ritorneremo nel prossimo capitolo su un altro grave limite della teoria, cioè che la convergenza alla (5.1) è limitata a "tempi

piccoli", $\tau \leq \tau_0$. A prescindere dalla derivazione, anche l'esistenza di soluzioni della (5.1) rimane un problema per alcuni versi aperto, e tuttora oggetto di studio.

CAPITOLO 6

EQUILIBRIO E DISTRIBUZIONE DI MAXWELL

L'equazione di Boltzmann è un'equazione dissipativa che descrive fenomeni irreversibili. Come per l'equazione per il gas di Lorentz, così anche per quella di Boltzmann si può definire un'entropia (con espressione del tutto analoga alla (4.1)) che risulta una funzione monotona, non decrescente del tempo. Dopo il gas di Lorentz abbiamo così un ulteriore e ben più significativo esempio di modelli puramente meccanici e reversibili che presentano nel limite macroscopico comportamenti dissipativi e che, come vedremo nel capitolo successivo, seguono le leggi della termodinamica.

Tra le soluzioni stazionarie dell'equazione di Boltzmann particolare importanza hanno quelle che descrivono gli stati di equilibrio caratterizzati dall'avere massima entropia. Da ciò si dedurrà che le velocità, all'equilibrio, hanno distribuzione Maxwelliana.

6.1. Entropia nell'equazione di Boltzmann

L'analisi dell'equazione di Boltzmann in sé, a prescindere cioè dalla sua derivazione, è tutt'altro che semplice e molti suoi aspetti non sono ancora chiariti, si pensi che la medaglia Fields nel 1994, (una sorta di premio Nobel per la matematica) è stata assegnata a P.L. Lions per alcuni suoi studi, con particolare menzione per quelli che riguardano l'analisi dell'equazione di Boltzmann e un teorema di esistenza globale, ottenuto in collaborazione con R.J. Di Perna,[12], e su cui tornerò, brevemente, tra poco.

Esistenza ed unicità locali son note (e facili da dimostrare) per dati iniziali $f_0(r, v) \geq 0$ “regolari”, limitati e che soddisfano la (5.21). In tal caso esiste un tempo ¹ $T > 0$ (che dipende dal dato iniziale) e una funzione regolare e limitata $f_t(r, v) \geq 0$, $0 \leq t \leq T$, che soddisfa la (5.1) con dato iniziale f_0 . In tale classe la soluzione è unica.

In casi particolari si hanno risultati di esistenza ed unicità globali, come per dati iniziali spazialmente omogenei, in cui cioè $f_0(r, v)$ dipende solo da v , e nel caso di propagazione nel vuoto, quando cioè il dato iniziale è ovunque “piccolo” e si annulla al di fuori di una regione limitata. Recentemente è apparso un risultato di esistenza globale, (menzionato sopra) in cui però si deve generalizzare il senso di soluzione, che risulta molto più debole di quella classica.

¹Nel seguito userò t (invece di τ) per indicare le variabili temporali.

Le considerazioni che seguono presuppongono che esista e sia unica una soluzione regolare dell'equazione per i dati iniziali e i tempi presi in considerazione. Convien inoltre ridursi al caso in cui il sistema è e rimane racchiuso in una regione regolare e limitata Λ . Si suppone perciò che le pareti $\partial\Lambda$ di Λ siano elastiche, per cui se una particella collide su $\partial\Lambda$ con velocità entrante v , avrà dopo l'urto una velocità uscente, v' :

$$v'_{\text{par}} = v_{\text{par}}; \quad v'^{\perp} = -v^{\perp} \quad (6.1)$$

dove “par” si riferisce alla velocità nel piano tangente a $\partial\Lambda$ (nel punto d'impatto); le altre sono le componenti della velocità nella direzione perpendicolare, se n è il versore normale uscente $v^{\perp} \cdot n \geq 0$. (Si vedano gli Esercizi A.8 e A.9 nelle Note all'Appendice A). Al livello dell'equazione di Boltzmann (5.1) ciò si traduce nelle “condizioni al contorno”

$$f_t(r, v') = f_t(r, v), \quad v \text{ e } v' \text{ come nella (6.1)} \quad (6.2)$$

che devono essere verificate ad ogni tempo $t \geq 0$ e per ogni $r \in \partial\Lambda$.

Supporremo che al tempo 0, $f_0 \in \mathcal{F}(N, E)$ dove, per N ed E positivi, $\mathcal{F}(N, E)$ è l'insieme delle funzioni non negative e regolari in $\Lambda \times \mathbb{R}^3$ e tali che

$$\int_{\Lambda} dr \int dv f(r, v) = N; \quad \int_{\Lambda} dr \int dv \frac{m}{2} v^2 f(r, v) = E \quad (6.3)$$

$M = Nm$ è la massa totale ed E l'energia totale di $f \in \mathcal{F}(N, E)$, che è solo cinetica perché nel limite di Boltzmann-Grad la distanza media tra particelle è molto maggiore del range delle forze che non contribuiscono quindi all'energia totale.

Analogamente alla (4.1), l'entropia è definita dall'espressione

$$S(f) = - \int_{\Lambda} dr \int dv f(r, v) \log f(r, v) \quad (6.4)$$

per $f(r, v) \geq 0$, regolare e tale che $f \log f$ sia sommabile in $\Lambda \times \mathbb{R}^3$.

Teorema 6.1.1. *Data $f_0 \in \mathcal{F}(N, E)$, N ed E positivi, sia $f_t \geq 0$, $t \geq 0$ una soluzione regolare dell'equazione di Boltzmann in Λ , che soddisfa la condizione (6.2). Allora $f_t \in \mathcal{F}(N, E)$ e, se f_0 ha entropia finita allora anche f_t ha entropia finita e*

$$\frac{dS(f_t)}{dt} = I(f_t) \geq 0 \quad (6.5)$$

dove

$$I(f) = \epsilon_0^{d-1} \int dr \int dv \int dv_1 \int d\omega |v - v_1| \frac{d\sigma}{d\omega} \frac{1}{4} [f(v_1)f(v) - f(v'_1)f(v')] \log \left\{ \frac{f(v_1)f(v)}{f(v'_1)f(v')} \right\} \quad (6.6)$$

Nella (6.6) è sottintesa la dipendenza da t e r nella f .

Dimostrazione.

Supporremo nella dimostrazione che $f_t(r, v)$ sia limitata così come le sue derivate prime (e la sezione d'urto $d\sigma/d\omega$). Integrando la (5.1) rispetto allo spazio e al tempo, otteniamo (invertendo l'ordine di derivazione ed integrazione)

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda} dr \int dv f_t = - \int_{\Lambda} dr \int dv v \cdot \nabla f_t + \int_{\Lambda} dr \int dv Q(f_t) \quad (6.7)$$

Applicando il teorema della divergenza, il primo integrale sulla destra diventa

$$\int dv \int_{\partial\Lambda} d\Sigma(r) v \cdot n(r) f_t \quad (6.8)$$

dove $d\Sigma(r)$ è l'elemento d'area di $\partial\Lambda$ e $n(r)$ la normale a $\partial\Lambda$ in r diretta verso l'esterno. Poiché $v \cdot n(r) = v^\perp$, l'integrale nella (6.8) si annulla, infatti, a causa della (6.2), il contributo di $v \cdot n(r)$ e di $-v \cdot n(r)$ si compensano.

Inoltre, si veda la (A.84),

$$(v, v_1) \rightarrow (v', v'_1) \text{ ha la stessa sezione d'urto che } (v', v'_1) \rightarrow (v, v_1) \quad (6.9)$$

Si ottiene allora

$$\begin{aligned} \int dv Q(f_t) &= \epsilon_0^{d-1} \int dv \int dv_1 \int d\omega |v - v_1| \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega} [f_t(r, v'_1) f_t(r, v') \\ &\quad - f_t(r, v_1) f_t(r, v)] = 0 \end{aligned} \quad (6.10)$$

Quindi il secondo membro della (6.7) è nullo, e la prima delle (6.3) è dimostrata. L'altra è ottenuta con argomenti analoghi, che sono omessi. Abbiamo quindi completato la dimostrazione che $f_t \in \mathcal{F}(N, E)$.

Per dimostrare la (6.5) si procede come nel Capitolo 4 e, analogamente alla (4.7),

$$\frac{dS(f)}{dt} = - \int dr \int dv \left\{ -v \cdot \nabla (f \log f) + Q(f) + \log f(v) Q(f) \right\} \quad (6.11)$$

Procedendo come per la (6.7), usiamo il teorema della divergenza per ridurci ad un integrale sul bordo di Λ che si annulla a causa dell'ipotesi (6.2). Abbiamo già visto che anche l'integrale in dv di $Q(f)$ è nullo. Nel terzo integrale il termine $\log f(v)$ può essere sostituito da

$$\frac{1}{2} [\log f(v) + \log f(v_1)]$$

perché v e v_1 appaiono simmetricamente in $Q(f)$. Il terzo integrale può quindi essere scritto come

$$\begin{aligned} \epsilon_0^{d-1} \int dr \int dv \int dv_1 \int d\omega |v - v_1| \frac{d\sigma}{d\omega} \frac{1}{2} \{ f(v_1) f(v) - f(v'_1) f(v') \} \\ \times \log[f(v) f(v_1)] \end{aligned} \quad (6.12)$$

Poiché la parentesi graffa è antisimmetrica rispetto allo scambio tra velocità entranti ed uscenti, mentre la sezione d'urto è invariante, per la (6.9), ne consegue che $\log[f(v) f(v_1)]$ può essere sostituito dalla sua parte antisimmetrica, si confronti con la (4.6). Si ottiene quindi la (6.6). \square

Dalla monotonia dell'entropia segue la dissipatività dell'equazione di Boltzmann e quindi il “solito” problema di conciliarla con la reversibilità del sistema meccanico di partenza. Il meccanismo è simile a quello presente nel gas di Lorentz, ma molto più sottile. Nel gas di Lorentz l'irreversibilità nasce da una descrizione incompleta del sistema in cui gli ostacoli non appaiono esplicitamente e quindi il moto della particella diventa aleatorio. Nel caso di Boltzmann si ha ancora una riduzione della descrizione, in quanto si osserva solo la densità di particelle e non, per esempio, la densità di coppie di particelle o altre più complicate funzioni di correlazione. Il fatto, per certi versi sorprendenti, è che nel limite l'evoluzione della densità di particelle diventa autonoma, non dipende quindi dalle correlazioni tra particelle ed obbedisce appunto ad equazioni chiuse. L'equazione di Boltzmann è quindi un'equazione ridotta: mentre l'equazione originaria, prima del limite macroscopico, coinvolge tutte le funzioni di correlazioni ed è reversibile, quella limite è ridotta e dissipativa. Il fenomeno che consente la riduzione e che è quindi all'origine della dissipatività, si basa sul fatto che si ottiene una buona approssimazione (esatta nel limite) quando si calcola la frequenza degli urti come indipendenti da quelli avvenuti nel passato. Si tratta appunto di una proprietà di debole correlazione tra le particelle che porta alla nozione fondamentale in teoria cinetica di propagazione del caos, introdotta originariamente da Boltzmann e provata rigorosamente nel corso della dimostrazione della convergenza alla (5.1).

6.2. Stati di equilibrio, distribuzione di Maxwell

La Meccanica Statistica dell'equilibrio studia le proprietà di quegli stati stazionari che siano termodinamicamente rilevanti. Per il gas di Boltzmann gli stati di equilibrio vanno allora cercati tra le soluzioni stazionarie della (5.1), che appunto descrive l'evoluzione del gas nel limite macroscopico. Se f è stazionaria, dovrà aversi $I(f) = 0$ e, non esplicitando la dipendenza da r ,

$$f(v_1)f(v) = f(v'_1)f(v') \quad (6.13)$$

per ogni coppia (v, v_1) e (v', v'_1) la cui sezione d'urto è positiva. Infatti, a seguito della (4.7), l'integrando nella (6.6) è ovunque non negativo. Si osservi che la (6.13) rende nullo anche $Q(f)$. Scrivendo $f(v) = \exp\{h(v)\}$, otteniamo

$$h(v_1) + h(v) = h(v'_1) + h(v') \quad (6.14)$$

che è certamente soddisfatta se $h(v)$ è un invariante collisionale. Tali sono le grandezze conservate in un urto, tra cui perciò la massa, la quantità di moto totale e l'energia. Quindi

$$h(v) = a + bv - cv^2 \quad (6.15)$$

soddisfa la (6.14) per ogni valore di a , b e c . Perciò la funzione

$$f(r, v) := \exp\{a + cw^2 - c(v - w)^2\}, \quad 2cw = b \quad (6.16)$$

(con a , c e w che non dipendono da r) è soluzione stazionaria della (5.1). w ha il significato di velocità media, è infatti il valore intorno a cui la Gaussiana (6.16) è centrata. Se si restringe $r \in \Lambda$ nella (6.16) e si pone $w = 0$ si ottiene una soluzione stazionaria della (5.1) che soddisfa anche la condizione (6.2). Denoteremo lo stato così ottenuto con

$$f_{\beta,\rho,\Lambda}(r, v) = \frac{\rho}{m} \left[\frac{\beta m}{(2\pi)} \right]^{3/2} e^{-\beta m v^2/2} \mathbf{1}_{r \in \Lambda} \quad (6.17)$$

Dati N ed E , se ρ e β verificano

$$\rho = \frac{M}{|\Lambda|}, \quad E = \frac{3}{2\beta} N, \quad M = Nm \quad (6.18)$$

allora $f_{\beta,\rho,\Lambda} \in \mathcal{F}(N, E)$.

È inoltre noto che $f_{\beta,\rho,\Lambda}$ è localmente stabile, nel senso che $f_t \rightarrow f_{\beta,\rho,\Lambda}$ se f_0 è in un intorno opportunamente piccolo di $f_{\beta,\rho,\Lambda}$. La Maxwelliana $f_{\beta,\rho,\Lambda}$ è non solo un punto di stazionarietà per $S(f_t)$, in quanto $I(f) = 0$, ma è un massimo per $S(f)$ in $\mathcal{F}(N, E)$, come vedremo fra poco. A priori non è neanche ovvio che $S(f)$ sia limitata, infatti non lo è nella classe più ampia delle funzioni in cui N , ma non E , è fissato. Sia infatti $f(r, v) = C$ per tutte le coppie (r, v) con $r \in \Lambda$ e $|v| \leq V$, si ponga altrimenti $f = 0$. Se

$$C|\Lambda| \frac{4}{3} \pi V^3 = N$$

allora l'integrale di f è N e

$$S(f) = -N \log C$$

Poiché $C \rightarrow 0$ per $V \rightarrow \infty$ se ne deduce che $S(f) \rightarrow \infty$.

La condizione che anche l'energia totale sia finita è quindi necessaria e rilevante.

Teorema 6.2.1. *Dati Λ , N e E ,*

$$\sup_{f \in \mathcal{F}(N, E)} S(f) = S(f_{\beta,\rho,\Lambda}) \quad (6.19)$$

con β e ρ come nella (6.18). La disuguaglianza nella (6.19) è stretta per f diversa da $f_{\beta,\rho,\Lambda}$.

Dimostrazione.

Per comodità di notazione poniamo

$$G(r, v) = f_{\beta,\rho,\Lambda}(r, v) =: A e^{-\beta m v^2/2} \mathbf{1}_{r \in \Lambda} \quad (6.20)$$

Definiamo

$$k(r, v) = \frac{f(r, v)}{G(r, v)} \quad (6.21)$$

quindi

$$S(f) = - \int_{\Lambda} dr \int dv G(r, v) k(r, v) [\log k(r, v) + \log G(r, v)] \quad (6.22)$$

L'ultimo termine è uguale a

$$-\int_{\Lambda} dr \int dv f(r, v) [\log A - \beta m v^2 / 2] = -N \log A + \beta E = S(G) \quad (6.23)$$

Il primo termine nel membro di destra della (6.22) si chiama "l'entropia relativa di f rispetto a G ". Si ha

$$\begin{aligned} S(f) &= S(G) - \int_{\Lambda} dr \int dv G(r, v) k(r, v) \log k(r, v) \\ &= S(G) - \int_{\Lambda} dr \int dv G(r, v) [k(r, v) \log k(r, v) - k(r, v) + 1] \end{aligned} \quad (6.24)$$

da cui si conclude che $S(f) \leq S(G)$, poiché $k \log k - k + 1 \geq 0$ per ogni $k \geq 0$, e $k \log k - k + 1 = 0$ solo per $k = 1$. Infatti $f(x) = x \log x - x + 1$ è una funzione convessa che ha derivata nulla in $x = 1$ e $f(1) = 0$, dal che si deduce che $f(x) > 0$ per $x \neq 1$.

Il teorema è dimostrato. □

CAPITOLO 7

TERMODINAMICA DEL GAS DI BOLTZMANN

Nel capitolo precedente abbiamo determinato la struttura degli stati di equilibrio del gas di Boltzmann, (caratterizzati da distribuzioni Maxwelliane delle velocità) e possediamo quindi gli ingredienti per uno studio delle sue proprietà termodinamiche, che svolgeremo in questo capitolo. Dimosteremo che l'equazione di stato del gas di Boltzmann è quella dei gas perfetti e proveremo inoltre che valgono per il gas di Boltzmann alcuni principi della termodinamica che saranno poi utilizzati nel seguito per caratterizzare gli stati di Gibbs. Completeremo qui la parte del corso dedicata alla Teoria Cinetica, gas di Lorentz e di Boltzmann.

7.1. L'equazione di stato per il gas di Boltzmann

Le proprietà termodinamiche di una “sostanza omogenea semplice” sono completamente descritte dalla entropia termodinamica S^{td} , che è una funzione $S^{\text{td}}(E, V, N)$, dell'energia interna E , del volume V della regione in cui si trova il gas e del numero totale di molecole N , ovvero della massa $M = Nm$.

È noto che dalla concavità di S^{td} discende la validità del secondo principio della termodinamica, mentre il primo consiste nell'identificazione della pressione e della temperatura in termini delle derivate di S^{td} :

$$\left(\frac{\partial S^{\text{td}}}{\partial E}\right)_{V,N} = \frac{1}{T}; \quad \left(\frac{\partial S^{\text{td}}}{\partial V}\right)_{E,N} = \frac{P}{T} \quad (7.1)$$

con P la pressione del gas e T la sua temperatura, che in queste relazioni debbono intendersi come funzioni di E , V , N . Come relazione tra differenziali, la (7.1) assume l'aspetto familiare

$$TdS^{\text{td}} = PdV + dE, \quad TdS^{\text{td}} = \delta Q \quad (7.2)$$

La quantità di calore δQ scambiata in una trasformazione reversibile è uguale a TdS^{td} ed è bilanciata dal lavoro fatto dalla pressione e dalla variazione dell'energia interna. La

notazione δQ invece della più naturale dQ è mutuata dai testi di Fisica, dove si vuole sottolineare che δQ non è il differenziale di una funzione di stato, non esiste cioè $Q = Q(E, V)$ il cui differenziale sia $dQ = dE + PdV$. (Nei testi di analisi si usa abitualmente l'espressione dX per una forma differenziale $dX = \sum X_i dx_i$ anche quando questa non è un differenziale esatto e quindi non esiste alcun X di cui la forma sia il differenziale, ci atterremo però alle notazioni dei fisici).

Il nostro scopo, in questa sezione, è di identificare la funzione $S^{\text{td}} = S^{\text{td}}(E, V, N)$ nel gas di Boltzmann. Mentre energia, volume e numero di molecole sono facilmente identificabili in termini di f , è da considerarsi una ipotesi, peraltro naturale, che l'entropia termodinamica sia

$$S^{\text{td}} = kS(f_{\beta, \rho, \Lambda}), \quad k = \text{una costante, la costante di Boltzmann} \quad (7.3)$$

Abbiamo dunque due entropie, l'entropia $S(f)$ (definita per f "arbitrari" e perciò anche fuori dall'equilibrio) e l'entropia termodinamica S^{td} che è (a meno della costante k) l'entropia $S(f)$ calcolata su uno stato di equilibrio. Abbreviando qui sotto $f \equiv f_{\beta, \rho, \Lambda}$,

$$S^{\text{td}} = -k \int_{\Lambda} dr \int dv f \log f; \quad E = \int_{\Lambda} dr \int dv f \frac{mv^2}{2}; \quad N = \int_{\Lambda} dr \int dv f \quad (7.4)$$

Perciò

$$S^{\text{td}} = -kN \left[\log \frac{\rho}{m} + \frac{3}{2} \log \left\{ \frac{\beta m}{2\pi} \right\} \right] + k\beta E \quad (7.5)$$

$$E = \frac{3}{2\beta} N, \quad Nm = M = \rho|\Lambda| \quad (7.6)$$

Dalla (7.5) e dalla (7.6) otteniamo, scrivendo $V = |\Lambda|$,

$$S^{\text{td}} = kN [\log V + \frac{3}{2} \log E] + C \quad (7.7)$$

dove C non dipende da E e da V . Allora, dalla (7.1),

$$\left(\frac{\partial S^{\text{td}}}{\partial E} \right)_{V, N} = \frac{1}{T} = \frac{3k}{2E} N; \quad \left(\frac{\partial S^{\text{td}}}{\partial V} \right)_{E, N} = \frac{P}{T} = \frac{k}{V} N \quad (7.8)$$

e quindi, dalla (7.6),

$$\beta = \frac{1}{kT}, \quad PV = kNT \quad (7.9)$$

che è l'equazione di stato dei gas perfetti. Il gas di Boltzmann è dunque un gas perfetto e la cosa non deve certo sorprendere se si ricorda che il gas di Boltzmann è un gas rarefatto e che l'equazione di Boltzmann è ottenuta nel limite di Boltzmann-Grad in cui la densità si annulla. La scelta del fattore k nella (7.3) era ovviamente mirata ad ottenere la (7.9).

7.2. Pressione cinetica e pressione termodinamica

La seconda delle (7.1) che esprime la pressione in termini di E , V e N è una legge termodinamica generale, che si specializza per il gas di Boltzmann nell'espressione (7.9). La pressione così ottenuta è dunque “una pressione termodinamica”, da distinguere da “una pressione cinetica”, che, come vedremo, si può definire in base a considerazioni puramente meccaniche. Dimostreremo, in questa sezione, che le due pressioni, termodinamica e cinetica, sono uguali, ad ulteriore conferma della validità fisica del modello di Boltzmann.

La pressione ha le dimensioni di una forza per unità di superficie. Per misurarla si supponga mobile una parte della parete $\partial\Lambda$, per esempio Λ un cilindro e la sua superficie superiore libera di muoversi nella direzione dell'asse del cilindro. Se solamente soggetta alla forza esercitata dal gas, la parete si muoverebbe e il gas si espanderebbe. Supponiamo però di impedirlo, agendo sulla parete con una forza esterna che la tenga ferma. La forza per unità di superficie che si deve esercitare sarà dunque uguale alla pressione del gas. La forza esterna, così introdotta, altera il moto delle particelle quando e solo quando esse collidono sulla parete. L'effetto è descritto dalla (6.1): all'urto la quantità di moto di una particella varia di

$$\delta p = -2mv \cdot n(r) \quad (7.10)$$

con v la velocità della particella prima dell'urto e $n(r)$ la normale esterna a $\partial\Lambda$ nel punto di impatto r . δp è uguale all'impulso della forza esterna sulla particella che collide sulla parete. Il contributo all'impulso totale nell'intervallo di tempo δt che le pareti forniscono al gas che urta sull'elemento $\delta\Sigma$ della parete è $\sum_i [-2mv_i \cdot n(r)]$ dove la somma è estesa a tutte le particelle che nell'intervallo di tempo δt urtano su $\delta\Sigma$. L'argomento che segue è analogo a quello nel Capitolo 3 per giustificare la (3.23). Una particella (r, v) colliderà entro δt su $\delta\Sigma$ se la distanza $d(r, \delta\Sigma)$ di r da $\delta\Sigma$ è tale che $d(r, \delta\Sigma) \leq v \cdot n(r)\delta t$. Quindi il numero di particelle che collidono con velocità v è

$$f(r, v)dv v \cdot n(r)\delta\Sigma\delta t, \quad f \equiv f_{\beta, \rho, \Lambda}$$

Perciò l'impulso trasferito al gas nel tempo δt è

$$\int_{v \cdot n(r) \geq 0} dv f(r, v) v \cdot n(r) [-2mv \cdot n(r)] \delta t \delta\Sigma$$

La forza per unità di superficie è allora

$$- \int_{v \cdot n(r) \geq 0} dv f(r, v) 2m[v \cdot n(r)]^2$$

Poiché la forza che il gas esercita sulle pareti è opposta in segno, la pressione cinetica del gas è

$$P_{\text{cin}} = \int_{v \cdot n(r) \geq 0} dv f(r, v) 2m[v \cdot n(r)]^2 \quad (7.11)$$

Calcolando l'integrale con $f = f_{\beta, \rho, \Lambda}$ si trova che $P_{\text{cin}} = P$, con P data dalla (7.8), che era quanto si voleva dimostrare.

Si osservi che la (7.11) può scriversi (ricordando che si è in 3 dimensioni)

$$P_{\text{cin}} = \int_{\mathbb{R}^3} dv f(r, v) \frac{mv^2}{3}$$

che è proprio l'espressione proposta da Thomson, si veda la voce "1853. Thomson" nell'elenco degli "Eventi significativi.." alla fine dell'Introduzione.

Concluderò la sezione con una derivazione alternativa della (7.11). Sia $f_t(r, v)$ una soluzione dell'equazione di Boltzmann dipendente dal tempo che soddisfi ad ogni istante le condizioni al contorno (6.13). Sia e un versore in \mathbb{R}^d , $v_e = v \cdot e$,

$$\pi(f_t) \cdot e := \int_{\Lambda} dr \int_{\mathbb{R}^d} dv m v_e f_t(r, v)$$

la quantità di moto totale del gas al tempo t nella direzione e . Si ha

$$\frac{d}{dt}[\pi(f_t) \cdot e] = - \int_{\Lambda} dr \int_{\mathbb{R}^d} dv m v_e [v \cdot \nabla f_t(r, v)] + \int_{\Lambda} dr \int_{\mathbb{R}^d} dv m v_e Q(f_t)$$

Ometto la dimostrazione che l'ultimo integrale in dv è nullo. La prova, che sfrutta l'espressione esplicita di $Q(f_t)$, è ovvia da un punto di vista fisico in quanto il termine $Q(f_t)$ rappresenta l'interazione tra le molecole del gas di Boltzmann e quindi, trattandosi di forze interne, non può contribuire alla variazione della quantità di moto totale.

Per il teorema della divergenza, si ha allora

$$\frac{d}{dt}[\pi(f_t) \cdot e] = - \int_{\mathbb{R}^d} dv \int_{\partial\Lambda} dr m v_e [v \cdot n(r)] f_t(r, v) =: \int_{\partial\Lambda} dr \dot{\pi}(r, t)$$

dove

$$\dot{\pi}(r, t) = - \int_{\mathbb{R}^d} dv m v_e [v \cdot n(r)] f_t(r, v)$$

si interpreta come la densità superficiale di variazione di quantità di moto (nella direzione e) per unità di tempo. La variazione della quantità di moto è dovuta all'azione di forze esterne che è naturale pensare concentrate sulle pareti di $\partial\Lambda$. Indicandone con $\phi(r, t)$ la densità per unità d'area, avremo

$$\frac{d}{dt}[\pi(f_t) \cdot e] = \int_{\partial\Lambda} dr [\phi(r, t) \cdot e]$$

Supponendo che valga un bilancio dettagliato (r per r) si ha

$$- \int_{\mathbb{R}^d} dv m v_e [v \cdot n(r)] f_t(r, v) = [\phi(r, t) \cdot e]$$

All'equilibrio $f_t(r, v)$ è la Maxwelliana $f(r, v)$ e $\phi(r, t) = \phi(r)$ una densità di forze indipendente dal tempo. Si ottiene allora dalla (7.11)

$$-P_{\text{cin}}[n(r) \cdot e] = [\phi(r, t) \cdot e], \quad \phi(r) = -P_{\text{cin}} n(r)$$

Cioè la forza per unità d'area esercitata dalle pareti sul gas è diretta come la normale interna ($-n(r)$) ed è uguale in modulo alla pressione del gas (come già visto la pressione cinetica è uguale a quella termodinamica).

7.3. Principi variazionali

Nei capitoli successivi studieremo sistemi fisici molto più complessi del gas di Boltzmann in cui non è più possibile caratterizzarne gli stati di equilibrio mediante considerazioni dinamiche, come nel capitolo precedente. Conviene dunque discutere, ancora nell'ambito del gas di Boltzmann, modi alternativi per trovare gli stati di equilibrio. Vedremo che lo stato Maxwelliano (6.17) è soluzione di diversi problemi variazionali, oltre quello del Teorema 6.2 in cui è il massimizzante dell'entropia in $\mathcal{F}(N, E)$. Inizieremo col dimostrare che lo stato Maxwelliano minimizza l'energia libera. Darò prima un enunciato e ne discuterò poi l'interpretazione fisica.

Energia libera

Dato $T > 0$ (che avrà il significato di temperatura) si definisce il funzionale di “energia libera”

$$F(f) := H(f) - kTS(f), \quad H(f) = \int_{\Lambda} dr \int dv f(r, v) \frac{mv^2}{2} \quad (7.12)$$

Definiamo inoltre $\mathcal{F}(N)$ come l'unione su E degli insiemi $\mathcal{F}(N, E)$.

Teorema 7.3.1. *Dati T e N positivi e una regione limitata Λ , il funzionale $F(f)$ (definito dalla (7.12)) ha unico minimo in $\mathcal{F}(N)$ e il minimizzante è $f_{\beta, \rho, \Lambda}$, con $\beta = 1/kT$ e ρ come nella (6.18). Il minimo di $F(f)$ è l'energia libera termodinamica $F^{\text{td}}(T, V, N)$, si veda la (7.15) più sotto.*

Dimostrazione.

Si ha

$$F(f) \geq H(f) - \sup_{g \in \mathcal{F}(N, H(f))} kTS(g) = H(f) - TS^{\text{td}}(H(f), V, N)$$

Quindi

$$F(f) \geq \inf_E \{E - TS^{\text{td}}(E, V, N)\} = E^* - TS^{\text{td}}(E^*, V, N) \quad (7.13)$$

dove E^* è l'unico minimizzante di $E - TS^{\text{td}}(E, V, N)$, esistenza ed unicità seguono dalla stretta concavità di S^{td} , che per la (7.7) è una funzione strettamente concava di E a V e N fissati.

Sia f^* l'unica Maxwelliana in $\mathcal{F}(N, E^*)$, poiché $H(f^*) = E^*$ e $S^{\text{td}}(E^*, V, N) = kS(f^*)$, si ha per ogni $f \in \mathcal{F}(N)$,

$$F(f) \geq F(f^*)$$

Inoltre se $H(f) \neq E^*$, $F(f) > F(f^*)$ per l'unicità del minimizzante nella (7.13), mentre se $H(f) = E^*$ e $f \neq f^*$, allora $F(f) > F(f^*)$ perché $S(f) < S(f^*)$ per il Teorema 6.2.1. Abbiamo così dimostrato che $F(f) > F(f^*)$ per ogni $f \in \mathcal{F}(N)$, $f \neq f^*$. Per completare la dimostrazione del teorema rimane da far vedere che il valore di β^* nella Maxwelliana f^*

è $\beta^* = 1/kT$. Osserviamo a tal scopo che il minimizzante E^* nella (7.13) è un punto di stazionarietà e quindi

$$\left(\frac{\partial S^{\text{td}}}{\partial E} \right)_{V,N} (E^*, V, N) = \frac{1}{T} \quad (7.14)$$

D'altra parte per la (7.8), se β^* è il valore del parametro β nella Maxwelliana f^* , allora

$$k\beta^* = \left(\frac{\partial S^{\text{td}}}{\partial E} \right)_{V,N} (E^*, V, N) = \frac{1}{T}$$

Il Teorema 7.3.1 è dimostrato. \square

L'energia libera termodinamica, $F^{\text{td}}(T, V, N)$, è definita come

$$F^{\text{td}}(T, V, N) := \min_S \{E^{\text{td}}(S, V, N) - TS\} \quad (7.15)$$

in cui $E^{\text{td}}(S, V, N)$ è definita come segue. Poiché per la (7.1), a V e N fissati, $S^{\text{td}}(E, V, N)$ è una funzione crescente di E , essa può essere invertita definendo la funzione $E^{\text{td}}(S, V, N)$ che appare nella (7.15), in cui appunto l'energia è interpretata come un potenziale termodinamico nelle variabili indipendenti (S, V, N) : l'energia libera F^{td} è allora la trasformata di Legendre di E^{td} . Data la corrispondenza monotona tra E^{td} e S^{td} , l'inf nel membro di destra della (7.15) è lo stesso che nella (7.13), da cui si deduce che l'inf del funzionale di energia libera è l'energia libera termodinamica. \square

Reservoir termico

Vogliamo mostrare che il Principio Variazionale contenuto nel Teorema 7.2 corrisponde alla ben nota legge termodinamica secondo cui l'equilibrio di un sistema in contatto termico con un reservoir a temperatura fissata è raggiunto minimizzando l'energia libera, e quindi, all'equilibrio, la temperatura del sistema è uguale a quella del reservoir.

Reservoir termico a temperatura T . Deve intendersi come un sistema fisico “molto grande in equilibrio a temperatura T . Matematicamente sarà schematizzato come una successione di sistemi sempre più grandi in cui temperatura e densità sono sempre le stesse, il reservoir corrisponderà al comportamento limite della successione. Per fissare le idee scegliamo una successione Λ_n di regioni crescenti in cui poniamo un gas di Boltzmann nello stato Maxwelliano con parametri β^{res} e ρ^{res} fissati. Ci riferiremo al sistema nello stato Λ_n come alla “approssimazione n -esima del reservoir.

Contatto energetico, pareti termiche. Supponiamo ora di avere il nostro sistema in una regione Λ con energia E e numero di molecole N . Se isolato il suo stato di equilibrio è lo stato Maxwelliano che massimizza l'entropia in $\mathcal{F}(N, E)$. Vogliamo invece “metterlo in contatto termico con il reservoir (ovvero con la sua approssimazione n -esima). Ciò vuol dire che le molecole dei due gas interagiscono tra loro, ma non sono libere di lasciare le rispettive regioni. Vi è dunque una parete che separa i due sistemi che impedisce migrazioni

tra l'uno e l'altro, ma che permette scambi di energia. Si suppone allora che lo stato di equilibrio del sistema complessivo sia raggiunto massimizzando l'entropia totale

$$S_{\text{tot}}(f) = S_{\text{sist}}(f_{\text{sist}}) + S_{\text{res}}(f_{\text{res}}) \quad (7.16)$$

dove $f = f(r, v)$ è una funzione definita per $r \in \Lambda \cup \Lambda_n$ (Λ_n è la regione corrispondente all'approssimazione n -esima del reservoir) e $v \in \mathbb{R}^3$. $f_{\text{sist}}(r, v)$ e $f_{\text{res}}(r, v)$ sono le restrizioni di f per $r \in \Lambda$ e $r \in \Lambda_n$. Il massimo della (7.16) va cercato sulle $f \in \mathcal{F}(E + E_n, N, N_n)$, cioè le funzioni la cui energia totale è la somma dell'energia E del sistema e dell'energia E_n del reservoir e tali che abbiano N molecole in Λ e N_n in Λ_n :

$$\int_{\Lambda \cup \Lambda_n} dr \int_{\mathbb{R}^3} dv f(r, v) \frac{mv^2}{2} = E + E_n$$

(supponendo per semplicità di scrittura che il reservoir sia costituito dalle stesse molecole del sistema)

$$\int_{\Lambda} dr \int_{\mathbb{R}^3} dv f(r, v) = N, \quad \int_{\Lambda_n} dr \int_{\mathbb{R}^3} dv f(r, v) = N_n$$

Soluzione del principio variazionale quando il reservoir è in approssimazione n -esima. Il massimo di S_{tot} può essere ottenuto cercando prima il massimo relativamente a $f_{\text{sist}} \in \mathcal{F}(E', N, \Lambda)$ e $f_{\text{res}} \in \mathcal{F}(E'', N_n, \Lambda_n)$, dove E' e E'' sono due qualunque energie tali che $E' + E'' = E + E_n$ e avendo, in questa occasione, esplicitato nell'argomento di \mathcal{F} la dipendenza dalla regione. Si dovrà poi massimizzare su E' e E'' .

Per il Teorema 6.2.1, al termine della prima operazione si avranno due Maxwelliane (in Λ e in Λ_n) con parametri determinati da $(E', |\Lambda|, N)$ e $(E'', |\Lambda_n|, N_n)$. Sotto queste condizioni l'entropia massima è

$$S^{\text{td}}(E', |\Lambda|, N) + S^{\text{td}}(E'', |\Lambda_n|, N_n), \quad E' + E'' = E_{\text{tot}} = E + E_n$$

Scrivendo E'' in termini di E' abbiamo

$$S^{\text{td}}(E', |\Lambda|, N) + S^{\text{td}}(E_{\text{tot}} - E', |\Lambda_n|, N_n)$$

che ha come punto di stazionarietà

$$\left. \frac{\partial S^{\text{td}}(e, |\Lambda|, N)}{\partial e} \right|_{e=E'} = \left. \frac{\partial S^{\text{td}}(e, |\Lambda_n|, N_n)}{\partial e} \right|_{e=E''} =: \frac{1}{T_n^{\text{eq}}} \quad (7.17)$$

Ricordando la (7.7), le energie che corrispondono alla temperatura T_n^{eq} sono

$$E' = \frac{3}{2} k T_n^{\text{eq}} N, \quad E'' = \frac{3}{2} k T_n^{\text{eq}} N_n$$

Indicando con T la temperatura del reservoir (prima che fosse posto in contatto col sistema)

$$E_n = \frac{3}{2} k T N_n$$

ricaviamo T_n^{eq} come soluzione dell'equazione

$$E_{\text{tot}} = E + \frac{3}{2} k T N_n = \frac{3}{2} k T_n^{\text{eq}} N + \frac{3}{2} k T_n^{\text{eq}} N_n$$

Abbiamo quindi dimostrato che

$$kS_{\text{tot}}(f) \leq S^{\text{td}}(E', |\Lambda|, N) + S^{\text{td}}(E'', |\Lambda_n|, N_n), \quad E' = \frac{3}{2}kT_n^{\text{eq}}N, \quad E'' = \frac{3}{2}kT_n^{\text{eq}}N_n$$

Chiamando $M_{\text{sist}}^{(n)}$ e $M_{\text{res}}^{(n)}$ le Maxwelliane in Λ e Λ_n con $\beta = 1/kT_n^{\text{eq}}$, abbiamo

$$S_{\text{tot}}(f) \leq S_{\text{res}}(M_{\text{res}}^{(n)}) + S_{\text{sist}}(M_{\text{sist}}^{(n)})$$

L'uguaglianza vale per f tale che $f_{\text{sist}} = M_{\text{sist}}^{(n)}$ e $f_{\text{res}} = M_{\text{res}}^{(n)}$. L'equilibrio, in questa approssimazione per il reservoir, è quindi descritto dallo stato $f_{\text{sist}} = M_{\text{sist}}^{(n)}$ e $f_{\text{res}} = M_{\text{res}}^{(n)}$.

Limite per $n \rightarrow +\infty$. Dividendo per N_n :

$$T_n^{\text{eq}}[1 + \frac{N}{N_n}] = T + \frac{2E}{3kN_n}$$

Poichè $mN_n = \rho|\Lambda_n|$ diverge per $n \rightarrow +\infty$ si deduce che $T_n^{\text{eq}} \rightarrow T$ quando $n \rightarrow +\infty$ e quindi che $M_{\text{sist}}^{(n)}$ converge alla Maxwelliana con $\beta = 1/kT$, che per il Teorema 7.3.1 minimizza l'energia libera.

Il potenziale termodinamico Ω^{td}

Nella definizione degli stati di Gibbs è conveniente utilizzare un altro Principio Variazionale. Dati $T > 0$, $\lambda \in \mathbb{R}$ (che saranno poi identificati con temperatura e potenziale chimico) e una regione limitata Λ definiamo il funzionale

$$\Omega(f) := F(f) - \lambda N(f) \quad (7.18)$$

dove $f(r, v)$, $r \in \Lambda$, è una funzione regolare; $F(f)$ (la cui dipendenza da T non è esplicitata) è definita nella (7.12) e $N(f)$ è l'integrale di f .

Teorema 7.3.2. *Il funzionale $\Omega(f)$ definito nella (7.18) ha un unico minimo, Ω^{td} , che è raggiunto per $f = f_{\beta, \rho, \Lambda}$ con $\beta = 1/kT$ e con $\rho = mN/|\Lambda|$ tale che*

$$\left(\frac{\partial F^{\text{td}}}{\partial N} \right)_{T, V} = \lambda \quad (7.19)$$

dove T , $V = |\Lambda|$ e λ sono i parametri che entrano nella definizione di $\Omega(f)$. Inoltre

$$\Omega^{\text{td}} = -PV \quad (7.20)$$

con P la pressione per i dati valori di T , V e N .

Dimostrazione.

Procedendo come nella dimostrazione del Teorema 7.2 si trova che l'inf, Ω^{td} , di $\Omega(f)$ è raggiunto su una Maxwelliana e soddisfa la relazione

$$\Omega^{\text{td}} = \inf_N \{F^{\text{td}}(T, V, N) - \lambda N\} \quad (7.21)$$

La (7.19) è l'equazione per i punti di stazionarietà della funzione di cui cerchiamo l'inf nella (7.21). È vero in generale che, fissati T e V , l'energia libera termodinamica è una funzione (nel nostro caso strettamente) convessa di N (vedi sotto) e quindi il minimo è unico e coincide con un punto di stazionarietà. La (7.19) segue allora dalla (7.21). Per il Teorema 7.3.1 l'inf di $F(f)$ è realizzato dalla Maxwelliana con parametro $\beta = 1/kT$ e la densità ρ è poi determinata dal valore di N per cui si ha il minimo nella (7.21), che a sua volta è determinato da λ mediante la (7.19).

La convessità in N della $F^{\text{td}}(T, V, N)$ è vera in generale, ma risulta evidente, per calcolo esplicito, nel caso del gas di Boltzmann: usando le (7.5)-(7.6)

$$F^{\text{td}}(T, V, N) = \frac{3N}{2\beta} + \frac{N}{\beta} \left(\log \frac{N}{V} + \frac{3}{2} \log \left\{ \frac{\beta m}{2\pi} \right\} - \frac{3}{2} \right) \quad (7.22)$$

La (7.19) diventa:

$$\lambda = \frac{3}{2\beta} + \frac{1}{\beta} \left(\log \frac{N}{V} + \frac{3}{2} \log \left\{ \frac{\beta m}{2\pi} \right\} - \frac{3}{2} \right) + \frac{1}{\beta} \quad (7.23)$$

che quindi determina N in funzione di λ , V e $\beta = 1/kT$.

Concludiamo con il calcolo esplicito di Ω^{td} . Indicando con N il valore in cui è raggiunto il minimo nella (7.21) e usando la (7.23):

$$\Omega^{\text{td}} = F^{\text{td}}(T, V, N) - \lambda N = -\frac{N}{\beta} \quad (7.24)$$

che, ricordando che il gas di Boltzmann soddisfa l'equazione di stato dei gas perfetti, (7.9), dimostra la (7.20). \square

7.4. Complementi

Un'altra dimostrazione della (7.20).

La dimostrazione del Teorema 7.3.2 può far sorgere il sospetto che la validità della (7.20) sia limitata ai gas perfetti (quale il gas di Boltzmann) e quindi non applicabile quando le interazioni tra molecole non siano trascurabili, come nei sistemi che considereremo nei prossimi capitoli. Vedremo qui che la (7.20) discende in realtà da leggi generali della termodinamica. La dimostrazione si basa su due fatti. Il primo è, come vedremo, una semplice identità conseguenza di proprietà delle trasformate di Legendre:

$$\lambda = \left(\frac{\partial F^{\text{td}}(T, V, N)}{\partial N} \right)_{T,V} = \left(\frac{\partial \Phi^{\text{td}}(T, P, N)}{\partial N} \right)_{T,P} \quad (7.25)$$

dove $\Phi^{\text{td}}(T, P, N)$ è un potenziale termodinamico, l'energia libera di Gibbs, che è data dall'espressione

$$\Phi^{\text{td}}(T, P, N) = F^{\text{td}}(T, V, N) + PV \quad (7.26)$$

in cui V nel membro di destra deve essere pensato come funzione di (T, P, N) , $V = V(T, P, N)$, come vedremo più avanti.

Il secondo fatto è una legge termodinamica la cui origine verrà anche essa discussa più avanti. Essa afferma che, fissate temperatura T e pressione P , l'energia libera di Gibbs diventa una funzione lineare di N :

$$\Phi^{\text{td}}(T, P, N) = N\Phi^{\text{td}}(T, P, 1) \quad (7.27)$$

che, insieme alla (7.25), implica

$$\lambda = \Phi(T, P, 1) \quad (7.28)$$

e quindi

$$\Phi^{\text{td}}(T, P, N) = \lambda N \quad (7.29)$$

Confrontando con la (7.26) si ha allora

$$\lambda N = F^{\text{td}}(T, V, N) + PV \quad (7.30)$$

e quindi

$$\Omega^{\text{td}} = F^{\text{td}}(T, V, N) - \lambda N = -PV \quad (7.31)$$

che era quanto volevamo dimostrare.

Rimangono quindi da discutere le (7.25)-(7.26) e la (7.27). Iniziamo dalle prime. Dimostrerò che

$$\left(\frac{\partial F^{\text{td}}(T, V, N)}{\partial V} \right)_{T, N} = -P \quad (7.32)$$

Infatti, poiché $F^{\text{td}}(T, V, N)$ è la trasformata di Legendre di $E^{\text{td}}(S, V, N)$, cioè dell'energia come potenziale termodinamico, si veda la (7.15),

$$\left(\frac{\partial F^{\text{td}}(T, V, N)}{\partial V} \right)_{T, N} = \left(\frac{\partial E^{\text{td}}(S, V, N)}{\partial V} \right)_{S, N} \quad (7.33)$$

D'altra parte $E^{\text{td}}(S, V, N)$ era stata definita invertendo la funzione $S = S^{\text{td}}(E, V, N)$, cosicché, per definizione,

$$S \equiv S^{\text{td}}(E^{\text{td}}(S, V, N), V, N)$$

Derivando quest'ultima rispetto a V a S e N fissati, si ha

$$0 = \left(\frac{\partial S^{\text{td}}(E, V, N)}{\partial E} \right)_{V, N} \left(\frac{\partial E^{\text{td}}(S, V, N)}{\partial V} \right)_{S, N} + \left(\frac{\partial S^{\text{td}}(S, V, N)}{\partial V} \right)_{E, N}$$

Usando la (7.1) si trova

$$\left(\frac{\partial E^{\text{td}}(S, V, N)}{\partial V} \right)_{S, N} = -P \quad (7.34)$$

che con la (7.33) dimostra la (7.32). Si può vedere che la concavità di S^{td} in V implica la convessità di F^{td} in V e quindi che la (7.32) può essere invertita, ottenendo così V in funzione di (P, T, N) . La (7.26) è dunque la trasformata di Legendre di F^{td} e la (7.25) è la ben nota proprietà sull'invarianza per trasformazioni di Legendre delle derivate rispetto a parametri, N in questo caso.

La (7.27) si basa sulla legge termodinamica che afferma che S , E , V e N sono grandezze estensive. L'affermazione è evidente nel contesto del gas di Boltzmann ricordando le (6.3) e (6.4), per spiegarne il contenuto nel caso generale, consideriamo un gas in equilibrio in una regione Λ , e uno identico in una regione Λ' uguale alla precedente e nelle medesime condizioni. Mettiamo poi i due in contatto permettendo scambi di energia e di materia. Ovviamente il volume del sistema complessivo è il doppio di quello dei singoli e così il numero di molecole (e la massa). Anche l'energia è doppia, ove si trascuri quella di interazione in quanto solo proporzionale alla superficie mentre E è molto più grande essendo proporzionale al volume (considerazioni queste che saranno rese precise nel capitolo successivo, studiando il limite termodinamico della pressione nel modello di Ising). Mentre l'additività di E , V , N è una proprietà ovvia e di natura meccanica (unita alle considerazioni precedenti sull'energia di interazione) l'additività dell'entropia è una ipotesi fisica che è il vero contenuto della legge termodinamica che stiamo considerando. Questa cioè afferma che nell'esempio precedente anche l'entropia raddoppia e più in generale che se r è un parametro reale positivo ($r = 2$ nell'esempio)

$$S^{\text{td}}(rE, rV, rN) = rS^{\text{td}}(E, V, N) \quad (7.35)$$

Dalla (7.1) si deduce allora che P e T sono invece intensive, cioè che

$$P(rE, rV, rN) = P(E, V, N), \quad T(rE, rV, rN) = T(E, V, N)$$

Conseguentemente, ricordando le loro definizioni si trova che

$$F^{\text{td}}(T, rV, rN) = rF^{\text{td}}(T, V, N)$$

e

$$\Phi^{\text{td}}(T, P, rN) = r\Phi^{\text{td}}(T, P, N) \quad (7.36)$$

Si osservi che la (7.36) è esattamente la (7.27), abbiamo quindi completato la dimostrazione della (7.20) nel nuovo contesto.

In conclusione osserviamo che E^{td} , F^{td} e Φ^{td} sono legate da trasformazioni di Legendre

$$\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S^{\text{td}}, V} = \left(\frac{\partial F^{\text{td}}}{\partial N}\right)_{T, V} = \left(\frac{\partial \Phi^{\text{td}}}{\partial N}\right)_{T, P} = \lambda \quad (7.37)$$

e che il potenziale termodinamico Ω^{td} è anche esso una funzione estensiva.

Interpretazione fisica del Teorema 7.3.2

Il Principio Variazionale contenuto nel Teorema 7.3.2 corrisponde ad una situazione fisica in cui un sistema è posto in contatto termico con un reservoir in uno stato di temperatura T e potenziale chimico λ . Si suppone che la parete che divide il sistema dal reservoir permetta non solo scambi energetici, come nel caso considerato precedentemente, ma anche scambi di materia, molecole (identiche nel sistema e nel reservoir) possono passare dall'uno all'altro. L'ipotesi fisica è allora che l'equilibrio complessivo si ottenga massimizzando l'entropia totale su funzioni f che abbiano energia totale e numero totale di particelle fissati. Nel limite ideale in cui il reservoir è descritto da regioni Λ_n sempre più grandi l'equilibrio

per il sistema è raggiunto minimizzando il potenziale Ω^{td} . La dimostrazione di questa affermazione è omessa.

Principio variazionale per Φ

Dati N ed P positivi si definisce il funzionale di “energia libera di Gibbs”

$$\Phi(f) := H(f) - TS(f) + PV(f) \quad (7.38)$$

come funzionale sulle funzioni regolari f a supporto in una qualche regione regolare e limitata Λ , (il cui volume è indicato con $V(f) = |\Lambda|$). Regioni con lo stesso volume saranno considerate equivalenti nel prossimo teorema.

Teorema 7.4.1. *Il funzionale Φ definito nella (7.38) ha un unico minimo raggiunto per $f = f_{\beta, \rho, \Lambda}$, dove $\beta = 1/kT$ e $|\Lambda|$ è tale che la pressione è uguale a P .*

Dimostrazione.

L'estremo inferiore dei valori $\Phi(f)$ è

$$\Phi = \inf_V \{F^{\text{td}}(T, V, N) + PV\} \quad (7.39)$$

che si ottiene usando il Teorema 7.3.1, considerando $f \in \mathcal{F}(N)$ con supporto in una data, ma arbitraria regione Λ di volume V . $F^{\text{td}}(T, V, N)$ è una funzione convessa di V (a T e N fissati) come segue dall'espressione esplicita (7.22), ma l'affermazione è vera in generale, come già osservato. Inoltre dalla (7.32) (che segue anche dal calcolo esplicito per il gas di Boltzmann) si deduce che la pressione dello stato che minimizza Φ è il valore P che interviene nella definizione del funzionale $\Phi(f)$. \square

L'analogo fisico del principio variazionale del Teorema 7.4.1 si ottiene introducendo pareti mobili che permettono di variare il volume del sistema e del reservoir, mantenendo costante il volume totale; la parete permette scambi energetici ma non di materia. Allora un sistema in contatto mediante questo tipo di pareti con un reservoir la cui la pressione sia P e la temperatura T , raggiunge l'equilibrio per il volume V per cui si realizza l'inf:

$$\inf_V \{F^{\text{td}}(T, V, N) + PV\}$$

La dimostrazione di questa affermazione è anche essa omessa.

CAPITOLO 8

MISURE DI GIBBS NEL MODELLO DI ISING

In questo capitolo inizieremo l'analisi delle misure di Gibbs partendo dal caso più semplice del modello di Ising che descrive un sistema di momenti magnetici interagenti, spin. Le misure di Gibbs descrivono gli stati di equilibrio termodinamico del sistema. Sebbene strettamente parlando, questa sia solo una congettura, essa è tuttavia così ampiamente suffragata da riscontri sperimentali che è generalmente, se non universalmente, accettata come vera. L'ipotesi di Gibbs costituisce il punto di partenza per la nostra analisi delle proprietà macroscopiche dei sistemi in equilibrio diretta a stabilire come le grandezze termodinamiche dipendano dalle forze intermolecolari.

8.1. Il modello di Ising

Gas interagenti

L'energia nel gas di Boltzmann è solo energia cinetica, in quanto limite dell'energia di un sistema meccanico in cui, per l'ipotesi di rarefazione, l'energia potenziale è trascurabile (conviene qui pensare al caso di particelle che interagiscono tra loro tramite un potenziale regolare, repulsivo e a supporto compatto). Infatti le particelle hanno distanze mutue che divergono nel limite macroscopico, mentre l'interazione ha portata finita. Al contrario, in solidi, fluidi e in gas non troppo rarefatti, le distanze tipiche tra le molecole sono comparabili con la portata delle forze intermolecolari e queste ultime perciò contribuiscono in modo effettivo all'energia totale del sistema.

La sola densità di particelle $f(r, v)$ non è più sufficiente, come nel gas di Boltzmann, per determinare l'energia. Il fatto è che esistono configurazioni che pur avendo stessa densità, hanno distanze inter-particellari diverse, conseguentemente le loro energie possono differire anche drasticamente. Un esempio molto schematico per chiarire questa affermazione. Calcoliamo l'energia potenziale di due configurazioni di particelle che per semplicità supponiamo su \mathbb{Z} . Una ha particelle solo sui siti pari, quindi la sua densità vale $1/2$ ed è la stessa che si ottiene mettendo due particelle in due siti contigui, lasciando poi i due siti successivi vuoti, riempiendo i due seguenti e così via. Se l'energia dipendesse solo dalla densità, le due configurazioni sarebbero energeticamente uguali, ma se l'interazione interparticellare ha range minore di 2 ed è diversa da 0 a distanza 1, allora la prima configurazione ha energia 0 e la seconda una densità di energia finita e non nulla.

In conclusione se la distanza mutua tra particelle è dell'ordine della portata della forza il contributo energetico di una configurazione dipende in modo complesso dalla configurazione stessa ed occorre conoscerne ulteriori dettagli, la semplice densità di molecole considerata sinora non basta più.

In linea di principio gli stati di equilibrio si dovrebbero dedurre dallo studio asintotico dell'evoluzione temporale del sistema in un qualche limite macroscopico del tipo considerato nei capitoli precedenti. Ma l'evoluzione è molto più complessa che nel gas di Boltzmann dove in media le particelle hanno urti solo dopo tempi macroscopici, per cui il cammino libero medio è anch'esso macroscopico. Nei fluidi invece è dell'ordine delle distanze intermolecolari, quindi il numero di urti per unità di tempo macroscopico diverge e l'analisi dell'evoluzione è un problema infinitamente più complesso, sostanzialmente al di là delle attuali possibilità.

In conclusione, il contesto che vogliamo studiare è profondamente diverso dai precedenti e si traduce, a livello macroscopico, in una termodinamica che non è più quella dei gas perfetti (l'energia interna non è più solo cinetica) e, a livello microscopico, nell'esistenza di complesse correlazioni tra le particelle, che non saranno più distribuite in modo indipendente.

La nostra analisi si baserà sulla congettura che gli stati di equilibrio siano caratterizzati da un principio variazionale. La congettura è verificata nel gas di Boltzmann, ma a differenza da quest'ultimo, il principio variazionale interviene ora già al livello microscopico, e non dopo un limite macroscopico, quale quello cinetico di Boltzmann-Grad. L'ipotesi è tutt'altro che innocua e, come vedremo, per certi versi contraddittoria. Occorre quindi sottolineare ancora una volta che la vera giustificazione della teoria, al di là di tutte le considerazioni teoriche, è da ricercarsi nelle moltissime conferme sperimentali.

Avendo così abbandonato la speranza di ottenere gli stati di equilibrio risolvendo le equazioni del moto, conviene, per illustrare più semplicemente il contenuto dell'ipotesi di Gibbs, studiare per primi dei sistemi che, essendo fortemente schematizzati, rendono l'analisi notevolmente più semplice. In questa ottica va visto il modello di Ising, in cui sono assenti le velocità e la dinamica non è nemmeno definita! (almeno in modo diretto). Il sistema fisico cui ci si riferisce è un cristallo, i cui atomi (molecole) sono disposti in un reticolo regolare, \mathbb{Z}^d , $d \geq 1$. Lo stato degli atomi del cristallo è in prima approssimazione caratterizzato dalla magnetizzazione, tutti gli altri gradi di libertà possono considerarsi congelati. Ancora più drasticamente, assumerò che la magnetizzazione abbia solo due valori, l'uno l'opposto dell'altro. Chiamando nel seguito "spin" la magnetizzazione e scegliendo opportunamente le unità di misura, possiamo dunque supporre che lo spin assuma solo i valori ± 1 . Il modello di spin è equivalente ad un modello di particelle sul reticolo, lattice gas, che può essere studiato anche in alternativa al modello di Ising, si veda l'Appendice D.

8.2. Spazio delle fasi ed energia nel modello di Ising

Lo spazio delle configurazioni degli spin in una regione limitata $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ è l'insieme $\{-1, 1\}^\Lambda$, i cui elementi sono funzioni su Λ a valori ± 1 :

$$\sigma_\Lambda = \{\sigma_\Lambda(x), x \in \Lambda\}, \quad \sigma_\Lambda(x) = \pm 1 \quad (8.1)$$

Lo spin in $x \in \Lambda$ è il valore $\sigma_\Lambda(x)$ che ha in x la configurazione σ_Λ .

L'energia $H_\Lambda = H_\Lambda(\sigma_\Lambda)$, con interazione $\{J(x, y), x \neq y \text{ in } \Lambda\}$ e campo magnetico esterno h , è

$$H_\Lambda = H_\Lambda^{(J)} + H_\Lambda^{(h)}; \quad H_\Lambda^{(J)} = -\frac{1}{2} \sum_{x \neq y} J(x, y) \sigma_\Lambda(x) \sigma_\Lambda(y), \quad H_\Lambda^{(h)} = -h m_\Lambda \quad (8.2)$$

dove la somma è su tutti gli $x \neq y$ in Λ e

$$m_\Lambda = \sum_{x \in \Lambda} \sigma_\Lambda(x) \quad (8.3)$$

è la magnetizzazione totale.

$H_\Lambda^{(J)}$ è l'energia di interazione tra gli spin, $-J(x, y) \sigma_\Lambda(x) \sigma_\Lambda(y)$ quella tra gli spin in x e y . $H_\Lambda^{(h)}$ è invece l'energia di interazione dovuta al campo magnetico esterno h , $-h \sigma_\Lambda(x)$ quella del singolo spin in x .

Il segno meno nella (8.2) è convenzionalmente scelto in modo che se $J(x, y) > 0$, allora l'energia di interazione tra gli spin in x e y è minima quando $\sigma_\Lambda(x) = \sigma_\Lambda(y)$ e, se $h > 0$, l'energia dello spin in x dovuta al campo esterno è minima quando lo spin ha lo stesso segno di h , è cioè "allineato" con h . Lo stato di energia minima, se tutte le interazioni sono non negative, è quindi quello in cui tutti gli spin sono allineati tra loro (hanno lo stesso valore) e con h . $J \geq 0$ corrisponderà quindi a sostanze ferromagnetiche, $J \leq 0$ a sostanze antiferromagnetiche e se J ha sia valori positivi che negativi, a situazioni miste in cui alcuni legami ($J(x, y)$ è "il legame tra x e y ") sono ferromagnetici ed altri antiferromagnetici.

Funzionali termodinamici, Principi Variazionali

Per conoscere lo stato del sistema dobbiamo sapere come sono distribuiti gli spin, cioè conoscere la probabilità $\mu_\Lambda(\sigma_\Lambda)$ delle varie configurazioni di spin. Come detto nell'introduzione di questa sezione, la presenza dell'interazione introduce correlazioni tra gli spin che non saranno perciò variabili indipendenti e la misura non sarà prodotto. È naturale definire, in analogia con le considerazioni del capitolo precedente, l'entropia di uno stato μ_Λ come

$$S_\Lambda(\mu_\Lambda) = -k \sum_{\sigma_\Lambda} \mu_\Lambda(\sigma_\Lambda) \log \mu_\Lambda(\sigma_\Lambda) \quad (8.4)$$

L'energia di μ_Λ come

$$E_\Lambda(\mu_\Lambda) = E_\Lambda^{(J)}(\mu_\Lambda) - h M_\Lambda(\mu_\Lambda) \quad (8.5)$$

dove

$$E_{\Lambda}^{(J)}(\mu_{\Lambda}) = \sum_{\sigma_{\Lambda}} \mu_{\Lambda}(\sigma_{\Lambda}) H_{\Lambda}^{(J)}(\sigma_{\Lambda}), \quad M_{\Lambda}(\mu_{\Lambda}) = \sum_{\sigma_{\Lambda}} \mu_{\Lambda}(\sigma_{\Lambda}) m_{\Lambda}(\sigma_{\Lambda}) \quad (8.6)$$

S_{Λ} , E_{Λ} e M_{Λ} sono dunque funzionali sullo spazio $\mathcal{M}(\{-1, 1\}^{\Lambda})$ di tutte le probabilità su $\{-1, 1\}^{\Lambda}$, che è la stessa cosa che dire che sono funzioni di un numero finito di variabili reali, le $\mu_{\Lambda}(\sigma_{\Lambda})$.

La termodinamica di un sistema magnetico è analoga a quella di un sistema di particelle, interpretando il campo magnetico h come potenziale chimico e la magnetizzazione M_{Λ} come numero di particelle. Anche a livello microscopico esiste una corrispondenza tra spin e sistemi di particelle su reticolo, come discusso nell'Appendice D (su questo tema tornerò ancora nel prossimo capitolo). Con questa interpretazione di h e M_{Λ} , il funzionale

$$\Omega_{\Lambda} = E_{\Lambda}^{(J)} - TS_{\Lambda} - hM_{\Lambda} = E_{\Lambda} - TS_{\Lambda}, \quad T > 0 \quad (8.7)$$

corrisponde, nel presente contesto, al funzionale Ω definito nella (7.18). Ricordando la (7.20) definiamo perciò il funzionale

$$\Pi_{\Lambda} = -\frac{1}{|\Lambda|} \left\{ E_{\Lambda} - TS_{\Lambda} \right\} \quad (8.8)$$

come il funzionale di pressione nel modello di Ising.

Teorema 8.2.1 (Misure di Gibbs). *Per ogni $T > 0$, il funzionale Π_{Λ} definito dalla (8.7) ha in $\mathcal{M}(\{-1, 1\}^{\Lambda})$ un unico massimo, $\mu_{\beta, h, \Lambda}$, dove $\beta = 1/kT$ e*

$$\mu_{\beta, h, \Lambda}(\sigma_{\Lambda}) = \frac{1}{Z_{\beta, h, \Lambda}} \exp\{-\beta H_{\Lambda}(\sigma_{\Lambda})\} \quad (8.9)$$

è “la misura, (probabilità), di Gibbs, con parametri β, h, Λ e interazione J ”;

$$Z_{\beta, h, \Lambda} = \sum_{\sigma_{\Lambda}} \exp\{-\beta H_{\Lambda}(\sigma_{\Lambda})\} \quad (8.10)$$

è “la funzione di partizione” (che è la costante di normalizzazione nella (8.9)). Inoltre

$$\Pi_{\Lambda}(\mu_{\beta, h, \Lambda}) = \frac{1}{\beta|\Lambda|} \log Z_{\beta, h, \Lambda} \quad (8.11)$$

Dimostrazione.

Il funzionale Π_{Λ} è funzione delle $2^{|\Lambda|}$ variabili $\mu_{\Lambda}(\sigma_{\Lambda})$, a valori, ciascuna, in $[0, 1]$. Le variabili non sono indipendenti, ma vincolate dalla relazione

$$\sum_{\sigma_{\Lambda}} \mu_{\Lambda}(\sigma_{\Lambda}) = 1 \quad (8.12)$$

Per trovare il massimo useremo il metodo dei moltiplicatori di Lagrange. Dobbiamo dunque calcolare i punti estremali della funzione

$$f(\{\mu_\Lambda(\sigma_\Lambda)\}) \equiv \Pi_\Lambda(\mu_\Lambda) - \lambda \left[\sum_{\sigma_\Lambda} \mu_\Lambda(\sigma_\Lambda) - 1 \right] \quad (8.13)$$

Ricordando la (8.8):

$$\frac{\partial f}{\partial \mu_\Lambda(\sigma_\Lambda)} = -\frac{1}{|\Lambda|} \left\{ H_\Lambda(\sigma_\Lambda) + kT \log \mu_\Lambda(\sigma_\Lambda) + kT + \lambda |\Lambda| \right\} \quad (8.14)$$

da cui la (8.9). Per verificare che quello trovato è un massimo basta ricordare che Π_Λ è una funzione concava di μ_Λ , conseguenza della concavità di S_Λ e della linearità di E_Λ .

Scrivendo μ per $\mu_{\beta,h,\Lambda}$, abbiamo

$$\Pi_\Lambda(\mu) = -\frac{1}{|\Lambda|} \left\{ E_\Lambda(\mu) + kT \sum_{\sigma_\Lambda} \mu(\sigma_\Lambda) \left[-\beta H_\Lambda(\sigma_\Lambda) - \log Z_{\beta,h,\Lambda} \right] \right\} \quad (8.15)$$

da cui la (8.11). □

Osservazioni e Commenti

Si osservi che se $J = 0$ allora la misura di Gibbs è una misura prodotto, dunque le misure prodotto rappresentano il “caso semplice” della teoria, quello in cui le interazioni sono assenti. I casi fisicamente interessanti sono invece quelli in cui le interazioni non sono trascurabili, l’analisi diventa allora ben più complessa.

Abbiamo adesso dei candidati per le grandezze termodinamiche del modello di Ising:

$$P_{\beta,h,\Lambda} = \Pi_\Lambda(\mu_{\beta,h,\Lambda}); \quad S_{\beta,h,\Lambda} = S_\Lambda(\mu_{\beta,h,\Lambda}); \quad E_{\beta,h,\Lambda} = E_\Lambda(\mu_{\beta,h,\Lambda}) \quad (8.16)$$

$$m_{\beta,h,\Lambda} = \sum_{\sigma_\Lambda} \mu_{\beta,h,\Lambda}(m_\Lambda(\sigma_\Lambda)) \quad (8.17)$$

Queste grandezze sono rispettivamente la pressione, l’entropia, l’energia e la magnetizzazione del modello di Ising nella regione Λ . L’identificazione con le variabili termodinamiche non è però veramente corretta, in quanto per essere termodinamiche dovrebbero essere la prima intensiva e le altre estensive. Invece tutte dipendono, e in modo complesso, dalla regione Λ . L’origine del problema è chiarissima, il sistema che stiamo considerando non è macroscopico, è un cristallo con un numero finito di atomi. Non ha quindi nessun motivo per esibire un corretto comportamento termodinamico. Da questo punto di vista l’analisi precedente è certamente una forzatura, avendo applicato un principio variazionale di natura (e validità) termodinamica e quindi macroscopica ad un sistema microscopico. Ne stiamo quindi pagando le conseguenze con una termodinamica non consistente. Vedremo tuttavia che queste patologie sono sempre meno rilevanti quanto più il sistema è “grande” e scompaiono nel limite in cui Λ invade l’intero spazio, limite termodinamico (o macroscopico).

8.3. Limite termodinamico per una successione di cubi

In questa sezione dimostreremo che se l'interazione è invariante per traslazione,

$$J(x, y) = J(0, y - x), \quad \text{per ogni } x \neq y \quad (8.18)$$

e ha range finito, allora la pressione $P_{\beta, h, \Lambda}$ definita nella (8.16) diventa sostanzialmente indipendente da Λ , se Λ è un cubo “abbastanza grande”, nella sezione successiva il risultato sarà esteso a regioni più generali.

Osserviamo innanzitutto che il problema non sussiste se $J(x, y) = 0$ per ogni $x \neq y$. In tal caso infatti

$$Z_\Lambda = \sum_{\sigma_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda^{(h)}(\sigma_\Lambda)} = \sum_{\sigma(x_1)=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma(x_N)=\pm 1} \exp \left\{ \beta h \sum_{i=1}^N \sigma(x_i) \right\} \quad (8.19)$$

avendo numerato in un qualche modo, per altro arbitrario, $\Lambda = \{x_1, \dots, x_N\}$. Poiché

$$\exp \left\{ \beta h \sum_{i=1}^N \sigma(x_i) \right\} = \prod_{i=1}^N \exp \left\{ \beta h \sigma(x_i) \right\}$$

possiamo sommare per primo $\sigma(x_N)$ ottenendo $2 \cosh(\beta h)$, poi $\sigma(x_{N-1})$ e così via ottenendo alla fine

$$Z_\Lambda = \left[2 \cosh(\beta h) \right]^N, \quad N = |\Lambda|$$

e quindi

$$P_{\beta, h, \Lambda} = \frac{1}{\beta |\Lambda|} \log Z_\Lambda = \frac{2 \cosh(\beta h)}{\beta} \quad (8.20)$$

che non dipende da Λ .

La proprietà di fattorizzazione trovata sopra non è più vera se $J \neq 0$, cioè quando gli spin interagiscono. Chiamiamo Δ_n i cubi con 2^n siti per lato.

Teorema 8.3.1. *Se $J(x, y)$ è invariante per traslazione, (8.18), ed ha range finito, esiste il limite della pressione P_{β, h, Δ_n} per $n \rightarrow +\infty$, il limite verrà indicato con $P_{\beta, h}$.*

Dimostrazione.

Per semplicità ci restringiamo al caso bidimensionale e scriviamo

$$\Delta_n = \Delta_{n-1}(1) \cup \cdots \cup \Delta_{n-1}(4)$$

avendo diviso il quadrato Δ_n di lato 2^n nei quattro quadrati identici di lato 2^{n-1} . Chiamando Z_n la funzione di partizione relativa a Δ_n , abbiamo

$$Z_n = \sum_{\sigma_{\Delta_{n-1}(1)}} \cdots \sum_{\sigma_{\Delta_{n-1}(4)}} \exp \left\{ -\beta H_{\Delta_{n-1}(1)}(\sigma_{\Delta_{n-1}(1)}) + \cdots + H_{\Delta_{n-1}(4)}(\sigma_{\Delta_{n-1}(4)}) - \beta I \right\} \quad (8.21)$$

dove I è l'energia di interazione tra gli spin di quadrati diversi:

$$I = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W\left(\sigma_{\Delta_{n-1}(i)} \middle| \sigma_{\Delta_{n-1}(j)}\right) \quad (8.22)$$

i e j vanno da 1 a 4,

$$W\left(\sigma_{\Delta_{n-1}(i)} \middle| \sigma_{\Delta_{n-1}(j)}\right) = - \sum_{x \in \Delta_{n-1}(i)} \sum_{y \in \Delta_{n-1}(j)} J(x, y) \sigma(x) \sigma(y) \quad (8.23)$$

Possiamo maggiorare $|W(\sigma_{\Delta_{n-1}(i)} \middle| \sigma_{\Delta_{n-1}(j)})|$ scrivendo

$$\left| W\left(\sigma_{\Delta_{n-1}(i)} \middle| \sigma_{\Delta_{n-1}(j)}\right) \right| \leq \sum_{x \in \Delta_{n-1}(i)} \sum_{y \in \Delta_{n-1}(j)} |J(x, y)|$$

Ricordando che $J(x, y) = 0$ se $|x - y| > R$, R il range finito del potenziale, abbiamo

$$\left| W\left(\sigma_{\Delta_{n-1}(i)} \middle| \sigma_{\Delta_{n-1}(j)}\right) \right| \leq \sum_{x \in \delta_R \Delta_{n-1}(i)} \sum_{y \in \Delta_{n-1}(j)} |J(x, y)|$$

dove

$$\delta_R \Delta_{n-1}(i) = \left\{ x \in \Delta_{n-1}(i) : \text{dist}(x, \Delta_{n-1}(i)^c) \leq R \right\}$$

Si ha allora

$$\left| W\left(\sigma_{\Delta_{n-1}(i)} \middle| \sigma_{\Delta_{n-1}(j)}\right) \right| \leq \sum_{x \in \delta_R \Delta_{n-1}(i)} \sum_{y \in \mathbb{Z}^2} |J(x, y)|$$

Se

$$J := \sum_{x \neq 0} |J(0, x)| < \infty \quad (8.24)$$

$$\left| W\left(\sigma_{\Delta_{n-1}(i)} \middle| \sigma_{\Delta_{n-1}(j)}\right) \right| \leq JR(42^{n-1}) \quad (8.25)$$

Infatti il numero di siti x in $\delta_R \Delta_{n-1}(i)$ è la somma del numero di siti sulla frontiera di $\Delta_{n-1}(i)$, cioè 42^{n-1} , piú il numero di siti sulla frontiera del quadrato di lato $2^{n-1} - 1$, e così via sino al quadrato di lato $2^{n-1} - [R]$, $[R]$ la parte intera di R . La somma è quindi maggiorata da $R(42^{n-1})$.

Dalla (8.22) si ha allora $I \leq 6JR(42^{n-1})$ e dalla (8.21)

$$Z_{n-1}^4 e^{-6\beta JR[42^{n-1}]} \leq Z_n \leq Z_{n-1}^4 e^{6\beta JR[42^{n-1}]} \quad (8.26)$$

Chiamando $P_n = P_{\beta, h, \Delta_n}$, si ottiene

$$|P_n - P_{n-1}| \leq \frac{6\beta J 2R[42^{n-1}]}{2^{2n}} \quad (8.27)$$

Poiché P_0 è limitato lo è anche, per la (8.27), la successione $\{P_n\}$ che, ancora per la (8.27) è di Cauchy e dunque converge. Il Teorema è quindi dimostrato. \square

In realtà la pressione $P_{\beta, h, \Lambda}$ è limitata per ogni Λ e non solo per la successione di cubi considerata nel Teorema precedente:

Lemma 8.3.2. *Esistono due numeri p_{\pm} per cui, per ogni regione finita Λ ,*

$$p_- \leq P_{\beta,h,\Lambda} \leq p_+ \quad (8.28)$$

Dimostrazione.

Per dimostrare la (8.28) si usa la (8.2) per scrivere

$$|H_{\Lambda}| \leq \frac{1}{2}|\Lambda| \sum_x |J(0,x)| + |h||\Lambda| \quad (8.29)$$

Quindi, ricordando che la somma su σ_{Λ} ha $2^{|\Lambda|}$ termini,

$$2^{|\Lambda|} e^{-\beta I|\Lambda|} \leq Z_{\beta,h,\Lambda} \leq 2^{|\Lambda|} e^{\beta I|\Lambda|}, \quad I = \frac{1}{2} \sum_x |J(0,x)| + |h| \quad (8.30)$$

Da cui la (8.28) con

$$p_{\pm} = \beta^{-1} \log 2 \pm I \quad (8.31)$$

8.4. Limite termodinamico per una successione di van Hove

In questa sezione dimostreremo l'esistenza del limite termodinamico della pressione $P_{\beta,h,\Lambda}$ per una qualunque successione crescente di regioni Λ che invada \mathbb{Z}^d nel senso di van Hove. Ciò esclude regioni in cui il numero di siti “vicini al bordo” sia comparabile col volume stesso della regione, per esempio regioni fatte a stella sono escluse da queste considerazioni.

Si denoterà nel seguito con Δ_m un “quadrato” in \mathbb{Z}^d (in realtà si deve intendere un ipercubo d -dimensionale di \mathbb{Z}^d), di lato m , m un intero positivo. Π_m sarà nel seguito una pavimentazione di \mathbb{Z}^d nei quadrati Δ_m , con ciò si intende che l'unione dei Δ_m ricopre \mathbb{Z}^d e che i Δ_m sono tra loro disgiunti salvo quelli contigui che hanno una faccia in comune. Allora, data una regione finita $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, si definisce

$$N^0(\Lambda, \Pi_m) = \text{numero di atomi di } \Pi_m \text{ contenuti in } \Lambda \quad (8.32)$$

$N(\Lambda, \Pi_m) = \text{numero di atomi di } \Pi_m \text{ che hanno intersezione non vuota con } \Lambda$ (8.33)
 N^0 e N sono quindi le misure interna ed esterna di Λ fatte utilizzando la pavimentazione Π_m , e ciò motiva la definizione seguente:

Definizione 8.4.1 (Il limite di Van Hove). *La successione $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$ nel senso di Van Hove se è una sequenza crescente di regioni finite tali che per ogni pavimentazione Π_m*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N^0(\Lambda_n, \Pi_m)}{N(\Lambda_n, \Pi_m)} = 1 \quad (8.34)$$

Teorema 8.4.2. *Se J ha range finito ed è invariante per traslazione, per ogni successione $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$ nel senso di Van Hove,*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_{\beta, h, \Lambda_n} = P_{\beta, h} \quad (8.35)$$

con $P_{\beta, h}$ come nel Teorema 8.3.1.

Dimostrazione.

Dimostreremo il teorema provando che il limite su una sequenza di Van Hove è lo stesso di quello della sequenza considerata nel Teorema 8.2. Sia $\Lambda = \Delta \cup \Gamma$, con Δ e Γ disgiunti, allora

$$\left| P_{\beta, h, \Lambda} - \left[\frac{|\Delta|}{|\Lambda|} P_{\beta, h, \Delta} + \frac{|\Gamma|}{|\Lambda|} P_{\beta, h, \Gamma} \right] \right| \leq I \frac{|\partial \Delta|}{|\Lambda|} \quad (8.36)$$

dove

$$\partial \Delta = \left\{ x \in \Delta : \text{esiste } y \notin \Delta \text{ e } J(x, y) \neq 0 \right\} \quad (8.37)$$

Ovviamente la (8.26) può anche scriversi come

$$\left| |\Lambda| P_{\beta, h, \Lambda} - [|\Delta| P_{\beta, h, \Delta} + |\Gamma| P_{\beta, h, \Gamma}] \right| \leq I |\partial \Delta| \quad (8.38)$$

Per dimostrare la (8.36) osserviamo che

$$H_\Lambda = H_\Delta + H_\Gamma - \sum_{x \in \Delta} \sum_{y \in \Gamma} J(x, y) \sigma(x) \sigma(y) \quad (8.39)$$

quindi

$$\left| H_\Lambda - [H_\Delta + H_\Gamma] \right| \leq \sum_{x \in \partial \Delta} \sum_{y \neq x} |J(x, y)| \leq |\partial \Delta| I \quad (8.40)$$

La (8.36) segue allora dalla (8.40) e dalla (8.11).

Data una pavimentazione Π_m , sia Γ la parte di Λ costituita da cubi Δ_m interamente contenuti in Λ , ne denoterò con N^0 il numero. Sia $\Lambda^{(m)}$ il resto della regione Λ , cosicché Λ è l'unione disgiunta di Γ e $\Lambda^{(m)}$. Usando la (8.36) otteniamo allora

$$|\Lambda| \left| P_{\beta, h, \Lambda} - \left(|\Gamma| P_{\beta, h, \Gamma} + |\Lambda^{(m)}| P_{\beta, h, \Lambda^{(m)}} \right) \right| \leq I |\Lambda| |\partial \Gamma| \quad (8.41)$$

Si osservi che

$$|\partial \Gamma| \leq N^0 |\partial \Delta_m| \quad (8.42)$$

Applicando ripetutamente la (8.38), si può esprimere $P_{\beta, h, \Gamma}$ in termini di P_{β, h, Δ_m} , ottenendo

$$\left| |\Lambda| P_{\beta, h, \Lambda} - N^0 |\Delta_m| P_{\beta, h, \Delta_m} \right| \leq 2 N^0 |\partial \Delta_m| I + |\Lambda^{(m)}| P_{\beta, h, \Lambda^{(m)}} \quad (8.43)$$

Si ha

$$|\Lambda^{(m)}| = |\Lambda| - N^0 |\Delta_m|; \quad N^0 |\Delta_m| \leq |\Lambda| \leq N |\Delta_m| \quad (8.44)$$

dove N è il numero di cubi della pavimentazione Π_m che hanno intersezione non vuota con Λ .

Riscriviamo la (8.43) usando le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} \left| \frac{N^0 |\Delta_m|}{|\Lambda|} - 1 \right| &= \frac{|\Lambda| - N^0 |\Delta_m|}{|\Lambda|} \leq \frac{N - N^0}{N^0} \\ 2N^0 \frac{|\partial \Delta_m|}{|\Lambda|} &\leq 2N^0 \frac{|\partial \Delta_m|}{N^0 |\Delta_m|} = 2 \frac{|\partial \Delta_m|}{|\Delta_m|} \\ \frac{|\Lambda^{(m)}|}{|\Lambda|} &= \frac{|\Lambda| - N^0 |\Delta_m|}{|\Lambda|} \leq 1 - \frac{N^0}{N} \leq \frac{N - N^0}{N^0} \end{aligned}$$

Si ha allora dalla (8.43)

$$\left| P_{\beta, h, \Lambda} - P_{\beta, h, \Delta_m} \right| \leq 2p_+ \frac{N - N^0}{N^0} + 2I \frac{|\partial \Delta_m|}{|\Delta_m|} \quad (8.45)$$

Sia Λ_n come nell'enunciato del Teorema. Ponendo $\Lambda = \Lambda_n$ nella (8.45), e facendo il limite per $n \rightarrow \infty$, $N/N^0 \rightarrow 1$ e quindi

$$\begin{aligned} \liminf P_{\beta, h, \Lambda_n} &\geq P_{\beta, h, \Delta_m} - 2 \frac{|\partial \Delta_m|}{|\Delta_m|} I \\ \limsup P_{\beta, h, \Lambda_n} &\leq P_{\beta, h, \Delta_m} + 2 \frac{|\partial \Delta_m|}{|\Delta_m|} I \end{aligned}$$

Scegliendo Δ_m come nel Teorema 8.2 si ottiene la (8.35). \square

8.5. La termodinamica del modello di Ising

La termodinamica di un sistema è determinata dalla conoscenza di uno qualunque dei potenziali termodinamici in funzione delle corrispondenti variabili indipendenti. Nel nostro caso è naturale scegliere come potenziale termodinamico la pressione $P_{\beta, h}$, del Teorema 8.5. Perché tale scelta sia termodinamicamente accettabile occorre però che la funzione abbia le corrette proprietà di convessità, che assicurano la validità del secondo principio della termodinamica.

Teorema 8.5.1. *La pressione $P_{\beta, h}$ definita nel Teorema 8.5 è una funzione convessa di $T = 1/k\beta$ e h .*

Si verifica con conti espliciti che $\log Z_{\beta, h, \Lambda}$ è una funzione convessa di β e quindi che anche $P_{\beta, h, \Lambda}$ è una funzione convessa di T . Analogamente si trova che $P_{\beta, h, \Lambda}$ è una funzione convessa di h . Si usa poi una proprietà generale per cui il limite di funzioni convesse è ancora convesso. Rimando all'Appendice C per dettagli.

Il Teorema 8.6 è solo un passo preliminare, ma necessario, per lo studio della termodinamica del modello di Ising. Questa risulta avere una struttura estremamente ricca e fisicamente significativa, al di là forse delle aspettative che una schematizzazione così cruda come quella del modello di Ising lasciavano supporre. Non è qui il caso di approfondire l'argomento, ma giusto per dare una idea accennerò brevemente al problema della transizione di fase, che nel contesto presente si riferisce al noto fenomeno di isteresi in sostanze ferromagnetiche. Ricordando quanto detto nella sezione §8.1, il modello è ferromagnetico se $J \geq 0$. Consideriamo il caso in cui $d = 2$ e $J(x, y) = J > 0$ se x e y sono primi vicini in \mathbb{Z}^2 e 0 altrimenti. Si è dimostrato che esiste $\beta_c > 0$, ($1/k\beta_c$ è la temperatura critica) e per $\beta < \beta_c$, $P_{\beta,h}$ è derivabile in h con derivata continua. Se invece $\beta > \beta_c$, allora la derivata di $P_{\beta,h}$ rispetto a h ha una discontinuità in $h = 0$. La derivata della pressione rispetto a h è uguale alla magnetizzazione, come si può vedere quando Λ è limitato derivando la (8.11). Quindi la magnetizzazione ad $h = 0$ (nel limite termodinamico) ha valore diverso a seconda che la si calcoli partendo da valori negativi o positivi di h , ovvero lo stato termodinamico ha memoria della storia passata del materiale (i valori del campo magnetico prima di porlo uguale a 0). Questo è il fenomeno di isteresi che appunto nel modello di Ising appare in forma molto chiara, in quanto suscettibile di una approfondita analisi matematica, cui ho solo brevemente accennato.

CAPITOLO 9

MISURE DI GIBBS PER SISTEMI DI PARTICELLE

Scopo di questo capitolo è di estendere a sistemi di particelle nel continuo la nozione di misura di Gibbs, introdotta nel capitolo precedente per sistemi sul reticolo. Il passaggio non è affatto banale e solleva non pochi problemi sia di natura tecnica che concettuale. Tra questi il principale riguarda la stabilità della materia, ovvero la possibilità che il sistema collassi in stati di densità infinita. I potenziali per cui ciò non accade sono “stabili” e per questi si ha una descrizione statistica, in termini appunto di “ensemble statistici”. Un ensemble statistico è una misura di Gibbs, ve ne sono di tre tipi: le misure di Gibbs gran-canoniche, canoniche e microcanoniche, che forniscono rappresentazioni diverse degli stati di equilibrio del sistema. Gli ensemble statistici diventano però uguali nel limite termodinamico, equivalenza degli ensemble, ristabilendo così l’univocità della descrizione.

9.1. Stabilità della materia

Considereremo un sistema di particelle puntiformi di uguale massa m , che interagiscono a coppie tramite forze di potenziale $V(|r_i - r_j|)$, le ipotesi sul potenziale verranno specificate nel seguito. L’energia di n particelle nelle posizioni r_1, \dots, r_n con velocità v_1, \dots, v_n è perciò

$$H(r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n) = T(v_1, \dots, v_n) + U(r_1, \dots, r_n) \quad (9.1)$$

dove

$$T(v_1, \dots, v_n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m v_i^2; \quad U(r_1, \dots, r_n) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(|r_i - r_j|) \quad (9.2)$$

Per ogni regione Λ in \mathbb{R}^3 , regolare e limitata,¹ per ogni $\beta > 0$ e λ reale definiamo la misura di Gibbs $\mu_{\beta, \lambda, \Lambda}$ (nella regione Λ , con potenziale chimico λ e temperatura $T = 1/k\beta$) come la misura di probabilità sullo spazio

$$\bigcup_{n \geq 0} \mathcal{X}_n, \quad \mathcal{X}_n = (\Lambda \times \mathbb{R}^3)^n \quad (9.3)$$

definita come la misura che ristretta a \mathcal{X}_n ha densità

$$\frac{1}{Z_{\beta, \lambda, \Lambda}} \frac{1}{n!} \exp\{-\beta[H(r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n) - \lambda n]\} \quad (9.4)$$

¹si suppone che le particelle siano confinate in Λ da pareti elastiche.

rispetto alla misura di Lebesgue $dr_1 \dots dv_n$. Nella (9.4) $Z_{\beta,\lambda,\Lambda}$ è la funzione di partizione:

$$Z_{\beta,h,\Lambda} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^3} dv_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} dv_n \int_{\Lambda} dr_1 \dots \int_{\Lambda} dr_n \exp\{-\beta[H(r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n) - \lambda n]\} \quad (9.5)$$

In particolare dalla (9.4) segue che la misura dell'insieme \mathcal{X}_n , cioè la probabilità che vi siano n particelle in Λ , è

$$\mu_{\beta,\lambda,\Lambda}(\mathcal{X}_n) = \frac{1}{Z_{\beta,\lambda,\Lambda}} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^3} dv_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} dv_n \int_{\Lambda} dr_1 \dots \int_{\Lambda} dr_n \exp\{-\beta[H(r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n) - \lambda n]\} \quad (9.6)$$

La misura di Gibbs è anche chiamata misura di Gibbs gran-canonica per distinguerla dalle altre misure di Gibbs, che sono le misure di Gibbs canoniche e microcanoniche, che verranno definite più avanti.

Osservazioni.

L'espressione (9.4) è analoga alla (8.9) del capitolo precedente, che definiva la misura di Gibbs nel modello di Ising. Come già osservato nella Sezione §8.1 e nell'Appendice D, per passare dagli spin alle particelle si deve cambiare h in λ , (campo magnetico in potenziale chimico) e ciascun spin in una coppia posizione-velocità. Le somme sono quindi sostituite da integrali.

L'espressione (9.4) avrebbe potuto derivarsi usando principi variazionali come nel modello di Ising. Il procedimento è simile, ma vi sono alcuni problemi tecnici che ho preferito evitare. Il fattore $n!$, nella (9.4) e seguenti, è dovuto alla indistinguibilità delle particelle. Infatti, usando la (9.4), la densità di probabilità che vi siano n particelle nel sistema e che gli stati occupati da queste siano $(r_1, v_1) \dots (r_n, v_n)$, (indipendentemente da quali particelle li occupino), è

$$\sum_{i_1 \dots i_n} \frac{1}{Z_{\beta,\lambda,\Lambda}} \frac{1}{n!} \exp\{-\beta[H(r_{i_1}, \dots, r_{i_n}; v_{i_1}, \dots, v_{i_n}) - \lambda n]\} \quad (9.7)$$

dove la somma è su tutte le permutazioni $\{i_1 \dots i_n\}$ di $\{1 \dots n\}$. Il generico termine nella (9.7) è infatti, in accordo con la (9.4), la densità di probabilità che la particella 1 sia nello stato (r_{i_1}, v_{i_1}) , ..., che la particella n sia nello stato (r_{i_n}, v_{i_n}) . Osservando che per la indistinguibilità delle particelle

$$H(r_{i_1}, \dots, r_{i_n}; v_{i_1}, \dots, v_{i_n}) = H(r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n) \quad (9.8)$$

la (9.7) diventa

$$\frac{1}{Z_{\beta,\lambda,\Lambda}} \exp\{-\beta[H(r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n) - \lambda n]\} \quad (9.9)$$

Quindi la densità di probabilità degli stati $(r_1, v_1) \dots (r_n, v_n)$ (indipendentemente da chi li occupa) è proporzionale all'esponenziale di $-\beta$ per l'energia della configurazione, in accordo con la nota regola di Gibbs.

Abbiamo lasciato per ultima l'osservazione più importante, cioè che la definizione (9.4)-(9.6) non è ben posta! La serie nella (9.5) potrebbe infatti divergere, la (9.6) darebbe allora probabilità 0 ad un qualunque insieme \mathcal{X}_n : è come dire che vi sono con certezza infinite particelle nella regione Λ . Il sistema descritto dall'interazione V quindi collassa e non è suscettibile di una descrizione statistica, (almeno nello schema che ho presentato). Di qui il problema fondamentale di caratterizzare quali siano i potenziali stabili, quelli cioè per cui non si ha collasso e quindi la misura $\mu_{\beta, \Lambda, \Lambda}$ è ben definita.

Definizione 9.1.1. *Il potenziale V è stabile se esiste un numero reale B tale che*

$$U(r_1, \dots, r_n) \equiv \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(|r_i - r_j|) \geq -Bn \quad (9.10)$$

per ogni intero positivo n ed ogni ennupla r_1, \dots, r_n .

Si osservi che se la (9.10) è verificata allora la serie (9.6) converge. Viceversa un potenziale negativo nell'origine non è stabile, cioè se $V(x)$, $x \geq 0$, è una funzione continua, a supporto compatto (ma questa condizione non sarà usata nell'argomento che segue) e negativa in 0, allora la (9.10) non è soddisfatta e la serie (9.6) diverge, come dimostreremo qui appresso.

Per l'invarianza per traslazione dell'interazione, non è riduttivo supporre che l'origine sia un punto interno a Λ . Quindi esistono δ e a positivi per cui

$$\{|r| \leq \delta\} \subset \Lambda; \quad V(|r|) \leq -a \quad \text{per ogni } |r| \leq \delta$$

Dall'ultima relazione segue che se le posizioni r_i , $i = 1, \dots, n$, delle particelle sono tutte in $\{|r| \leq \delta\}$ allora

$$U(r_1, \dots, r_n) \leq -a \frac{n(n-1)}{2} \quad (9.11)$$

Poiché l'integrando nella (9.6) è positivo, otteniamo un limite inferiore restringendo il dominio di integrazione come sopra. Quindi il generico termine nella serie (9.5) è limitato inferiormente da

$$\left[\frac{4}{3}\pi\delta^3\right]^n \frac{z^n}{n!} e^{\beta a n(n-1)/2}, \quad z = e^{\beta\lambda} (2\pi\beta/m)^{3/2}$$

e perciò la serie diverge.

Questo è un problema grave, la teoria che si vuole sviluppare dovrà escludere potenziali importanti quali quelli gravitazionali. Si può sempre argomentare che vi saranno comunque altre forze, oltre le gravitazionali, che potrebbero avere un effetto stabilizzante tale da rendere positivo il potenziale totale nell'origine. Problemi analoghi appaiono quando si studiano i potenziali coulombiani, in cui però entra in gioco anche il segno delle cariche. La teoria è stata ampiamente sviluppata per questi sistemi, soprattutto in un ambito

quantistico, qui particolarmente rilevante, e costituisce uno dei capitoli di maggior interesse della Meccanica Statistica.

La condizione (9.10) potrebbe a prima vista sembrare irrilevante, in quanto il potenziale è sempre definito a meno di una costante additiva, che, se scelta opportunamente, lo renderebbe alternativamente stabile o non stabile. Si osservi però che la costante è già implicitamente fissata dalla condizione di supporto compatto, (stessa osservazione quando si richiede che il potenziale si annulli all'infinito).

La possibilità di usare le misure di Gibbs per studiare realisticamente dei fluidi è assicurata dal fatto che i potenziali di Lennard-Jones, che descrivono le interazioni intermolecolari, sono stabili e quindi che, per tali potenziali, la definizione (9.4) è ben posta. Si ricordi che un potenziale di Lennard-Jones è del tipo

$$V(|r|) = A|r|^{-12} - B|r|^{-6}, \quad A, B > 0 \quad (9.12)$$

Quindi i potenziali di Lennard-Jones presentano una caratteristica divergenza nell'origine (con potenza più alta del numero di dimensioni dello spazio ambiente). Hanno poi un minimo negativo e crescono all'infinito dove si annullano. Dimosteremo la stabilità di una classe, \mathcal{C} , di potenziali più semplici di quelli di Lennard-Jones, ma che ne hanno le stesse caratteristiche enunciate sopra:

Definizione 9.1.2. $V(|r|)$ è in \mathcal{C} se esistono $\gamma > d$, ($d = 3$ nel seguito), $V_0 > 0$, $0 < a < b$, per cui le seguenti condizioni sono verificate. $V(|r|)$ è una funzione positiva, regolare e decrescente nell'intervallo $0 < |r| < a$, che diverge nell'origine come

$$V(|r|) \approx |r|^{-\gamma} \quad (9.13)$$

$V(|r|) = -V_0$ per $a \leq |r| \leq b$ ed infine $V(|r|) = 0$ per $|r| > b$.

Teorema 9.1.3. Ogni $V \in \mathcal{C}$ è stabile.

Dimostrazione.

La prova mostrerà che vi è una compensazione tra il contributo negativo all'energia che viene dalle coppie di particelle a distanza compresa tra a e b e la parte positiva dovuta a interazioni con distanza minore di a . Per esempio si potrebbero avere $n/2$ particelle in un "intornino" di un punto r e $n/2$ particelle in un intornino di r' , con r e r' a distanza compresa tra a e b . L'interazione di un gruppo con l'altro (se gli intornini sono abbastanza piccoli) sarà allora $-V_0(n/2)^2$ che quindi decresce pericolosamente come $-n^2$. Vi è tuttavia anche un contributo positivo all'interazione totale, dovuto alle particelle in ciascuno degli intornini che, interagendo tra loro, danno ciascuno un contributo proporzionale a n^2 e con coefficiente positivo. Poiché il potenziale diverge nell'origine il coefficiente del termine positivo risulterà, se l'intornino è piccolo, più grande di quello negativo, di qui la stabilità dei potenziali in \mathcal{C} .

Scegliamo $B \geq V_0/2$ e che verifichi la (9.20). Per $n = 0, 1$ si ha che $U \equiv 0$, il primo valore significativo è perciò $n = 2$:

$$U(r_1, r_2) = V(|r_1 - r_2|) \geq -V_0 \geq -2B \quad (9.14)$$

Procedendo per induzione, supponiamo che per $n - 1 \geq 2$

$$U(r_1, \dots, r_{n-1}) \geq -B(n-1) \quad (9.15)$$

per ogni scelta di r_1, \dots, r_{n-1} . Dobbiamo quindi dimostrare che

$$U(r_1, \dots, r_n) \geq -Bn \quad (9.16)$$

per ogni scelta di r_1, \dots, r_n . Supponiamo che

$$\min |r_i - r_j| = |r_1 - r_2| =: \delta \quad (9.17)$$

(basta rilabellare le particelle). Allora

$$U(r_1, \dots, r_n) = U(r_2, \dots, r_n) + \sum_{i=2}^n V(|r_1 - r_i|) \geq -B(n-1) + \sum_{i=2}^n V(|r_1 - r_i|) \quad (9.18)$$

D'altra parte

$$\sum_{i=2}^n V(|r_1 - r_i|) = V(\delta) + \sum_{i=3}^n V(|r_1 - r_i|) \geq V(\delta) - V_0 \frac{4\pi b^2(b-a)}{(4/3)\pi\delta^3} \quad (9.19)$$

Infatti il numeratore nell'ultimo termine maggiore il volume della regione a distanza tra a e b da r_1 , che è la regione in cui l'interazione con la particella 1 è negativa (e vale $-V_0$). $(4/3)\pi\delta^3$ è "il volume escluso": ricordando la condizione (9.17), nella sfera di raggio δ e centro la posizione di una particella, non vi sono altre particelle. Quindi la frazione nella (9.19) maggiore il numero di particelle che hanno interazione negativa con la particella 1. Il membro a destra nella (9.19) è positivo per $\delta \rightarrow 0$, poiché $V(\delta)$ diverge come $\delta^{-\gamma}$, $\gamma > 3$. Inoltre si annulla per $\delta \rightarrow \infty$, quindi ha un minimo finito. Ponendo

$$-B = \min_{\delta > 0} \left\{ V(\delta) - V_0 \frac{4\pi b^2(b-a)}{(4/3)\pi(\delta/2)^3} \right\} \quad (9.20)$$

dalla (9.19) discende allora la (9.16). \square

9.2. Gli ensemble statistici

Per i potenziali stabili le (9.4), (9.5) e (9.6) sono dunque ben poste. Possiamo allora completare l'interpretazione fisica del modello, definendo, in analogia con la (8.11),

$$P_{\beta, \lambda, \Lambda} = \frac{1}{\beta|\Lambda|} \log Z_{\beta, \lambda, \Lambda} \quad (9.21)$$

La pressione $P_{\beta,\Lambda,\Lambda}$ dipende dalla regione Λ , siamo dunque di fronte allo stesso tipo di patologie incontrate nel modello di Ising. Come in quel caso si risolvono studiando il sistema nel limite termodinamico in cui $\Lambda \rightarrow \mathbb{R}^d$. I risultati sono del tipo di quelli ottenuti nel Capitolo 8, l'analisi non è però una semplice estensione della precedente, ma considerevolmente più complessa. Rinvio quindi il lettore su questo punto alla letteratura specializzata.

Il principio variazionale che sta a monte delle definizioni della sezione precedente si riferisce a sistemi che scambiano energia e massa con un “reservoir” esterno, in cui temperatura e potenziale chimico sono fissati, si veda, nell'ambito del gas di Boltzmann, il Teorema 7.3. In molte situazioni il sistema scambia con l'esterno energia ma non massa. In tal caso è fissata la densità e quindi il numero di particelle n , (poiché la regione Λ è anche essa fissa). Si considerano allora misure con supporto su \mathcal{X}_n . Tenendo fissa la temperatura, l'equilibrio si ottiene minimizzando l'energia libera

$$F_{\beta,n,\Lambda}(\mu) = \mu(H) - \frac{1}{k\beta} S(\mu) \quad (9.22)$$

dove μ è una qualunque probabilità su \mathcal{X}_n che abbia una densità simmetrica² rispetto alla misura di Lebesgue che sia H è l'energia data dalla (9.1); $\mu(H)$ è l'integrale di H rispetto alla misura μ ; $S(\mu)$ è l'entropia di μ , cioè, indicando con x il punto in \mathcal{X}_n , con dx la misura di Lebesgue su \mathcal{X}_n e con $f(x)$ la densità della misura μ rispetto a $dx/n!$,

$$S(\mu) = -k \int_{\mathcal{X}_n} \frac{dx}{n!} f(x) \log f(x) \quad (9.23)$$

(L'analogo nel modello di Ising corrisponde a fissare la magnetizzazione invece del campo magnetico h). Ometto la dimostrazione che il minimo dell'energia libera è raggiunto sulla “misura canonica” su \mathcal{X}_n , che ha l'espressione

$$d\mu_{\beta,n,\Lambda}(x) = \frac{1}{Z_{\beta,n,\Lambda}} \frac{1}{n!} \exp\{-\beta H(x)\} dx, \quad x = (r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n) \quad (9.24)$$

dove $Z_{\beta,n,\Lambda}$ la funzione di partizione canonica:

$$Z_{\beta,n,\Lambda} = \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^3} dv_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} dv_n \int_{\Lambda} dr_1 \dots \int_{\Lambda} dr_n \exp\{-\beta H(r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n)\} \quad (9.25)$$

Corrispondentemente l'energia libera per unità di volume è

$$f_{\beta,n,\Lambda} := \frac{1}{|\Lambda|} F_{\beta,n,\Lambda}(\mu_{\beta,n,\Lambda}) = -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \log Z_{\beta,n,\Lambda} \quad (9.26)$$

Oltre al numero di particelle, a volte si fissa anche l'energia, impedendo cioè sia gli scambi di energia che di massa con l'esterno, il sistema è allora isolato. Lo stato di equilibrio è quello di massima entropia “sulla superficie di energia fissata” e con dato numero di

² $f(r_1, \dots, r_n)$ è simmetrica se, per ogni r_1, \dots, r_n , è uguale a $f(r_{i_1}, \dots, r_{i_n})$ per ogni permutazione (i_1, \dots, i_n) di $(1, \dots, n)$.

particelle. Consideriamo dapprima non un singolo livello di energia E , ma un intervallo, $[E, E + \Delta E]$, $\Delta E > 0$. Sia quindi n il numero di particelle in Λ e $[E, E + \Delta E]$ l'intervallo di energie "permesse", considereremo cioè solo configurazioni in \mathcal{X}_n che hanno energia in questo intervallo. Allora la misura $\mu_{E,\Delta E,n,\Lambda}$ che massimizza l'entropia con questi vincoli è

$$d\mu_{E,\Delta E,n,\Lambda}(x) = \frac{1}{Z_{E,\Delta E,n,\Lambda}} \frac{1}{n! \Delta E} dx \mathbf{1}(E \leq H(x) \leq E + \Delta E) \quad (9.27)$$

dove $x = (r_1, \dots, v_n)$, $\mathbf{1}(\cdot)$ è la funzione caratteristica dell'insieme specificato in parentesi; la funzione di partizione $Z_{E,\Delta E,n,\Lambda}$ è la costante di normalizzazione nella (9.27). Si è interessati al caso limite in cui $\Delta E \rightarrow 0$. Supponiamo che la superficie di energia $\{H(\cdot) = E\}$ sia regolare, compatta e che il gradiente $\nabla H(x) \neq 0$ in tutto $\{H(\cdot) = E\}$. Allora il limite della misura (9.27) quando $\Delta E \rightarrow 0$ definisce una misura sulla superficie $\{H(\cdot) = E\}$ che è "la misura microcanonica" su $\{H(\cdot) = E\}$ ed ha la seguente espressione:

$$d\mu_{E,n,\Lambda}(x_E) = \frac{1}{Z_{E,n,\Lambda}} \frac{1}{n!} \frac{d\sigma(x_E)}{|\nabla H(x_E)|} \quad (9.28)$$

dove $d\sigma(x_E)$ è l'usuale misura d'area (qui relativa alla superficie $\{H(\cdot) = E\}$) e $Z_{E,n,\Lambda}$ la costante di normalizzazione. Ometto la dimostrazione delle affermazioni precedenti e riporto nell'Appendice E per completezza alcuni dettagli di come si arriva alla (9.28).

L'entropia dello stato (9.27), rispetto alla misura $dx/n! \Delta E$ ristretta a $\{E \leq H \leq E + \Delta E\}$, è

$$S_{E,\Delta E,n,\Lambda} = -k \int_{\{E \leq H \leq E + \Delta E\}} \frac{dx}{n! \Delta E} \rho(x) \log \rho(x) \quad (9.29)$$

dove $x = (r_1, \dots, r_n; v_1, \dots, v_n)$ e la densità $\rho(x)$ è quella dello stato (9.27):

$$\rho(x) = \frac{1}{Z_{E,\Delta E,n,\Lambda}} \mathbf{1}(E \leq H(x) \leq E + \Delta E) \quad (9.30)$$

Perciò

$$S_{E,\Delta E,n,\Lambda} = k \log Z_{E,\Delta E,n,\Lambda} \quad (9.31)$$

L'entropia per unità di volume è allora

$$s_{E,\Delta E,n,\Lambda} = \frac{k}{|\Lambda|} \log Z_{E,\Delta E,n,\Lambda} |\Lambda| \quad (9.32)$$

Abbiamo quindi tre modi per definire la termodinamica del sistema, il primo usando la pressione e facendo il limite termodinamico a β e λ fissi. Alternativamente possiamo usare l'ensemble canonico e fare il limite dell'energia libera tenendo fisso β e facendo tendere $n \rightarrow \infty$ e $\Lambda \rightarrow \mathbb{R}^d$ in modo tale che $n/|\Lambda|$ converga ad un valore ρ prefissato. Infine possiamo usare l'ensemble microcanonico, e fare un limite in cui energia e numero di particelle divergono insieme a $|\Lambda|$, imponendo che i loro rapporti con $|\Lambda|$ abbiano limiti fissati, (rispettivamente l'energia media e la densità media).

L'equivalenza degli ensemble afferma che la termodinamica che si ottiene nei tre modi descritti sopra è la stessa, vale a dire se si ricava l'energia libera dalla pressione ottenuta nel limite del gran-canonical si ottiene l'energia libera ottenuta dal canonico e se si ricava da

quest'ultima l'entropia si ottiene la stessa che nel limite microcanonico. Faccio riferimento alla letteratura più specializzata per enunciati precisi e dimostrazioni.

L'IPOTESI ERGODICA

Saper leggere nelle soluzioni delle equazioni di Hamilton le leggi della Termodinamica, ecco l'obiettivo, o meglio il sogno di chi fa Meccanica Statistica. Ricordo il mio docente di Fisica Generale favoleggiare di un matematico infinitamente abile che sapesse veramente integrare le 10^{23} equazioni del moto, permettendoci così di spiegare tutte le leggi della Fisica Macroscopica. Nel frattempo si è più prosaicamente ripiegato sui computer che, ripagando la fiducia, hanno mostrato come anche con “solo” qualche migliaio di particelle si possano già vedere corretti compartimenti macroscopici. Ma non è evidentemente la stessa cosa che integrare le equazioni del moto, continuiamo dunque ad aspettare la nascita del super-matematico.

Un progetto, comunque ambizioso, ma apparentemente più abbordabile, è quello di cui ci occupiamo in questo capitolo. Si tratta di trovare l'insieme delle misure di probabilità che sono invarianti rispetto al flusso temporale indotto dalle equazioni di Hamilton. L'obiettivo, o forse la congettura, è che in sistemi realistici le misure invarianti (estremali, si veda più avanti) sono le misure microcanoniche di Gibbs, che verrebbero così caratterizzate in termini puramente meccanici senza ricorrere ai principi variazionali usati nei due capitoli precedenti.

10.1. Sistemi ergodici, frequenze di visite, decomposizione ergodica

Consideriamo dunque un sistema di n particelle in una regione Λ , n e Λ dovranno avere valori fisicamente realistici per descrivere un fluido macroscopico. L'interazione tra particelle è per esempio determinata dal potenziale di Lennard-Jones, o comunque da un potenziale stabile e regolare. Inoltre vi sarà un potenziale esterno che confina le particelle in Λ (talvolta lo si sostituisce con condizioni di riflessione elastica sul bordo di Λ). Supporremo che la soluzione delle equazioni del moto sia ben definita per tutti i tempi e definisca un flusso temporale regolare che indicheremo con $S_t x$, $t \in \mathbb{R}$, x il punto dello spazio delle fasi che rappresenta posizioni e quantità di moto di tutte le particelle.

Una misura (di probabilità) μ è invariante se per ogni insieme misurabile A si ha $\mu(A) = \mu(S_t A)$, $t \in \mathbb{R}$, $S_t A = \{S_t x, x \in A\}$. Vogliamo caratterizzare l'insieme \mathcal{M} delle misure invarianti. Osserviamo subito che se μ e ν sono in \mathcal{M} , allora anche ogni loro combinazione convessa, $\alpha\mu + (1-\alpha)\nu$, $\alpha \in [0, 1]$, è in \mathcal{M} . Quindi \mathcal{M} è un insieme convesso.

Una misura $\mu \in \mathcal{M}$ è estrema se non la si può scrivere come combinazione convessa di due misure in \mathcal{M} , più precisamente

$$\mu = \alpha\mu_1 + (1 - \alpha)\mu_2 \quad \text{implica} \quad \mu_1 = \mu_2 = \mu \quad (10.1)$$

Chiamando \mathcal{M}_e l'insieme delle misure invarianti estremali, si ha che ogni elemento μ di \mathcal{M} è limite di elementi ottenuti facendo combinazione convessa di elementi di \mathcal{M}_e . Questo è il contenuto del Teorema di Krein e Milman che si riferisce però ad insiemi convessi e compatti. Si applica allora il teorema all'insieme $\mathcal{M}^{(\leq E)}$ delle misure $\mu \in \mathcal{M}$ con supporto sull'insieme compatto $\Omega^{(\leq E)} = \{H(x) \leq E\}$, (si considera qui la “topologia debole delle misure” in $\mathcal{M}^{(\leq E)}$ e in questa topologia $\mathcal{M}^{(\leq E)}$ è compatto e si può così usare il Teorema di Krein e Milman). Per l'arbitrarietà di E si estende poi l'affermazione a tutto \mathcal{M} , tutto l'argomento è tecnico ed è omesso.

Siamo così arrivati alla conclusione che basterà caratterizzare \mathcal{M}_e , potendosi poi ottenere ogni elemento μ di \mathcal{M} come limite di combinazione convessa di elementi di \mathcal{M}_e .

Definizione 10.1.1. $\mu \in \mathcal{M}$ è *ergodica*, $\mu \in \mathcal{M}_{erg}$, se

$$A = S_t A \quad \text{implica} \quad \mu(A) = 0, 1 \quad (10.2)$$

(A un insieme misurabile).

Vedremo più avanti che $\mathcal{M}_e = \mathcal{M}_{erg}$, cioè misure estremali ed ergodiche sono la stessa cosa, ma, per il momento, teniamo distinte le due nozioni e dimostriamo che $\mathcal{M}_e \subseteq \mathcal{M}_{erg}$.

Lemma 10.1.2. *Ogni misura estrema è ergodica.*

Dimostrazione.

Sia $A = S_t A$ e supponiamo per assurdo $\mu(A) \in (0, 1)$. Indicando con A^c il complemento di A , definiamo le due probabilità ρ_A e ρ_{A^c} ponendo, per ogni insieme misurabile B

$$\rho_A(B) = \frac{\mu(A \cap B)}{\mu(A)}, \quad \rho_{A^c}(B) = \frac{\mu(A^c \cap B)}{\mu(A^c)}$$

quindi ρ_A è la probabilità condizionata ad A e ρ_{A^c} la probabilità condizionata ad A^c . Si ha

$$\mu(B) = \mu(A \cap B) + \mu(A^c \cap B) = \mu(A)\rho_A(B) + [1 - \mu(A)]\rho_{A^c}(B)$$

quindi μ è una combinazione convessa di ρ_A e ρ_{A^c} (con peso $\alpha = \mu(A)$). L'assurdo nascerà dal fatto che ρ_A e ρ_{A^c} sono in \mathcal{M} . Per dimostrarlo osserviamo che

$$\rho_A(S_t B) = \frac{\mu(A \cap S_t B)}{\mu(A)} = \frac{\mu(S_t A \cap S_t B)}{\mu(A)} = \frac{\mu(A \cap B)}{\mu(A)} = \rho_A(B)$$

in quanto $\mu(S_t A \cap S_t B) = \mu(S_t(A \cap B)) = \mu(A \cap B)$. Analogo argomento si applica a ρ_{A^c} , concludendo così la dimostrazione del lemma. \square

Un insieme invariante è dunque o trascurabile per una misura estrema o ne costituisce il supporto. Le superfici $\Sigma_E = \{H(\cdot) = E\}$ sono ovviamente invarianti; inoltre le misure microcanoniche μ_E , definite nella (9.28) (ometto alcuni degli indici per semplificare le notazioni) sono invarianti, l'affermazione è discussa nell'Appendice E. Quindi le misure estremali vanno cercate tra le misure invarianti con supporto in Σ_E , (per ogni valore di E).

Ipotesi Ergodica. *La misura microcanonica μ_E è ergodica (cioè se A è un insieme invariante in Σ_E , allora $\mu_E(A) = 0, 1$).*

Come già affermato (ma non ancora dimostrato) le misure ergodiche sono anche estremali, quindi l'ipotesi ergodica afferma che le misure microcanoniche sono estremali. Non esclude però che in Σ_E vi siano altre misure estremali invarianti, esse però dovranno necessariamente avere supporto su insiemi di misura nulla per μ_E e, “di ufficio”, le escludiamo dalla nostra analisi. L'ipotesi ergodica in un contesto di Meccanica Statistica, si riferisce a valori fisicamente significativi di Λ , n ed E . Anche in questa accezione indebolita essa rimane essenzialmente un'ipotesi che sembra ben lungi dall'essere dimostrata (in positivo o in negativo), con notevoli eccezioni, però. Le più significative sono, in positivo, i “biliardi di Sinai”, in negativo i sistemi “vicini” a quelli integrabili (Teorema KAM), questi argomenti saranno discussi brevemente nella Sezione 10.2.

Esiste un modo apparentemente costruttivo per trovare misure invarianti che si basa sulla nozione di frequenza di visita.

Definizione 10.1.3. *Un punto x ha frequenza di visita nell'insieme misurabile A , e sarà indicata con $f_A(x)$, se esiste il limite*

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \mathbf{1}_A(S_t x) =: f_A(x) \quad (10.3)$$

dove $\mathbf{1}_A(\cdot)$ è la funzione caratteristica dell'insieme A .

Alcune proprietà discendono banalmente dalla definizione e la loro dimostrazione è omessa:

Lemma 10.1.4. *Se x ha frequenza di visita in A e B e $A \cap B = \emptyset$, allora x ha frequenza di visita in $A \cup B$ e*

$$f_{A \cup B}(x) = f_A(x) + f_B(x) \quad (10.4)$$

Inoltre

$$f_A(S_t x) = f_{S_t A}(x) = f_A(x) \quad (10.5)$$

La (10.4) mostra che la frequenza di visita verifica la proprietà di additività delle misure. Vogliamo quindi fissare x e cercare di interpretare $f_A(x)$ come una misura, la (10.5) ci permetterà poi di concludere che la misura è invariante. Per definire una misura (nella teoria della misura di Lebesgue) occorre far variare A nella σ -algebra degli insiemi misurabili (nel nostro caso i Boreliani di Σ_E). La richiesta che la frequenza di visita in x esista per una classe così vasta di insiemi, quali i Boreliani, è troppo forte e rischiamo di non trovare alcun x che la verifichi. Questo è un punto tecnico su cui non vorrei soffermarmi, dirò comunque che un modo per aggirare il problema è di introdurre una classe molto più piccola di insiemi, che indicherò con \mathcal{A} . Si sceglie \mathcal{A} come “un'algebra” numerabile di insiemi misurabili; inoltre \mathcal{A} ha la proprietà che se una misura è definita su \mathcal{A} essa si estende univocamente ad una misura (astratta di Lebesgue) su tutti i Boreliani. Quindi se la frequenza $f_A(x)$ esiste per un dato x per tutti gli insiemi $A \in \mathcal{A}$, allora esiste un'unica misura ν_x sui Boreliani tale che

$$\nu_x(A) = f_A(x) \quad \text{per ogni } A \in \mathcal{A} \quad (10.6)$$

Si ha anche che

$$\nu_x \in \mathcal{M}, \quad \nu_x = \nu_{S_t x} \quad (10.7)$$

Rimane però ancora da dimostrare che esistano x con frequenza di visita su tutti gli A di \mathcal{A} , ma qui interviene in aiuto il Teorema di Birkhoff:

Teorema 10.1.5. *Se μ è invariante, per ogni insieme misurabile A esiste un insieme $X = X(A)$, tale che per ogni $x \in X$ la frequenza di visita in A è ben definita, inoltre*

$$\mu(X) = 1 \quad (10.8)$$

$$\mu(A) = \int_X \mu(dx) f_A(x) \quad (10.9)$$

Poiché un'intersezione numerabile di insiemi di misura 1 è non vuota ed ha misura 1, usando il Teorema di Birkhoff (con $\mu = \mu_E$ nelle nostre applicazioni alla meccanica statistica), ne concludiamo che esiste un insieme X ($X_E \subseteq \Sigma_E$ nel nostro caso) di misura 1, in cui sono ben definite le frequenze di visita su tutti gli insiemi di \mathcal{A} . Per quanto detto

precedentemente esistono su tutto X misure invarianti ν_x che verificano la (10.6). Si ha allora dalla (10.9),

$$\mu(A) = \int_X \mu(dx) \nu_x(A) \quad \text{per ogni } A \in \mathcal{A} \quad (10.10)$$

e poiché la misura è completamente e univocamente specificata dai suoi valori su \mathcal{A} , ne consegue (con un argomento che ometto) che

$$\mu(A) = \int_X \mu(dx) \nu_x(A) \quad \text{per ogni Boreliano } A \quad (10.11)$$

Lemma 10.1.6. *Se $\mu \in \mathcal{M}_e$ allora esiste x per cui $\mu = \nu_x$ ed inoltre l'insieme*

$$C(x) = \{y : \nu_y = \nu_x\} \quad (10.12)$$

ha misura 1,

$$\mu(C(x)) = 1 \quad (10.13)$$

Dimostrazione.

Dimostriamo che per ogni A , $\nu_y(A)$ è μ -quasi ovunque costante. Supponiamo per assurdo che ciò non sia vero, esisteranno allora A , e $\beta \in (0, 1)$ per cui definendo

$$Y = \{y : \nu_y(A) \leq \beta\} \quad (10.14)$$

si ha $\mu(Y) =: \alpha \in (0, 1)$. Definiamo allora le probabilità

$$\rho_1(B) = \frac{1}{\mu(Y)} \int_Y \mu(dy) \nu_y(B), \quad \rho_2(B) = \frac{1}{\mu(Y^c)} \int_{Y^c} \mu(dy) \nu_y(B) \quad (10.15)$$

ρ_1 e ρ_2 sono invarianti in quanto per ogni y , ν_y è invariante. Inoltre $\rho_1 \neq \rho_2$ in quanto $\rho_2(A) > \beta \geq \rho_1(A)$. Ricordando che $\mu(Y) = \alpha \in (0, 1)$ si ha

$$\alpha \rho_1(B) + (1 - \alpha) \rho_2(B) = \int \mu(dy) \nu_y(B) = \mu(B) \quad (10.16)$$

avendo usato la (10.11).

Siamo dunque arrivati ad un assurdo perché per ipotesi μ è estrema. Sappiamo dunque che per ogni A esiste un insieme Y_A tale che

$$\mu(Y_A) = 1, \quad \mu(A) = \nu_y(A) \quad \text{per ogni } y \in Y_A \quad (10.17)$$

Chiamando $X = \bigcap_{A \in \mathcal{A}} Y_A$, si ha

$$\mu(X) = 1, \quad \mu(A) = \nu_y(A) \quad \text{per ogni } y \in X \text{ e } A \in \mathcal{A} \quad (10.18)$$

Si ha quindi che per $x \in X$, μ e ν_x coincidono su \mathcal{A} , ma allora per la proprietà già citata di \mathcal{A} , coincidono su tutti i Boreliani. Abbiamo quindi dimostrato che esiste x per cui $\mu = \nu_x$, inoltre $C(x) \supseteq X$ e la (10.13) discende dalla (10.18). \square

Concludiamo questa discussione sulla struttura delle misure invarianti dimostrando che le misure ergodiche coincidono con le estremali. Premettiamo il lemma seguente:

Lemma 10.1.7. *μ è ergodica se e solo se tutte le funzioni invarianti (cioè tali che $f(x) = f(S_t x)$) sono μ -quasi ovunque costanti.*

Dimostrazione.

Se tutte le funzioni invarianti sono μ -quasi ovunque costanti ne segue che anche le funzioni caratteristiche di insiemi invarianti sono μ -quasi ovunque costanti, tali insiemi hanno allora misura 0 o 1, dunque $\mu \in \mathcal{M}_{\text{erg}}$. Viceversa, sia $\mu \in \mathcal{M}_{\text{erg}}$. Se esistesse una f invariante $f(x) = f(S_t x)$ e non μ -quasi ovunque costante, allora esisterebbe a per cui gli insiemi

$$A := \{f(x) \leq a\}, \quad B := \{f(x) > a\}$$

hanno entrambi misura μ non nulla e sono invarianti, che contrasta con l'ipotesi che μ sia ergodica. \square

Lemma 10.1.8. *Le misure ergodiche sono tutte e sole le misure estremali, $\mathcal{M}_{\text{erg}} = \mathcal{M}_e$.*

Dimostrazione.

Per il Lemma 10.1.2 basterà dimostrare che $\mathcal{M}_{\text{erg}} \subseteq \mathcal{M}_e$.

Dimostriamo che se $\mu \in \mathcal{M}_{\text{erg}}$ allora esiste x per cui $\mu = \nu_x$ ed inoltre l'insieme $C(x)$ definito nella (10.12) ha misura 1,

$$\mu(C(x)) = 1 \tag{10.19}$$

Infatti, essendo la frequenza di visita $f_A(x)$ invariante, $f_A(x) = f_A(S_t x)$, si veda la (10.5), $f_A(x)$ è μ -quasi ovunque invariante. Esiste allora un insieme Y , $\mu(Y) = 1$, tale che $\mu(A) = \nu_y(A)$ per ogni $y \in Y$ e $A \in \mathcal{A}$. Prendendo $x \in Y$ si ha allora $\mu = \nu_x$ su \mathcal{A} , e, per conseguenza su tutti i Boreliani, inoltre $C(x) \supseteq Y$ da cui la (10.19).

Supponiamo ora

$$\mu = \alpha\mu_1 + (1 - \alpha)\mu_2, \quad \alpha \in [0, 1], \quad \mu_i \in \mathcal{M} \tag{10.20}$$

Per la (10.19)

$$1 = \alpha\mu_1(C(x)) + (1 - \alpha)\mu_2(C(x)), \quad \text{implica } \mu_i(C(x)) = 1$$

Usando la (10.11), per ogni Boreliano A

$$\mu_1(A) = \int \mu_1(dy) \nu_y(A) = \int_{C(x)} \mu_1(dy) \nu_y(A) = \nu_x(A) = \mu(A)$$

Quindi $\mu_1 = \mu_2 = \mu$ e $\mu \in \mathcal{M}_e$. \square

10.2. I biliardi di Sinai e il Teorema KAM

L'ipotesi ergodica come detto è essenzialmente un'ipotesi ben lungi dall'essere provata o disprovata in modelli realistici di fluidi fisici. Per capirne l'essenza la discuteremo nell'ambito di sistemi più semplici dove l'analisi può essere spinta più in avanti.

Iniziamo dai sistemi non ergodici. Il prototipo di sistema integrabile (e quindi non ergodico) è il sistema degli oscillatori armonici. La superficie di energia costante è in questi casi foliata da tori invarianti, come si ottiene diagonalizzando l'hamiltoniana in modi normali. Si è a lungo creduto che questo fosse un caso per così dire eccezionale e che il fenomeno sparisse non appena si fossero aggiunte interazioni non lineari in grado di accoppiare i modi normali. Con una qualche sorpresa Fermi, Pasta e Ulam, [16], hanno trovato in simulazioni numeriche con il computer (per la prima volta, credo, utilizzato a questi fini) che “piccole perturbazioni” non bastano per distruggere i tori. Esiste infatti una soglia di caoticità al di sotto della quale persistono orbite periodiche mentre al di sopra il fenomeno scompare e le orbite invadono densamente le superficie di energia costante.

Questo comportamento è in realtà “generico”, come dimostrato nella teoria KAM, sviluppata a partire dai lavori di Kolmogorov, Arnold e Moser. Nei casi di interesse in Meccanica Statistica il fenomeno non è forse del tutto rilevante perché la crescita del numero dei gradi di libertà, quando si considera il limite termodinamico, dovrebbe però diminuire fino ad annullare, nel limite, la soglia di caoticità. La questione è comunque di grande interesse in molte altre applicazioni, come per esempio in astronomia, nello studio delle orbite dei pianeti, dei satelliti,...

Cosa rende un sistema ergodico? consideriamo il caso semplicissimo di un unico punto materiale che si muove nel piano all'interno del quadrato Q di lato 1 e con riflessioni elastiche sulle pareti. La superficie di energia costante è allora rappresentata da $Q \times C$, C la circonferenza unitaria i cui punti θ sono le possibili direzioni della velocità, (rispetto all'asse x). Ad ogni urto sulle pareti la velocità cambia perché si inverte la componente lungo l'asse x oppure quella lungo l'asse y , a seconda della parete su cui avviene l'urto. Quindi $\theta \rightarrow \pi - \theta$ oppure $\theta \rightarrow -\theta$. Il sistema non è ergodico poiché la funzione

$$f(q, \theta) := \cos 2\theta, \quad (q, \theta) \in Q \times C$$

è una costante del moto.

L'evoluzione cambia radicalmente se la si modifica introducendo ostacoli “dispersivi”, per esempio un ostacolo costituito da un cerchio con centro il centro del quadrato e diametro minore del lato (del quadrato). In un suo celebre teorema, [52], Sinai ha dimostrato l'ergodicità di questo sistema. L'analisi porta in realtà a conclusioni molto più forti, per certi versi persino sorprendenti, che discuterò brevemente a conclusione del Capitolo.

Per molte condizioni iniziali, (quasi tutte, nel senso della misura) l'ostacolo nel centro ha l'effetto di “disordinare il moto” e renderne “complesse” le traiettorie. Supponiamo di dividere $Q \times C$ in due parti distinte, ottenendo così una partizione della superficie di energia costante in due atomi, per esempio in accordo al segno della componente x della velocità, oppure dividendo in due Q ignorando le velocità, o in qualunque altro modo. Si osservi poi il moto del punto a multipli interi di τ , $\tau > 0$ una fissata unità temporale.

Il moto definisce allora una successione numerica di 0 e di 1, l' n -esimo elemento della successione è determinato dall'atomo in cui si trova il punto al tempo $n\tau$: è 0 se il punto al tempo $n\tau$ è nell'atomo 0 e 1 se accade il contrario.¹ La sequenza così ottenuta dipende dalla traiettoria del punto ovvero dalla posizione e velocità iniziali. Molte domande sulla struttura dell'evoluzione possono essere formulate in modo naturale come proprietà delle sequenze. Per esempio la tendenza del moto a privilegiare parti dello spazio delle fasi può essere espressa quantitativamente mediante una opportuna scelta della partizione e con la semplice domanda se vi siano più 0 o più 1 nelle sequenze. O meglio, poiché questi saranno entrambi infiniti, si dovrà parlare di frequenze relative dei valori 1 e 0 nella successione, cioè, per esempio, del limite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{f_N}{N} \equiv f$$

con f_N il numero di 1 tra i primi N elementi della successione. Poiché il sistema è ergodico, come dimostrato da Sinai, in quasi tutte le sequenze le frequenze relative di 0 e di 1 sono ben definite e hanno lo stesso valore, $1/2$, (se i due atomi della partizione hanno la stessa misura microcanonica).

Si consideri ora la sequenza di 0 e 1 generata dai valori pari o dispari che appaiono ad un dato tavolo di roulette (ignorandone lo 0). Si consideri poi idealmente l'insieme di tutte le possibili ripetizioni dell'esperimento, lo spazio delle sequenze aleatorie così ottenute è un esempio di processo stocastico. Il caso ideale di *roulette non truccata* definisce il processo di Bernoulli. Anche in questo caso si pone in modo naturale la domanda se in ogni sequenza vi siano più 0 che 1, [di importanza fondamentale per chi gioca alla roulette!]. Qui la risposta è più facile ed è data dalla legge dei grandi numeri, che afferma che la frazione di 0, o 1, è uguale alla loro probabilità, cioè $1/2$. Da questo punto di vista non vi è differenza dal caso precedente. Nasce quindi in modo naturale la domanda: se vi viene presentata una sequenza di 0 e 1 potete capire se essa è stata generata dal biliardo di Sinai o dalla roulette di qualche casinò? In altre parole la struttura delle sequenze è diversa nei due casi? Naturalmente per rispondere bisogna capire cosa vogliamo intendere per struttura di una sequenza, comunque in un senso "molto forte"² i due sistemi non sono distinguibili, sebbene la loro origine sia completamente diversa. Otteniamo così il risultato paradossale che le orbite deterministiche di un sistema semplice come il biliardo di Sinai hanno una struttura estremamente complessa e sono in certa misura indistinguibili da quelle prodotte da processi completamente aleatori.

È facile immaginare che interazioni più complesse come quelle presenti in sistemi con molte componenti e di interesse in Meccanica Statistica, dovrebbero aumentare l'aleatorietà del comportamento e favorirne le proprietà ergodiche. Manca tuttavia una prova di tali affermazioni che rimangono problemi aperti e di fondamentale interesse per una derivazione della Meccanica Statistica nell'ambito della Meccanica Classica.

¹Questa prescrizione va sotto il nome di dinamica simbolica, poiché un punto è codificato da una successione di simboli, 0 ed 1 e la sua evoluzione equivale a leggere sequenzialmente i simboli della successione

²che però richiede nozioni più sofisticate che mi impediscono di approfondire l'argomento in questa sede

10.3. La questione ergodica e le osservabili macroscopiche

Nel centenario della morte di Boltzmann, qualche anno fa, l'Accademia dei Lincei ha organizzato un convegno sul testamento scientifico lasciatoci da Boltzmann. In quella occasione si è assistito ad un acceso dibattito sul ruolo e la rilevanza della questione ergodica in Meccanica Statistica, con un partito schierato a favore ed un altro contro. I favorevoli cercano di spiegare l'irreversibilità dei fenomeni macroscopici in termini di "buone proprietà ergodiche" dei sistemi dinamici. L'approccio cerca di caratterizzare queste proprietà e di classificare i sistemi in base a quante di queste essi verifichino. Oltre l'ergodicità si parla in questo ambito di forte instabilità delle orbite e caoticità di queste, proprietà possedute da sistemi iperbolici di Anosov e loro generalizzazioni, tra cui i biliardi dispersivi di Sinai citati nella sezione precedente. L'insorgere di fenomeni di turbolenza può essere incluso in questo schema in termini di "attrattori strani e sistemi che verificano l'assioma A". Queste idee sono state inoltre usate recentemente per studiare sistemi stazionari, ma fuori dall'equilibrio, come per esempio sistemi di particelle elettricamente cariche con correnti stazionarie dovute a forti campi elettrici, sistemi che non sono descrivibili in termini di misure di Gibbs.

Queste linee di ricerca si sono sviluppate nell'ambito dello studio dei Sistemi Dinamici dove hanno avuto notevole successo, ma, come d'altronde l'ipotesi ergodica, non è affatto chiaro che modelli realistici di fluidi verifichino queste "buone proprietà ergodiche". Ovviamente, se si crede che esse siano essenziali dovranno ben essere verificate, in quanto i fluidi hanno comportamenti irreversibili, ma una dimostrazione matematica è ben più ardua che stabilire l'ergodicità pura e semplice.

Il partito contrario parte dall'osservazione che le proprietà enunciate sopra possono essere verificate anche in sistemi con pochi gradi di libertà, si hanno esempi di questi nella classe dei sistemi iperbolici di Anosov. Ovviamente tali sistemi non hanno per definizione nulla di macroscopico, dovrà dunque intervenire ad un certo punto qualche altra proprietà più specifica della natura macroscopica. In un seminario sull'origine dell'irreversibilità, alcuni anni fa, a Roma³, Lebowitz centrava la sua analisi sulla nozione di "osservabili macroscopiche". Il suo argomento mirava a sostenere che le osservabili macroscopiche sono essenzialmente costanti sulle superficie Σ_E di energia costante (per valori realistici dei parametri). Non ha quindi importanza se la misura microcanonica si decompone (non essendo estrema) o se le orbite su Σ_E sono instabili o ordinate, in qualunque caso il valore delle osservabili macroscopiche è lo stesso. Il punto di partenza di Lebowitz è che un'osservabile macroscopica può essere descritta in termini di medie spaziali di un'osservabile locale. In questa accezione l'ergodicità discussa nella Sezione 10.1 si traduce in ergodicità rispetto al gruppo delle traslazioni. Dopo un opportuno limite termodinamico la nozione assume un significato matematicamente preciso e la teoria si sviluppa con una dimostrazione di un teorema generale di struttura che afferma che le misure di Gibbs estreme sono spazialmente ergodiche e quindi per tali misure le osservabili macroscopiche sono quasi ovunque costanti.

Ho citato così fugacemente questi argomenti non tanto per darne una vera presentazione, ma soprattutto per mostrare che la costruzione di una teoria della meccanica

statistica è ancora un problema aperto che appassiona molti scienziati.

Parte 2

Complementi

APPENDICE A

Teoria dello Scattering

Le prime due sezioni di questa appendice sono dedicate al problema dei due corpi, la terza allo scattering da potenziale e, in particolare, al calcolo dell'angolo di scattering. La Sezione A.4 è un complemento di teoria della misura in cui si studiano le trasformazioni delle misure in spazi Euclidei di dimensione finita; si discutono casi di interesse fisico come la legge di conservazione della massa nei fluidi e il teorema di Liouville sull'invarianza della misura in sistemi conservativi. Le applicazioni allo scattering sono trattate nella Sezione A.5 dove si introduce la nozione di sezione d'urto (differenziale e totale). Nella Sezione A.6 si svolgono in maggior dettaglio le considerazioni di Teoria Cinetica discusse nel Capitolo 5.

A.1. Il problema dei due corpi

Il problema dei due corpi riguarda il moto di due punti materiali di masse m_1 e m_2 che si muovono in \mathbb{R}^3 . Siano r_1 e r_2 le loro posizioni riferite ad un sistema inerziale, v_1 e v_2 le velocità, $F_1(r_1, r_2)$ la forza che il punto 2 esercita sul punto 1 e $F_2(r_1, r_2)$ la forza sul punto 2 esercitata dal punto 1. Le equazioni del moto sono allora

$$\frac{d^2}{dt^2}m_1r_1 = F_1(r_1, r_2), \quad \frac{d^2}{dt^2}m_2r_2 = F_2(r_1, r_2) \quad (\text{A.1})$$

Se è verificato il principio di azione-reazione,

$$F_1(r_1, r_2) = -F_2(r_1, r_2) \quad (\text{A.2})$$

sommando le (A.1) si ha

$$m_1v_1(t) + m_2v_2(t) = m_1v_1(0) + m_2v_2(0) \quad (\text{A.3})$$

che esprime la conservazione della quantità di moto totale. Poiché il baricentro r_G e la velocità v_G di due masse m_1 e m_2 nei punti r_1 e r_2 con velocità v_1 e v_2 sono

$$r_G = \frac{m_1r_1 + m_2r_2}{m_1 + m_2}, \quad v_G = \frac{m_1v_1 + m_2v_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{A.4})$$

la (A.3) quindi equivale a dire che la velocità v_G del baricentro è costante.

Supponiamo ora che il sistema di forze sia invariante per traslazione, cioè che

$$F_1(r_1, r_2) = F_1(r_1 - r_2, 0) =: F(r_1 - r_2) \quad (\text{A.5})$$

Dividendo la prima delle (A.1) per m_1 e la seconda per m_2 , sottraendo poi l'una all'altra, chiamando

$$r(t) := r_1(t) - r_2(t) \quad (\text{A.6})$$

otteniamo

$$\frac{d^2}{dt^2} m r(t) = F(r(t)), \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{A.7})$$

che è l'equazione del moto di un unico punto materiale di massa m (la “massa ridotta”) che si muove nel campo di forze F .

Il problema dei due corpi si riduce così al problema ad un corpo solo, equazione (A.7), in quanto $r_1(t)$ e $r_2(t)$ possono essere espressi in termini di $r(t)$ e $r_G(t)$. Infatti la trasformazione da r_1, r_2 a r, r_G , definita dalle relazioni

$$m_1 r_1 + m_2 r_2 = M r_G; \quad r_1 - r_2 = r; \quad M = m_1 + m_2 \quad (\text{A.8})$$

può essere invertita trovando

$$r_1 = r_G + \frac{m_2}{M} r; \quad r_2 = r_G - \frac{m_1}{M} r \quad (\text{A.9})$$

A.2. Forze centrali

Specifichiamo ulteriormente la forza F supponendola centrale, cioè

$$F(r) = f(|r|) \frac{r}{|r|} \quad (\text{A.10})$$

con f una funzione reale di variabile reale. In gran parte della trattazione supporremo, per semplicità tecnica, che $f(x)$ sia C^∞ , cioè infinite volte differenziabile in $[0, \infty)$ e con supporto compatto, nulla cioè al di fuori di un intervallo limitato. Sono ipotesi di comodo e spesso non necessarie, commenteremo esplicitamente i casi in cui gli argomenti vadano seriamente modificati per includere nella teoria casi fisicamente interessanti quali i potenziali gravitazionali e le forze di Lennard-Jones (che descrivono interazioni inter-molecolari).

Poiché la forza $F(r)$ è diretta radialmente, cioè come $r/|r|$, essa è conservativa: infatti, dati comunque $a > 0$ e $V(a)$, si definisca

$$V(|r|) := V(a) + \int_{|r|}^a dx f(x) \quad (\text{A.11})$$

$V(|r|)$ è il potenziale di F , infatti è facile calcolare il gradiente del membro a destra della (A.11) e trovare che

$$F(r) = -\nabla V(|r|) \quad (\text{A.12})$$

Poiché la forza F è conservativa, l'energia si conserva. Con riferimento alle (A.1), moltiplicando (scalarmente) la prima per v_1 la seconda per v_2 e poi sommandole, si ottiene

$$E_{\text{tot}}(t) = \frac{1}{2}m_1v_1(t)^2 + \frac{1}{2}m_2v_2(t)^2 + V(|r(t)|) = E_{\text{tot}}(0) \equiv E_{\text{tot}} \quad (\text{A.13})$$

Analogamente, moltiplicando la (A.7) per $v(t)$, si ha

$$E(t) = \frac{1}{2}mv(t)^2 + V(|r(t)|) = E(0) \equiv E \quad (\text{A.14})$$

Differenziando la (A.9) rispetto al tempo e sostituendo nella (A.13) si ottiene

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2}Mv_G^2 + E \quad (\text{A.15})$$

La trasformazione (A.8)- (A.9) diagonalizza il sistema “separandone le variabili” e l'energia totale è somma di energie relative a variabili “separate”.

Tornando alle (A.7) e (A.10), otteniamo

$$r \wedge \frac{d^2}{dt^2}mr = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}[r \wedge mv] = 0 \quad (\text{A.16})$$

da cui la conservazione del momento angolare:

$$r(t) \wedge mv(t) = r(0) \wedge mv(0) =: K \quad (\text{A.17})$$

Dalla (A.17) si deduce che per ogni t

$$K \perp r(t) \quad (\text{A.18})$$

Quindi il moto $r(t)$ si svolge nel piano perpendicolare a K (specificato dalla condizione che contenga $r(0)$), ho supposto K non nullo. Se invece $K = 0$, allora $r(t)$ e $v(t)$ sono paralleli ed il moto è unidimensionale.

Nel caso $K \neq 0$, introduciamo coordinate polari R e θ nel piano in cui avviene il moto:

$$r(t) = R(t)n(\theta(t)), \quad n = \frac{r}{|r|} \quad (\text{A.19})$$

Perciò

$$v(t) = \dot{R}(t)n(\theta(t)) + R(t)\dot{\theta}(t)\frac{dn}{d\theta}(\theta(t)) \quad (\text{A.20})$$

$dn/d\theta$ è il versore ottenuto ruotando n di $\pi/2$ in senso antiorario. Infatti, in coordinate cartesiane,

$$n(\theta) = (\cos \theta, \sin \theta)$$

quindi

$$\frac{dn(\theta)}{d\theta} = (-\sin \theta, \cos \theta)$$

Usando le equazioni (A.17) e (A.20) otteniamo

$$mR(t)^2\dot{\theta}(t) = mR(0)^2\dot{\theta}(0) =: k \quad (\text{A.21})$$

Esprimendo v^2 mediante la (A.20) abbiamo

$$v^2 = \dot{R}^2 + (R\dot{\theta})^2 \quad (\text{A.22})$$

(poiché n e $dn/d\theta$ sono versori mutuamente ortogonali). Ricordando la (A.14) ed usando la (A.21), abbiamo allora

$$\frac{1}{2}m\dot{R}(t)^2 + V_{\text{eff}}(R(t)) = E \quad (\text{A.23})$$

$$V_{\text{eff}}(R) = V(R) + \frac{1}{2}mR^2 \left[\frac{k}{mR^2} \right]^2 = V(R) + \frac{k^2}{2mR^2} \quad (\text{A.24})$$

Le relazioni (A.21) e (A.24) esprimono \dot{R} e $\dot{\theta}$ in termini di R e θ , il moto è quindi risolto, a meno di quadrature.

A.3. Scattering da potenziale

Lo spazio delle fasi per un punto materiale che si muove in \mathbb{R}^3 è $\Gamma = \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$, i cui elementi ξ sono le coppie (r, v) , posizione e velocità del punto. Sia $S_t\xi$, $\xi \in \Gamma$, $t \in \mathbb{R}$, il flusso temporale soluzione della (A.7), cioè la traiettoria $(r(t), v(t)) =: S_t\xi$ è soluzione della (A.7) con dato iniziale $(r, v) = \xi \in \Gamma$.

Lo spazio delle fasi può essere diviso in tre insiemi disgiunti: lo spazio dei moti limitati nel passato e nel futuro:

$$\Gamma_{\text{bound}} = \left\{ (r, v) : \sup_{t \in \mathbb{R}} |r(t)| < \infty \right\} \quad (\text{A.25})$$

lo spazio dei moti illimitati sia nel passato che nel futuro:

$$\Gamma_{\text{scatt}} = \left\{ (r, v) : \lim_{t \rightarrow \pm\infty} |r(t)| = \infty \right\} \quad (\text{A.26})$$

e, infine, lo spazio dei moti rimanenti, Γ_{compl} , cioè limitati nel futuro, ma illimitati nel passato e viceversa.

Le orbite in Γ_{bound} sono confinate in regioni limitate di Γ e rappresentano gli stati “legati” o “bound states” del sistema. Quelle in Γ_{scatt} invece si allontanano indefinitamente e sono quindi asintoticamente libere, al di fuori cioè della portata delle forze, sia nel passato che nel futuro. (L’ipotesi che la forza abbia range finito permette di dare un senso letterale a questa affermazione che però mantiene una sua validità anche quando le forze hanno range infinito, ma decadono abbastanza velocemente). Le orbite in Γ_{scatt} sono dette di scattering e sono quelle che studieremo nel seguito, ma, come vedremo, questo studio coinvolgerà anche l’analisi delle orbite in Γ_{compl} , che avranno infatti un ruolo importante.

La situazione fisica che si vuole descrivere è quella che si riscontra in un esperimento di scattering in cui si “spara” contro un ostacolo (rappresentato da un campo di forze centrali, “scattering da potenziale”) un fascio di particelle (o, equivalentemente da un punto di vista matematico se le forze, come supporremo, sono centrali, nel far collidere due fasci di particelle dirigendoli l’uno contro l’altro). Supporremo almeno inizialmente che il fascio di particelle incidenti sia monocromatico, cioè che tutte le particelle abbiano la stessa velocità

v' (diretta come l'asse delle x negative). Se fotografiamo la situazione al tempo 0, quando ancora le particelle non hanno raggiunto il bersaglio, vedremo un pacchetto di particelle in una regione C di \mathbb{R}^3 che supporremo abbia la forma:

$$C = \{(x, y, z) : x \in [x_0, x_1]; b^2 \equiv y^2 + z^2 \leq R_0^2; x_0 \geq R_0\} \quad (\text{A.27})$$

dove R_0 indica il range (portata) delle forze.

La fisica del problema suggerisce le seguenti ipotesi: (i) le particelle del fascio incidente non interagiscono tra loro; (ii) hanno tutte la stessa velocità v' diretta come l'asse delle x negative; (iii) la distribuzione delle masse delle particelle è ben approssimata da una funzione non negativa, regolare $\rho(x, y, z)$ su C . $\rho(x, y, z)$ è la densità di massa nel fascio incidente.

L'esperimento consiste nel registrare i seguenti dati: (a) la massa di particelle che escono dall'urto nel generico intervallo di tempo $\delta\tau$; (b) la distribuzione delle velocità v (ovvero delle loro direzioni, in quanto, per la conservazione dell'energia, il modulo è fissato, $|v'| = |v|$).

Per una formulazione matematica del problema conviene descrivere la regione C in (A.27) in coordinate cilindriche, (b, ϕ', x) , b , il parametro di collisione, è la distanza dall'asse delle x e ϕ' è l'angolo contato a partire dal piano xy . Con un abuso di notazioni indicherò con lo stesso simbolo $\rho(b, \phi', x)$ la densità di massa nelle nuove variabili, quindi la massa nel fascio incidente che si trova nelle regione di C specificata dai parametri $(b, b + db)$, $(\phi', \phi' + d\phi')$ e $(x, x + dx)$ è $\rho(b, \phi', x)bdbd\phi'dx$, ricordando che l'elemento di volume in coordinate cilindriche è $bdbd\phi'dx$. Per descrivere la direzione delle velocità uscenti useremo gli angoli (θ, ϕ) delle coordinate sferiche in cui l'asse polare è l'asse delle x negative, che, si ricordi, è la direzione della velocità entrante, v' , comune a tutte le particelle del fascio incidente. $\theta \in [0, \pi]$ è allora l'angolo tra v e v' ed è chiamato l'angolo di scattering. $\phi \in [0, 2\pi]$ è l'angolo che il piano che contiene le velocità $\{v, v'\}$ forma con il piano $\{v', e_2\}$, e_2 il versore lungo l'asse y . Ricordando che i parametri che si misurano sono (θ, ϕ, τ) , scopo dell'esperimento è di determinare la massa del fascio uscente nella regione dello spazio (θ, ϕ, τ) specificata dai valori $(\theta, \theta + d\theta)$, $(\phi, \phi + d\phi)$ e $(\tau, \tau + d\tau)$. Tale massa avrà la forma $\lambda(\theta, \phi, \tau) \sin\theta d\theta d\phi d\tau$. $\sin\theta d\theta d\phi$ è l'elemento d'area sulla superficie sferica descritta mediante le coordinate (θ, ϕ) e $\lambda(\theta, \phi, \tau)$ è la densità con cui le velocità delle particelle uscenti si distribuiscono per unità di tempo $d\tau$ e di area $\sin\theta d\theta d\phi$ sulla superficie sferica.

Scopo del nostro studio è di determinare $\lambda(\theta, \phi, \tau)$ in funzione di $\rho(b, \phi', x)$ e delle forze presenti. Come vedremo sarà possibile dare un significato matematico all'espressione

$$\lambda(\theta, \phi, \tau) = \rho(b, \phi', x) \frac{bdbd\phi'dx}{\sin\theta d\theta d\phi}$$

che si evince imponendo che la massa si conservi ed uguagliando tra loro (con argomento evidentemente euristico) le quantità $\rho(b, \phi', x)bdbd\phi'dx$ e $\lambda(\theta, \phi, \tau) \sin\theta d\theta d\phi$.

Se è trascurabile, come supporremo, l'interazione tra particelle, ogni particella si muoverà indipendentemente dalle altre ed è quindi chiaro che le informazioni che cerchiamo devono essere deducibili dallo studio di una singola particella con dato iniziale un punto generico di C . In questa sezione risolveremo questo problema, esprimendo (θ, ϕ, τ) in funzione

delle forze agenti e del dato iniziale, specificato dai parametri (b, ϕ', x) : indicheremo tale relazione scrivendo $(\theta, \phi, \tau) = T(b, \phi', x)$. Questa sezione è dunque dedicata allo studio della trasformazione T . Nella successiva vedremo come si trasformano le densità quando si hanno trasformazioni di spazi Euclidei, di cui T è un caso particolare. Nella successiva passeremo dalla teoria generale al caso che ci interessa e arriveremo alla definizione di sezione d'urto, fondamentale in Teoria dello Scattering.

Supporremo le forze centrali, con potenziale $V(R)$ “regolare” e di portata $R_0 > 0$. Per simmetria basta studiare moti nel piano x, y e, tornando in coordinate cartesiane, supporremo

$$r(0) = (x_0, b, 0), \quad x_0 > R_0, ; \quad 0 \leq b \leq R_0 \quad (\text{A.28})$$

$$v(0) = v' = (-|v'|, 0, 0), \quad k = mb|v'| > 0 \quad (\text{A.29})$$

Poiché inizialmente $\dot{R}(0) < 0$, per la continuità del moto otteniamo dalla (A.23)

$$\dot{R}(t) = -\sqrt{2m^{-1}[E(0) - V_{\text{eff}}(R(t))]} \quad (\text{A.30})$$

per $R(t) \geq R_{\min}$, dove R_{\min} è il massimo valore di R per cui la radice si annulla. Ricordando che $k > 0$, $V_{\text{eff}}(R) \rightarrow \infty$ quando $R \rightarrow 0$, quindi $R_{\min} > 0$. Si noti che l'affermazione rimane valida purché

$$\lim_{R \rightarrow 0} R^2 V(R) = 0 \quad (\text{A.31})$$

(quindi anche per i potenziali gravitazionali, cui tuttavia le considerazioni precedenti non si applicano).

Supponendo che

$$\frac{dV_{\text{eff}}}{dR}(R_{\min}) < 0 \quad (\text{A.32})$$

il tempo T_{\min} in cui la particella arriva in R_{\min} è

$$T_{\min} = \int_{R_{\min}}^{R(0)} \frac{dR}{\sqrt{2m^{-1}[E(0) - V_{\text{eff}}(R)]}} < \infty \quad (\text{A.33})$$

Per calcolare $\theta(t)$ ricordiamo dalla (A.21)

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{k}{mR^2(t)} > 0 \quad (\text{A.34})$$

Conviene considerare nella (A.34) angoli con valori in \mathbb{R} e non solo tra 0 e 2π , in tal modo la relazione (A.34) può essere integrata in intervalli arbitrari senza doversi preoccupare se la variazione dell'angolo supera 2π . Il nuovo angolo, con valori in \mathbb{R} sarà indicato con θ^* e il vecchio, θ , si ottiene da θ^* modulo 2π .

Poiché $R(t)$ è una funzione decrescente di t per $t \leq T_{\min}$, possiamo invertire $t = t(R)$ ed esprimere θ^* in funzione o di t o di R . Per distinguerle scriveremo $\theta^*(t)$ e $\theta_*(R)$. Si ha allora, usando la (A.34),

$$\frac{k}{mR^2} = \frac{d\theta^*}{dR} \frac{dR}{dt} = -\sqrt{2m^{-1}[E(0) - V_{\text{eff}}(R)]} \frac{d\theta^*}{dR}$$

che, integrata, ci dà

$$\theta_*(R_{\min}) = \theta_*(R(0)) - \int_{R(0)}^{R_{\min}} dR \frac{k}{R^2 \sqrt{2m[E(0) - V_{\text{eff}}(R)]}} \quad (\text{A.35})$$

Con un argomento di simmetria si trova poi la traiettoria per tutti i tempi. Si ha infatti, per $s \leq T_{\min}$,

$$R(T_{\min} + s) = R(T_{\min} - s)$$

quindi, per la (A.34),

$$\frac{d\theta^*}{dt}(T_{\min} + s) = \frac{d\theta^*}{dt}(T_{\min} - s)$$

e, per integrazione,

$$\theta^*(T_{\min} + s) - \theta^*(T_{\min}) = \theta^*(T_{\min}) - \theta^*(T_{\min} - s) \quad (\text{A.36})$$

valida per $0 \leq s \leq T_{\min}$. La (A.36) rimane valida anche per $s - T_{\min} = s^* > 0$, pur di interpretare $R(t)$ e $\theta^*(t)$ per $-s^* \leq t \leq 0$ come le coordinate polari del punto $r(0) + v't$. Infatti il dato iniziale $r'(0) = r(0) - v's^*$, $v'(0) = v'$, produce un moto che all'istante s^* è $r'(s^*) = r(0)$ e $v'(s^*) = v'$ e quindi coincide ai tempi successivi col moto considerato precedentemente.

Ricordando che $R(0) > R_0$, si ha $R(T_{\min} - s) = R(T_{\min} + s) > R_0$ per $s \geq T_{\min}$. Quindi

$$\left(R(T_{\min} + s), \theta^*(T_{\min} + s) \right), \quad \left(R(T_{\min} - s), \theta^*(T_{\min} - s) \right), \quad s \geq T_{\min}$$

sono due semirette che descrivono il moto libero dopo e prima dell'urto (rispettivamente in avanti e indietro nel tempo). L'angolo polare di un punto che si allontana su una retta converge all'angolo polare del vettore parallelo a quella retta, quindi $\theta^*(T_{\min} - s) \rightarrow 0$ per $s \rightarrow \infty$, essendo la retta parallela all'asse delle x . Analogamente $\theta^*(T_{\min} + s) \rightarrow \theta_{\text{out}}^*$ per $s \rightarrow \infty$, dove θ_{out}^* è, modulo 2π , l'angolo polare della velocità uscente dallo scattering, che indichiamo con v . Dalla (A.36) si ha allora

$$\theta_{\text{out}}^* = 2\theta_*(R_{\min}), \quad \theta_*(R_{\min}) = 2 \int_{R_{\min}}^{\infty} dR \frac{k}{R^2 \sqrt{2m[E(0) - V_{\text{eff}}(R)]}} \quad (\text{A.37})$$

Il tempo di uscita dall'urto (con le notazioni dell'inizio della sezione, ma sottolineando qui la dipendenza dalla velocità iniziale v') è indipendente dall'angolo ϕ' ed ha l'espressione

$$\tau(b, x|v') = 2 \int_{R_{\min}}^{R(0)} dR \frac{1}{\sqrt{2m[E(0) - V_{\text{eff}}(R)]}} \quad (\text{A.38})$$

Ricordiamo infine che l'angolo θ di scattering è l'angolo polare $\theta \in [0, \pi]$ della velocità uscente v rispetto all'asse polare orientato come la velocità entrante v' (diretta come l'asse delle x negative). Per arrivare ad una formula per θ , definiamo

$$\theta_{\text{sc}}^* = \pi - \theta_{\text{out}}^* = \pi - 2 \int_{R_{\min}}^{\infty} dR \frac{k}{R^2 \sqrt{2m^{-1}[E(0) - V_{\text{eff}}(R)]}} \quad (\text{A.39})$$

che è, modulo 2π , l'angolo tra v e v' . θ è allora la minima distanza tra π e l'insieme $\{\theta_{sc}^* + 2n\pi, n \in \mathbb{Z}\}$, (si osservi che tale distanza è al massimo π).

A.4. Trasformazioni di misure tra spazi Euclidei

In questa sezione considereremo una trasformazione T da uno spazio \mathbb{R}^n in sé (o da un sottoinsieme E di \mathbb{R}^n in un sottoinsieme F dello stesso) e la trasformazione che essa induce sulle misure. Le applicazioni che motivano la nostra analisi vengono dalla teoria dello scattering, ma considereremo anche applicazioni allo studio di sistemi dinamici e, in questo ambito, il risultato principale sarà la dimostrazione del Teorema di Liouville, che ha una importanza fondamentale in Meccanica Classica e in Meccanica Statistica.

Consideriamo dunque una trasformazione T da un insieme $E \subset \mathbb{R}^n$ in un insieme $F \subset \mathbb{R}^n$. Supponiamo E un aperto, limitato e connesso e T una trasformazione regolare. Per averne un'immagine fisica, pensiamo ad E come ad una regione dello spazio fisico occupata inizialmente da un fluido. Al tempo $t > 0$ l'elemento di fluido che inizialmente era in $r \in E$, sarà in un qualche altro punto dello spazio, che indicheremo con Tr . Il fluido ha ovviamente una massa, ma non ha senso parlare di massa per i singoli punti, necessariamente infinitesima, ma piuttosto di massa di fluido in regioni finite dello spazio. Specificare la distribuzione di massa del fluido significa dunque assegnare per ogni insieme (misurabile) $A \subset E$ la massa $\mu(A)$ del fluido contenuto nella regione A .

Poiché il fluido si muove, al tempo t avrà una distribuzione di massa in generale diversa da quella iniziale che sarà definita da un insieme di valori $\{\nu(B)\}$, al variare di B nella classe degli insiemi misurabili di F . Chiamiamo $T^{-1}B$ l'insieme dei punti $r \in E$ tali che $Tr \in B$ (si osservi che questa definizione non richiede che T sia invertibile). Se per ogni B

$$\nu(B) = \mu(T^{-1}B) \quad (\text{A.40})$$

diremo che il moto del fluido conserva la massa. Nel seguito assumeremo la validità della (A.40).

In termini più precisi una misura su E è l'insieme $\{\mu(A)\}$, dove A varia nella classe degli insiemi misurabili di E , purché l'insieme di tali valori soddisfi alcune condizioni. Queste sono automaticamente soddisfatte nel caso cui siamo interessati, cioè quando esiste una funzione "regolare $\rho(r)$ su E per cui

$$\mu(A) = \int_A dr \rho(r), \quad dr = dr_1 \cdots dr_n \quad (\text{A.41})$$

Nel caso di un fluido, $\rho(r)$ si interpreta come la densità di massa del fluido in r .

Il problema principale che discuteremo in questa sezione sarà il seguente: data una misura μ con densità ρ , trovare la densità λ della misura ν , immagine di μ tramite la

(A.40). Prima di entrare nell'argomento discutiamo altri esempi, oltre quello del fluido considerato precedentemente.

Esempi.

- Questo è l'esempio di maggior rilevanza per il seguito della sezione. La trasformazione T verrà definita in termini del flusso temporale soluzione al dato iniziale di un'equazione differenziale (Problema di Cauchy). L'equazione, nell'incognita $r_t \in \mathbb{R}^n$, $t \geq 0$, è

$$\frac{dr_t}{dt} = \omega(r_t), \quad r_0 = r \quad (\text{A.42})$$

$r \in \mathbb{R}^n$ è il dato iniziale e $\omega(r)$ un assegnato campo vettoriale, da interpretarsi come “velocità del punto r_t ”. Supporremo valido un teorema di esistenza (globale) ed unicità per il problema (A.42) e che a ogni tempo t la soluzione r_t sia una funzione invertibile del dato iniziale che denoteremo con $r_t = S_t r$. Fissato poi $t \geq 0$, poniamo $T = S_t$.

Le equazioni del moto per k punti materiali in \mathbb{R}^d possono essere scritte nella forma (A.42), che è anzi il modo standard di scriverle in analisi (equazioni differenziali in forma normale). Si ponga infatti

$$r = \{q_1, \dots, q_k; v_1, \dots, v_k\} \quad (\text{A.43})$$

con q_i e v_i vettori in \mathbb{R}^d che rappresentano posizione e velocità dello i -esimo punto di un sistema meccanico. Le equazioni del moto assumono allora la forma (A.42) con $n = 2kd$ e

$$\omega = \{v_1, \dots, v_k; F_1/m_1, \dots, F_k/m_k\} \quad (\text{A.44})$$

dove F_i è la forza che agisce sullo i -esimo punto la cui massa è m_i .

- Questo è il caso che riguarda lo scattering. Conviene introdurre un sistema di coordinate sferiche in cui gli angoli (tradizionalmente chiamati $\phi \in [0, 2\pi)$ e $\theta \in [0, \pi]$) sono definiti rispetto alla terna $(-x, y, z)$.

E è l'insieme in cui si trova inizialmente *il pacchetto di particelle sparse verso il campo di forze*. E è quindi un sottoinsieme di C (si veda la Sezione precedente) descritto, per esempio, dall'insieme di (x, b, ϕ') con $x \in (x_0, x_1)$ (un qualche intervallo dell'asse delle x con $x_0 > R_0$, la velocità iniziale scelta parallela all'asse $-x$), $b \in [0, R_0]$ (si ricordi che b è il parametro d'urto, cioè la distanza del dato iniziale dall'asse delle x) e ϕ' l'angolo in coordinate sferiche. Supponendo la velocità iniziale v parallela all'asse $-x$, per ogni punto $(x, b, \phi') \in E$ si definisce τ come tempo d'uscita dall'urto, cioè l'istante in cui il punto esce dal campo di forze, θ come l'angolo di scattering (che coincide con l'angolo θ della velocità uscente nelle coordinate sferiche definite precedentemente) e ϕ l'altro angolo in coordinate sferiche associato alla velocità uscente: poiché il moto è piano ϕ può assumere solo

i valori ϕ' e $\phi' + \pi$ (modulo 2π). La trasformazione T è

$$T(x, b, \phi') = (\tau, \theta, \phi) \quad (\text{A.45})$$

- Questo terzo caso è molto simile a quello considerato precedentemente di un fluido, solo l'interpretazione è diversa. In questo caso, infatti, si parla di probabilità con $\mu(A)$ la probabilità che si verifichi un evento in A . Si deve allora imporre che $\mu(E) = 1$ e data la trasformazione T , la probabilità di un evento $B \subset F$, $F = TE$, è allora data (per definizione) dalla (A.40), che ha una ovvia interpretazione: un evento B si verificherà se e solo se si è verificato un evento nella controimmagine di B secondo T . ρ , la densità di μ è qui una densità di probabilità e il suo integrale (su E) è, per quanto detto prima, uguale a 1.

Torniamo ora al problema della trasformazione delle densità, supponendo valide le (A.40)-(A.41). Vogliamo sapere quando la misura ν ha una densità λ . Se ciò accade dovrà aversi

$$\int_B dr' \lambda(r') = \int_{T^{-1}B} dr \rho(r) \quad (\text{A.46})$$

La (A.46) potrebbe non avere soluzione, come nel caso in cui T sia costante su un insieme $A \subset E$ di misura non nulla, T allora trasforma ogni punto di A in uno stesso punto r^* di F e la misura ν concentra sul solo punto r^* tutta la misura di A . Per la conservazione della massa, equazione (A.40), ν ha quindi densità infinita in r^* .

Iniziamo dal caso più semplice in cui

T è una trasformazione invertibile da E in F

Lo Jacobiano $J_T(r)$ è il determinante della matrice Jacobiana $\partial T(r)/\partial r$, i cui elementi sono le derivate parziali delle componenti di Tr rispetto alle componenti di r , ($\partial T(r)/\partial r$ è quindi una matrice n per n).

Vogliamo dimostrare che

$$J_T(r) \lambda(Tr) = \rho(r) \quad (\text{A.47})$$

sotto l'ipotesi che esista $\delta > 0$ per cui

$$J_T(r) = \det\left(\frac{\partial Tr}{\partial r}\right) \geq \delta > 0 \quad (\text{A.48})$$

(La (A.47) rimane valida quando la Jacobiano è negativo, pur di prenderne il modulo).

Per dimostrare la (A.47) cambiamo variabili d'integrazione nell'integrale del membro a sinistra della (A.46), ponendo $r' \rightarrow r = T^{-1}r'$. Si ha allora

$$\int_{T^{-1}B} dr \lambda(Tr) J_T(r) = \int_{T^{-1}B} dr \rho(r)$$

che, per l'arbitrarietà di B (e quindi di $T^{-1}B$) dimostra la (A.47).

Applichiamo ora questo risultato all'esempio (1) di sopra, supponendo che lo Jacobiano $J_{S_t}(r)$ verifichi la (A.48) uniformemente in t . Usando la (A.47),

$$\lambda_t(S_t r) J_{S_t}(r) = \rho(r) \quad (\text{A.49})$$

Per calcolare $J_{S_t}(r)$ useremo il seguente Teorema:

Teorema A.4.1. *Sia $\omega(r)$ il campo di velocità che definisce il flusso S_t , allora*

$$\frac{d}{dt} J_{S_t}(r) = J_{S_t}(r) \nabla \cdot \omega(S_t r), \quad \nabla \cdot \omega \equiv \text{div } \omega \quad (\text{A.50})$$

Dimostrazione.

Iniziamo col dimostrare che è possibile ridursi al caso in cui la derivata nella (A.50) è calcolata a $t = 0$. Ciò si otterrà dimostrando che

$$\frac{d}{dt} J_{S_t}(r) = J_{S_t}(r) \frac{d}{d\tau} J_{S_\tau}(S_t(r)) \Big|_{\tau=0} \quad (\text{A.51})$$

Ovviamente

$$\frac{d}{dt} J_{S_t}(r) = \frac{d}{d\tau} J_{S_{t+\tau}}(r) \Big|_{\tau=0}$$

Per la proprietà di semigruppato $S_{t+\tau} = S_\tau \circ S_t$. Si ha allora, chiamando $r' = S_t r$,

$$\left(\frac{\partial S_{t+\tau}(r)}{\partial r} \right) = \left(\frac{\partial S_\tau(r')}{\partial r'} \right) \left(\frac{\partial r'}{\partial r} \right), \quad J_{S_{t+\tau}}(r) = J_{S_t}(r) J_{S_\tau}(r')$$

da cui la (A.51).

Rimane quindi da dimostrare che

$$\frac{d}{d\tau} J_{S_\tau}(r') \Big|_{\tau=0} = \nabla \cdot \omega(r') \quad (\text{A.52})$$

Usando la definizione di determinante,

$$J_{S_\tau}(r') = \sum_{i_1 \dots i_n} (-1)^{P(i_1 \dots i_n)} a_{1, i_1}(\tau) \cdots a_{n, i_n}(\tau) \quad (\text{A.53})$$

dove $P(i_1 \dots i_n)$ è il segno della permutazione $(i_1 \dots i_n)$ di $(1 \dots n)$;

$$a(j, i_j)(\tau) = \frac{\partial r_j(\tau; r')}{\partial r'_{i_j}}$$

con $r(\tau; r')$ la soluzione della (A.42) al tempo τ con dato iniziale r' . Quindi

$$a(j, i_j)(0) = \mathbf{1}_{j, i_j}; \quad \frac{\partial}{\partial \tau} a(j, i_j)(\tau) = \frac{\partial \omega_j(\tau; r')}{\partial r'_{i_j}} \quad (\text{A.54})$$

Deriviamo rispetto a τ la (A.53) e poniamo poi $\tau = 0$. Usando la prima delle (A.54), vediamo che l'unico termine che sopravvive è quello in cui $i_j = j$ per ogni j . La seconda delle (A.54) dimostra allora la (A.53). Il Teorema A.4.1 è dimostrato. \square

Nel primo esempio, che si riferisce ad un sistema di particelle, $\omega(r)$ è dato dalla (A.44) e r dalla (A.43). Supponendo che le forze non dipendano dalle velocità, si ha

$$\nabla \cdot \omega = \sum_{i=1}^k \left\{ \frac{\partial v_i}{\partial q_i} + \frac{\partial F_i}{\partial v_i} \right\} = 0 \quad (\text{A.55})$$

Il campo di velocità $\omega(r)$ nella (A.42) è quindi solenoidale nel caso della meccanica di sistema conservativi.

Teorema A.4.2 (Teorema di Liouville). *Se il campo di velocità $\omega(r)$ nella (A.42) è solenoidale, (ha cioè divergenza nulla) allora*

$$\lambda_t(S_t r) = \lambda_0(r) = \rho(r) \quad (\text{A.56})$$

In particolare, scegliendo $\rho(r) \equiv 1$, per ogni insieme limitato e regolare A

$$\int_B dr' = \int_{S_{-t}B} dr \quad (\text{A.57})$$

(cioè il flusso dinamico conserva la misura di Lebesgue).

Dimostrazione.

Per la (A.50)

$$J_{S_t}(r) = J_{S_0}(r) = 1$$

(l'ultima uguaglianza discende dal fatto che S_0 è la trasformazione identica). La (A.56) segue allora dalla (A.49) e la (A.57) dalla (A.56) con $\rho = \lambda = 1$. Il Teorema A.4.2 è dimostrato. \square

Il teorema di Liouville è un teorema sulla “conservazione del volume” per flussi temporali generati da campi di velocità con divergenza nulla. Si noti che si parla di volumi e non di masse, la massa si conserva anche quando la velocità non ha divergenza nulla. In tal caso le densità $\lambda(Tr)$ e $\rho(r)$ non sono uguali e il loro rapporto è il rapporto tra i volumi, cioè lo Jacobiano $J_T(r)^{-1}$. Se $J_T(r) = 1$ allora i volumi sono uguali e così le densità, $\lambda(Tr) = \rho(r)$. In particolare se $\rho = 1$ allora anche $\lambda = 1$, e a tal caso ci si riferisce parlando di conservazione del volume.

Torniamo ora alla (A.49) che, derivata rispetto a t , permette di ricavare un'equazione differenziale in λ_{S_t} : chiamando per brevità $r' = S_t r$, $\lambda_t = \lambda_{S_t}$, $J_t = J_{S_t}$,

$$\left(\frac{\partial \lambda_t(r')}{\partial t} + \nabla \lambda_t(r') \cdot \omega(r') \right) J_t(r) + \lambda_t(r') \frac{d}{dt} J_t(r) = 0 \quad (\text{A.58})$$

Usando la (A.50), otteniamo dalla (A.58)

$$\frac{\partial \lambda_t(r')}{\partial t} + \nabla \lambda_t(r') \cdot \omega(r') + \lambda_t(r') \nabla \cdot \omega(r') = 0 \quad (\text{A.59})$$

che assume dunque l'usuale forma dell'equazione di conservazione della massa:

$$\frac{\partial \lambda_t(r')}{\partial t} + \nabla \cdot j_t(r') = 0, \quad j_t(r') = \lambda_t(r') \omega(r') \quad (\text{A.60})$$

$J_T > 0$, ma T non è invertibile.

Nel caso dello scattering può accadere che T non sia invertibile. Esamineremo questo caso nell'ipotesi che $J_T = 0$ su un chiuso di misura nulla. Indicando con E il complementare di tale insieme, considereremo T ristretta ad E (che è un aperto) e supporremo $J_T > 0$ in E . Pur essendo $J_T > 0$, è possibile (in più di una dimensione) che T non sia invertibile, come nell'esempio che segue, in cui T trasforma la “striscia”

$$E = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 < x < 4\pi, \ 0 < y < 1\}$$

al modo seguente. Si pensi ad E come fatto di “pasta malleabile”; la si espanda prima in alto e la si pieghi poi in modo che si avvolga due volte sulla corona circolare

$$F = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 1 < \sqrt{x^2 + y^2} < 2\}$$

Più precisamente, rappresentando F in coordinate polari (θ, ρ) :

$$F = \{(\theta, \rho) : 1 < \rho < 2\}$$

chiameremo T^* la trasformazione T da E in F rappresentato in coordinate polari. Si ha

$$T^*(x, y) = (x \bmod 2\pi, 1 + y)$$

Lo Jacobiano $J_T(x, y)$ della trasformazione T è il prodotto di $J_{T^*}(x, y)$ e dello Jacobiano della trasformazione in coordinate polari, perciò

$$J_T(x, y) = \rho(T(x, y)) \geq 1$$

T non è invertibile in quanto ogni punto di F proviene da due punti di E .

Vale anche in questo caso un analogo della (A.47) che assume ora la forma

$$\lambda(r') = \sum_{r: T r = r'} \rho(r) |J_T(r)|^{-1} \quad (\text{A.61})$$

Accennerò solo alla dimostrazione della (A.61), senza darne una prova completa. Per il teorema delle funzioni implicite, dato un qualunque punto r di E esiste un intorno U di r ,

la cui chiusura \bar{U} è in E e su cui T è invertibile (tra \bar{U} e $T\bar{U}$) e inoltre $J_T > 0$ (strettamente, essendo \bar{U} compatto). Possiamo allora applicare la teoria precedente restringendo T e ρ a \bar{U} . Otteniamo così una densità $\lambda_{(\bar{U})}$ in $T\bar{U}$ immagine di ρ in \bar{U} . $\lambda_{(\bar{U})}$ è poi estesa a tutto F , ponendola uguale a 0 fuori di $T\bar{U}$. Possiamo ovviamente ripetere il medesimo argomento in $E \setminus \bar{U}$, che è ancora un aperto. Avremo dunque un nuovo r , un suo intorno V e T sarà invertibile tra V e $T\bar{V}$. Si osservi che sebbene T sia invertibile tra \bar{U} e $T\bar{U}$ e tra \bar{V} e $T\bar{V}$, tuttavia potrebbe non esserlo tra $\bar{U} \cup \bar{V}$ e $T(\bar{U} \cup \bar{V})$. Tuttavia ciò non ci ha impedito di definire le densità $\lambda_{(\bar{U})}$ e $\lambda_{(\bar{V})}$ su F (con supporto in $T\bar{U}$ e $T\bar{V}$). Poiché

$$\lambda_{(\bar{U})}(Tr) = J_T(r)^{-1} \rho(r) \mathbf{1}_{r \in \bar{U}}, \quad \lambda_{(\bar{V})}(Tr) = J_T(r)^{-1} \rho(r) \mathbf{1}_{r \in \bar{V}}$$

definendo

$$\lambda_{(\bar{U} \cup \bar{V})} = \lambda_{(\bar{U})} + \lambda_{(\bar{V})}$$

si ha

$$\lambda_{(\bar{U} \cup \bar{V})}(r') = \mathbf{1}_{r \in \bar{U}, Tr=r'} J_T(r)^{-1} \rho(r) + \mathbf{1}_{r \in \bar{V}, Tr=r'} J_T(r)^{-1} \rho(r)$$

e, per ogni insieme B in F ,

$$\int_B dr' \lambda_{(\bar{U} \cup \bar{V})}(r') = \int_{T^{-1}B \cap (\bar{U} \cup \bar{V})} dr \rho(r)$$

Abbiamo così definito la densità $\lambda_{(\bar{U} \cup \bar{V})}$ con supporto in $T(\bar{U} \cup \bar{V})$ immagine della densità ρ ristretta a $\bar{U} \cup \bar{V}$ e siamo pronti ad iterare la procedura. Otteniamo così una successione di insiemi \bar{U}_k la cui unione è l'intero E ed inoltre, chiamando

$$E_N = \bigcup_{k=1}^N \bar{U}_k, \quad \lambda_{(E_N)} = \sum_{k=1}^N \lambda_{(\bar{U}_k)}$$

si ha, estendendo le considerazioni precedenti relative al caso $N = 2$,

$$\lambda_{(E_N)}(r') = \sum_{r \in E_N: Tr=r'} J_T(r)^{-1} \rho(r) \quad (\text{A.62})$$

e, per ogni insieme B in TE_N ,

$$\int_B dr' \lambda_{(E_N)}(r') = \int_{T^{-1}B \cap (E_N)} dr \rho(r) \quad (\text{A.63})$$

Si passa ora al limite per $N \rightarrow \infty$: essendo $\lambda_{(E_N)}(r')$ una successione crescente, il limite esiste ma potrebbe essere infinito (in un qualche insieme di F). Ometterò la dimostrazione che ciò può accadere al più in un insieme di misura nulla, la (A.62) diventa allora nel limite la (A.59) mentre la (A.63) dimostra che

$$\int_B dr' \lambda(r') = \int_{T^{-1}B} dr \rho(r) \quad (\text{A.64})$$

L'applicazione di questo risultato all'esempio (2) verrà discussa nella prossima sezione.

A.5. La sezione d'urto

In questa sezione applicheremo la teoria generale della sezione precedente al problema di scattering relativo ad un fascio monocromatico di particelle che incide su un campo di forze centrali. Il modello e le notazioni sono quelle della Sezione A.3.

Nostro scopo è dimostrare che la densità di massa $\lambda(\theta, \phi, \tau)$ nel fascio di particelle che esce dall'urto, per unità di tempo $d\tau$ e di area $\sin\theta d\theta d\phi$ (sulla superficie sferica unitaria in cui sono rappresentate le direzioni della velocità) è data dalla formula:

$$\lambda(\theta, \phi, \tau) = \sum_{T(b, \phi', x) = (\theta, \phi, \tau)} \rho(b, \phi', x) \frac{b|v|}{\sin\theta |d\theta/db|} \quad (\text{A.65})$$

La differenziabilità di $\theta(b)$ rispetto a b segue dalle proprietà di regolarità delle soluzioni delle equazioni differenziali rispetto ai dati iniziali. Nel seguito assumeremo tale proprietà di differenziabilità, omettendone la dimostrazione per cui si rimanda alla sezione di esercizi, dove si discute la differenziabilità in b dell'espressione integrale ricavata in (A.37) per θ_{out}^* .

Per ottenere la (A.65) useremo la teoria della Sezione A.4 partendo dall'espressione

$$\lambda(\theta, \phi, \tau) = \sum_{T(b, \phi', x) = (\theta, \phi, \tau)} \rho(b, \phi', x) \frac{b}{\sin\theta} \left| \det \left(\frac{\partial(\theta, \phi, \tau)}{\partial(b, \phi', x)} \right) \right|^{-1} \quad (\text{A.66})$$

Iniziamo con l'osservare che l'angolo ϕ relativo alla velocità uscente v è lo stesso, modulo π , dell'angolo ϕ' della posizione iniziale, perché il moto è piano. Quindi, eccetto che nei punti in cui $\theta = 0, \pi$, in cui ϕ non è definito, (si dovrà supporre perciò, nella dimostrazione che segue, che l'insieme dei valori del parametro di collisione b che producono valori di θ uguali a π e a 0 abbia misura nulla)

$$\left| \frac{\partial\phi}{\partial\phi'} \right| = 1, \quad \frac{\partial\phi}{\partial x} = \frac{\partial\phi}{\partial b} = 0$$

Poiché l'angolo di scattering θ non dipende da x , ma solo da b , il calcolo dello Jacobiano della trasformazione $(b, \phi', x) \rightarrow (\theta, \phi, \tau)$ si semplifica notevolmente:

$$\det \left(\frac{\partial(\theta, \phi, \tau)}{\partial(b, \phi', x)} \right) = \frac{\partial\theta}{\partial b} \frac{\partial\phi}{\partial\phi'} \frac{\partial\tau}{\partial x} \quad (\text{A.67})$$

Poiché τ non dipende da ϕ' , $\tau = \tau(b, x)$ e si ha

$$\tau(b, x) = \tau(b, x_0) + \frac{x - x_0}{|v|} \quad (\text{A.68})$$

Quindi

$$\frac{\partial\tau}{\partial x} = \frac{1}{|v|} \quad (\text{A.69})$$

e, ricordando che $|\partial\phi/\partial\phi'| = 1$, si ha

$$\left| \det \left(\frac{\partial(\theta, \phi, \tau)}{\partial(b, \phi', x)} \right) \right| = \frac{1}{|v|} \left| \frac{d\theta}{db} \right| \quad (\text{A.70})$$

La (A.65) è dimostrata. \square

A volte si parametrizza l'insieme C definito nella (A.27) usando una variabile temporale τ' invece della coordinata spaziale x , le variabili b e ϕ' sono invece lasciate invariate. τ' è definito in termini di x mediante la relazione

$$\tau' = \frac{x - x_0}{|v'|} \quad (\text{A.71})$$

e rappresenta il tempo di arrivo in x_0 di un punto inizialmente in x . Poiché $x \in [x_0, x_1]$

$$0 \leq \tau' \leq S = \frac{x_1 - x_0}{|v'|} \quad (\text{A.72})$$

Nel seguito considereremo anche il caso in cui $S = \infty$, in cui particelle continuano a passare per x_0 per un tempo illimitato.

Se $\rho(b, \phi', x)$ è la densità del fascio incidente quando C è rappresentato nelle variabili (b, ϕ', x) , la densità $\rho'(b, \phi', \tau')$ quando C è rappresentato nelle nuove variabili (b, ϕ', τ') si ottiene, applicando la (A.47),

$$\rho'(b, \phi', \tau') \det \left(\frac{\partial(b, \phi', \tau')}{\partial(b, \phi', x)} \right) = \rho(b, \phi', x)$$

(τ' e x in relazione tra loro come nella (A.71)), ottenendo così

$$\rho'(b, \phi', \tau') = |v'| \rho(b, \phi', x) \quad (\text{A.73})$$

$\rho'(b, \phi', \tau')$ è il flusso (di massa) per unità di tempo e di area (nella sezione Σ_{x_0} passante per x_0 e ortogonale alla direzione v' del fascio incidente).

In conclusione

$$\lambda(\theta, \phi, \tau) = \sum_{T(b, \phi', \tau') = (\theta, \phi, \tau)} \rho'(b, \phi', \tau') \frac{b}{\sin \theta |d\theta/db|} \quad (\text{A.74})$$

Con abuso di notazioni stiamo indicando ancora con T la trasformazione $(b, \phi', \tau') \rightarrow (\theta, \phi, \tau)$. L'espressione (A.74) si può semplificare. Sia $\tau_0(b) \equiv \tau(b, x_0)$ e

$$T(b, \phi', 0) = (\theta, \phi, \tau_0(b)), \quad \tilde{T}(b, \phi') = (\theta, \phi)$$

Poiché

$$T(b, \phi', \tau') = (\tilde{T}(b, \phi'), \tau_0(b) + \tau')$$

si ha

$$\lambda(\theta, \phi, \tau) = \sum_{\tilde{T}(b, \phi') = (\theta, \phi)} \mathbf{1}_{\tau \in [\tau_0(b), \tau_0(b) + S]} \frac{b}{\sin \theta |d\theta/db|} \rho'(b, \phi', \tau - \tau_0(b)) \quad (\text{A.75})$$

(S è stato definito nella (A.72)). Semplificheremo ulteriormente la (A.75) supponendo $S = \infty$, cioè $\tau' \in [0, \infty)$, e $\rho'(b, \phi', \tau') = \rho'(b, \phi')$ indipendente, cioè, da τ' : questo è il caso in cui il flusso incidente è per ogni valore di b e ϕ' uniforme nel tempo. Si ha allora

$$\lambda(\theta, \phi, \tau) = \sum_{\tilde{T}(b, \phi') = (\theta, \phi)} \mathbf{1}_{\tau \geq \tau_0(b)} \frac{b}{\sin \theta |d\theta/db|} \rho'(b, \phi') \quad (\text{A.76})$$

La sezione d'urto differenziale $d\sigma(\omega)/d\omega$, $\omega = (\theta, \phi)$ l'angolo solido corrispondente agli angoli θ e ϕ , è definita ponendo $\rho'(b, \phi') = 1$ e facendo il limite per $\tau \rightarrow \infty$ nella (A.76). Si ha allora

$$\frac{d\sigma(\omega)}{d\omega} = \sum_{\tilde{T}(b, \phi') = (\theta, \phi)} \frac{b}{\sin \theta |d\theta/db|}, \quad \omega = (\theta, \phi) \quad (\text{A.77})$$

Se

$$\sup_b \tau_0(b) = \tau_{\max} < \infty \quad (\text{A.78})$$

(come per esempio nel caso di urti con corpi rigidi, in cui la durata dell'interazione è istantanea o più in generale per potenziali repulsivi e opportuni valori dell'energia) allora per flussi incidenti unitari

$$\lambda(\theta, \phi, \tau) = \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega}, \quad \tau > \tau_{\max} \quad (\text{A.79})$$

$d\sigma/d\omega$ ha una trasparente interpretazione geometrica. Ritornando alla (A.47) nel caso in cui $\rho \equiv 1$ si ha $\lambda(Tr) = J_T(r)^{-1}$, quest'ultimo rappresenta il rapporto tra il volumetto infinitesimo intorno a r ed il suo trasformato tramite T . Nel nostro caso il valore del volumetto trasformato è $d\omega d\tau$, quello prima della trasformazione è $bdbd\phi'$. Poiché $d\tau = d\tau'$ si ha che la sezione d'urto è uguale al rapporto tra l'elemento d'area sulla sezione ortogonale al fascio incidente, $bdbd\phi'$, e il corrispondente elemento d'area sulla superficie sferica unitaria (che individua la direzione della velocità uscente dallo scattering), cioè $\sin \theta d\theta d\phi$. Queste considerazioni sono in completo accordo con la (A.77), ricordando che $d\phi = d\phi'$.

La "sezione d'urto totale è l'integrale in $d\omega$ della sezione d'urto differenziale e, per quanto detto, è l'area totale della sezione che la sfera di raggio R_0 (R_0 il range delle forze, cioè dove agisce il potenziale) presenta al fascio incidente:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\omega \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega} = \pi R_0^2 \quad (\text{A.80})$$

La sezione d'urto misura l'effetto di focalizzazione o di dispersione del fascio dovute all'azione delle forze. Là dove la sezione d'urto è più grande il fascio incidente si focalizza, dove invece è più piccola il fascio si disperde. La massima intensità è dove la sezione d'urto diverge. Il fenomeno si verifica se l'angolo di scattering $\theta = \theta(b)$ ha un massimo o un minimo, o comunque un punto di stazionarietà. Ciò accade per esempio (si veda la sezione di esercizi) ogni qual volta il potenziale sia repulsivo e limitato e l'energia delle particelle incidenti sufficientemente alta: in tal caso $\theta(b)$ ha un massimo per $b \neq 0$.

Si ha un fenomeno del tutto analogo nello scattering di onde elettromagnetiche. Può accadere che per particolari angoli di incidenza l'ampiezza della luce sia fortemente amplificata e quindi in quelle direzioni sia ben più visibile. A causa della dipendenza dell'angolo di rifrazione dalla frequenza dell'onda, il fenomeno si accompagna alla separazione delle varie componenti della luce determinando il fenomeno dell'arcobaleno.

Si può avere intensità uscente infinita anche per “back scattering, cioè se $\theta(b) = \pi$ e $b \neq 0$, ovvero se le particelle tornano indietro nella direzione opposta a quella incidente anche per urti non frontali. Vi è anche il problema opposto in cui si cercano invece le direzioni “oscurate nelle quali cioè l’intensità del fascio uscente si annulla. Tale fenomeno si manifesta se $d\theta/db = \infty$ e corrisponde a valori del parametro d’urto per cui si ha intrappolamento, cioè la particella incidente entra nel campo di forze senza mai riuscirne. Perché ciò si verifichi occorre che il potenziale efficace (corrispondentemente al dato parametro d’urto) abbia derivata nulla in R_{\min} , si veda la sezione A.3. Allora nel moto la distanza R_t decresce monotonamente verso R_{\min} senza raggiungere mai tale valore. Contemporaneamente il punto percorre una spirale che converge asintoticamente ad un ciclo limite, rappresentato da un moto circolare uniforme sulla circonferenza di raggio R_{\min} , fenomeno di “orbiting. In un intorno del valore del parametro d’urto per cui si ha orbiting il fascio incidente è defocalizzato e corrispondentemente l’intensità del fascio uscente è piccola.

L’ultima osservazione di questa sezione riguarda il “problema inverso che è di fondamentale importanza nelle applicazioni. Si tratta di trovare il potenziale che produce una assegnata sezione d’urto. In pratica una misura di scattering permette di conoscere (in realtà di avere informazioni sulla) sezione d’urto in corrispondenza alle varie energie del fascio incidente e da queste misure si vorrebbe determinare la forza che le ha prodotte. Per esempio, dalla verifica che l’energia cinetica delle particelle uscenti è uguale a quella delle entranti si deduce che il campo di forze è (compatibile con) un campo conservativo. Per risalire alla forza è in generale necessario conoscere la sezione d’urto a diverse energie, come, per esempio, nel caso di forze molto repulsive a corta distanza per cui occorre aumentare anche di molto l’energia incidente per esplorare le regioni più vicine al centro del campo di forze. Misure di scattering sono comuni nello studio delle particelle elementari e per l’intensità delle forze in gioco si rende necessario sviluppare una tecnologia molto sofisticata di alte energie.

Il problema inverso che per questi motivi ha un grande interesse applicativo è molto studiato soprattutto nel contesto della meccanica quantistica (per le applicazioni alle particelle elementari). Rimando per tutti questi aspetti alla letteratura specializzata.

A.6. Applicazioni alla Teoria Cinetica

È conveniente a questo punto introdurre una quantità che tra l’altro è effettivamente misurata in esperimenti di scattering, cioè la massa totale di particelle registrate in uscita dall’urto nell’intervallo temporale $[0, t]$ con velocità v , $|v| = |v'|$:

$$f_t(v) = \int_0^t d\tau \lambda(v, \tau) \quad (\text{A.81})$$

Asintoticamente ($t > \tau_{\max}$),

$$\frac{d}{dt}f_t(v) = \lambda(v, t) = \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega}(\omega(v', v), |v|)\rho' = \frac{d\sigma(\omega)}{d\omega}(\omega(v', v), |v|)|v|\rho \quad (\text{A.82})$$

dove $\omega(v', v)$ è l'angolo solido tra v e v' ; in realtà, come abbiamo visto, $d\sigma(\omega)/d\omega$ dipende solo dall'angolo $\theta \in [0, \pi]$ del cono con asse v' cui appartiene v . Nella sezione d'urto abbiamo esplicitato la dipendenza dal modulo della velocità, perché ci accingiamo a studiare il caso in cui le particelle incidenti non hanno tutte la stessa velocità, cioè fasci incidenti non monocromatici.

In parole la (A.82) si legge dicendo che il rateo per unità di tempo e di angolo solido di particelle che escono dall'urto con direzione v è uguale alla sezione d'urto differenziale $d\sigma/d\omega$ moltiplicata per ρ' o per $|v|\rho$, ρ' è infatti l'intensità del fascio incidente (per unità d'area in una sezione ortogonale al fascio); ρ è la densità per unità di volume.

Considereremo ora scattering tra particelle invece che scattering da potenziale. Si suppone che la distribuzione di massa delle particelle incidenti sia spazialmente omogenea ma dipendente dalla velocità, $\rho(v')drdv'$ indica la massa nel volumetto $drdv'$ dello spazio delle fasi. Rimandiamo per ora la discussione su come si schematizza e si risolve il problema fisico, per scrivere direttamente le formule di interesse per l'equazione di Boltzmann, usate nel Capitolo 5.

La prima formula estende la (A.82) ed esprime il rateo con cui cresce la densità di particelle che escono dall'urto con velocità v_2 :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\text{densità di partic. prodotte con veloc. } v_2 \text{ entro } t \right) \\ = \int dv_1 \int d\omega \rho(v'_1) \rho(v'_2) |v_2 - v_1| \frac{d\sigma}{d\omega}(\omega, |v_2 - v_1|) \end{aligned} \quad (\text{A.83})$$

v'_1 e v'_2 si ottengono da v_1 , v_2 e ω in tappe successive. Prima si impone che il baricentro abbia la stessa velocità e che le velocità relative abbiano lo stesso modulo:

$$v'_1 + v'_2 = v_1 + v_2, \quad |v'_1 - v'_2| = |v_1 - v_2| \quad (\text{A.84})$$

Poi si determina $v'_1 - v'_2$ imponendo che l'angolo solido del vettore $v'_1 - v'_2$ rispetto al vettore $v_1 - v_2$ sia ω e si hanno quindi v'_1 e v'_2 , essendo ormai noti $v'_1 + v'_2$ e $v'_1 - v'_2$. $d\sigma/d\omega(\omega, |v_1 - v_2|)$ è la sezione d'urto per lo scattering da potenziale (il potenziale di interazione tra le particelle) di particelle che hanno massa uguale alla massa ridotta ($m/2$, se m è la massa delle singole particelle).

La seconda formula è analoga alla prima e riguarda il rateo con cui diminuisce la densità di particelle con velocità v_2 nel fascio incidente:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\text{densità di partic. iniziali con veloc. } v_2 \text{ deflesse entro } t \right) \\ = -\rho(v_2) \int dv_1 \rho(v_1) |v_2 - v_1| [\pi R_0^2] \end{aligned} \quad (\text{A.85})$$

Prima di giustificare le (A.83) e (A.85) discuteremo il caso più semplice di scattering da potenziale di un fascio non monocromatico.

Scattering di un fascio non monocromatico

Supporremo un fascio di particelle incidenti spazialmente omogeneo, $\rho(v')drdv'$ indica la massa contenuta nel volumetto $drdv'$ dello spazio delle fasi. Con $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ indichiamo l'insieme delle coppie (r, v') con $|r| > R_0$ e tali che nel moto con dato iniziale (r, v') esista $t > 0$ per cui $|r(t)| \leq R_0$ (al solito R_0 indica il range del potenziale). Su \mathcal{X} possiamo allora definire la trasformazione T come nel caso monocromatico, T associa alla coppia (r, v') la coppia (v, τ) , v la velocità dopo l'urto, τ l'istante di uscita dall'urto.

In analogia con la (A.46), la densità $\lambda(v, \tau)$ dovrà esser tale che per ogni insieme misurabile (limitato) B di $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+$

$$\int_B dv d\tau \lambda(v, \tau) = \int_{\mathcal{X} \cap T^{-1}B} dv' dr \rho(v') \quad (\text{A.86})$$

Vogliamo dimostrare che asintoticamente, per $\tau \rightarrow \infty$,

$$\lambda(v, \tau) = |v| \int d\omega \frac{d\sigma(\omega, |v|)}{d\omega} \rho(v'(\omega, v)) \quad (\text{A.87})$$

dove indichiamo con $v'(\omega, v)$ la velocità il cui modulo è $|v|$ e che ha angolo solido ω rispetto ad un asse diretto come v .

Dimostrazione della (A.87).

Per ogni valore di v' , l'integrale in dr nella (A.86) è quello del caso monocromatico, supponendo allora che i valori di τ coinvolti in B siano sufficientemente grandi, abbiamo

$$\int dr \rho(v') \mathbf{1}_{(r, v') \in \mathcal{X} \cap T^{-1}B} = \rho(v') |v'| \int d\tau \int d\omega \frac{d\sigma(\omega, |v'|)}{d\omega} \mathbf{1}_{(v(\omega, v'), \tau) \in B} \quad (\text{A.88})$$

($v(\omega, v')$ è la velocità il cui modulo è $|v'|$ e il cui angolo solido rispetto ad un asse diretto come v' è ω).

Integriamo la (A.88) in dv' usando coordinate sferiche, $dv' = |v'|^2 dv' d\hat{v}'$, osservando che, per la conservazione dell'energia, $|v'| = |v|$. Inoltre ω è l'angolo solido del vettore \hat{v} rispetto a \hat{v}' , quindi $dv = |v|^2 d|v| d\omega$ e

$$\int_B dv d\tau \lambda(v, \tau) = \int_B dv d\tau \int d\hat{v}' \rho(|v| \hat{v}') |v| \frac{d\sigma(\omega(v', v), |v'|)}{d\omega}$$

(dove $\omega(v', v)$ è l'angolo solido determinato dalla direzione di v rispetto all'asse per v'). Si ha quindi

$$\lambda(v, \tau) = \int d\hat{v}' \rho(|v| \hat{v}') |v| \frac{d\sigma(\omega(v', v), |v'|)}{d\omega}$$

Possiamo fare l'integrale di $d\hat{v}'$ considerando l'elemento $d\omega'$ di angolo solido rispetto all'asse orientato come v , si ha allora, pensando v' come funzione di ω' ,

$$\lambda(v, \tau) = \int d\omega' \rho(v') |v| \frac{d\sigma(\omega(v', v), |v'|)}{d\omega}$$

Infine

$$\frac{d\sigma(\omega(v', v), |v'|)}{d\omega} = \frac{d\sigma(\omega', |v'|)}{d\omega}$$

in quanto la sezione d'urto dipende solo dall'angolo θ tra i due vettori v e v' .

La (A.87) è dimostrata. \square

In analogia con la (A.82) e indicando con $f_t(v)$ la massa di particelle con velocità v dopo l'urto registrate entro il tempo t , abbiamo per t sufficientemente grande,

$$\frac{d}{dt}f_t(v) = |v| \int d\omega \frac{d\sigma(\omega, |v|)}{d\omega} \rho(v'(\omega, v)) \quad (\text{A.89})$$

che incomincia ad avere una qualche somiglianza con la (A.83).

Scattering tra due fasci di particelle

Impostiamo l'analisi che ci porterà alla giustificazione delle equazioni (A.83) e (A.85) con una discussione sulla modellizzazione del problema che inizialmente riferiamo al caso di due fasci di particelle diretti l'uno contro l'altro.

Supponiamo dunque di avere due fasci spazialmente omogenei di particelle, le cui velocità sono indicate con v'_i e le densità con $\rho_i(v'_i)$, $i = 1, 2$. Ne studieremo l'evoluzione facendo evolvere ogni coppia di particelle (r_i, v'_i) , $i = 1, 2$, (prese dai due fasci) come se fossero sole (problema dei due corpi). La prescrizione è che se nel moto le particelle si trovano entro la portata delle forze e subiscono scattering, allora contribuiscono al conteggio totale con un fattore proporzionale a $\rho_1(v'_1)\rho_2(v'_2)$.

$\rho_1(v'_1)\rho_2(v'_2)dr_1dv'_1dr_2dv'_2$ è la massa nel volumetto $dr_1dv'_1dr_2dv'_2$ dello spazio delle fasi di due particelle se supponiamo, come stiamo facendo, l'indipendenza statistica tra le distribuzioni nei due fasci, espressa appunto dall'assumere che la densità congiunta sia il prodotto delle densità.

Occorre sottolineare che la schematizzazione è irrealistica, una stessa particella viene contata più volte e gli eventi che stiamo considerando non sono tutti compatibili l'uno con l'altro. Il modello però diventa plausibile nel limite di basse densità in cui le condizioni di incompatibilità sembrano avere peso minore. L'affermazione è tutt'altro che ovvia e tuttavia ha una sua prova rigorosa, contenuta nel contesto più generale che porta alla derivazione dell'equazione di Boltzmann, in cui il significato preciso della condizione di bassa densità viene chiarito da una procedura di limite, (il limite di Boltzmann-Grad).

Assumerò nel seguito questa schematizzazione del problema senza ulteriori commenti. In generale in esperimenti con due fasci di particelle si misurano più parametri, come le velocità uscenti, v_1 e v_2 , il tempo τ in cui l'urto finisce e "il luogo" in cui esso è avvenuto. Quest'ultima quantità non è definita con precisione poiché le particelle si muovono e l'urto avviene in un tempo finito, si può allora usare come parametro la posizione del baricentro al momento in cui l'urto finisce, o, come faremo in quanto più semplice, al momento iniziale.

Possiamo dunque formulare il problema in termini di una trasformazione T definita su un sottoinsieme \mathcal{X} di $(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3) \times (\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$: chiamando (r_1, r_2, v'_1, v'_2) un elemento di questo spazio, \mathcal{X} è l'insieme in cui $|r'_1 - r'_2| > R_0$, (R_0 il range dell'interazione) ed inoltre nel moto che inizia in (r_1, v'_1) e (r_2, v'_2) la distanza raggiunge valori minori di R_0 . Su tale insieme T associa a (r_1, r_2, v'_1, v'_2) i valori (r_G, v_1, v_2, τ) , dove r_G è la posizione iniziale del baricentro, v_1 e v_2 sono le velocità dopo l'urto e τ è il tempo in cui per l'ultima volta la distanza è R_0 (e l'urto finisce).

Possiamo ricondurci al caso già trattato di scattering da potenziale usando l'analisi della Sezione §A.1 che si basa sul cambio di variabili $(r_1, r_2) \rightarrow (r_G, r)$ e, corrispondentemente, $(v_1, v_2) \rightarrow (v_G, v)$. Nel caso presente, in cui le due masse sono uguali, la trasformazione è semplicemente

$$r_G = \frac{r_1 + r_2}{2}, \quad r = \frac{r_1 - r_2}{2}$$

L'inversa è

$$r_1 = r_G + \frac{r}{2}; \quad r_2 = r_G - \frac{r}{2}$$

In modo uguale si trasformano le velocità (essendo le trasformazioni lineari). Conviene anche osservare che

$$\frac{\partial(r_1, r_2)}{\partial(r, r_G)} = \frac{\partial(v_1, v_2)}{\partial(v, v_G)} = 1$$

La densità $\lambda(v_1, v_2, r_G, \tau)$ di particelle uscenti dall'urto si determina imponendo la conservazione della massa, dovrà quindi aversi, per ogni insieme misurabile e limitato B di \mathbb{R}^{10} ,

$$\int_B dr_G dv_1 dv_2 d\tau \lambda(v_1, v_2, r_G, \tau) = \int_{T^{-1}B \cap \mathcal{X}} dr_1 dr_2 dv'_1 dv'_2 \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) \quad (\text{A.90})$$

Il procedimento è simile a quello svolto nel caso di scattering di un fascio non monocromatico. Cambiando variabili, l'elemento di volume nella (A.90) diventa

$$dr_1 dr_2 dv'_1 dv'_2 = dr_G dr dv'_G dv'$$

e, fissati r_G, v'_G, v' , la condizione che $(r_1, r_2, v'_1, v'_2) \in \mathcal{X}$ diventa per r' la “solita condizione” di appartenere al cilindro $C_{v'}$ di asse v' . Supponendo che i valori di τ coinvolti in B siano sufficientemente grandi, in analogia con la (A.88), possiamo riscrivere il membro di destra nella (A.90) come

$$\int dr_G dv'_G dv' d\tau d\omega \mathbf{1}_B \frac{d\sigma(\omega, |v'|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v'| \quad (\text{A.91})$$

dove v'_1 e v'_2 sono determinati da v'_G e v' ; v_1 e v_2 sono a loro volta determinati da $v'_G = v_G$ e v , il cui modulo è lo stesso di v' e la cui direzione è quella dell'angolo solido ω , contato a partire da v' . La funzione caratteristica $\mathbf{1}_B$ indica infine che le variabili (r_G, v_1, v_2, τ) così ottenute siano in B .

Procedendo come nella dimostrazione della (A.87), usiamo coordinate sferiche per fare l'integrale in dv' ; inoltre essendo $v'_G = v_G$ e $|v'| = |v|$, possiamo anche interpretare l'integrale

in $dv'_G d|v'|$ come integrale in $dv_G d|v|$. Quindi la (A.91) diventa

$$\int dr_G dv_G d|v| v^2 d\hat{v}' d\tau d\omega \mathbf{1}_B \frac{d\sigma(\omega, |v'|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v'| \quad (\text{A.92})$$

Il differenziale $d|v|v^2 d\omega$ ricostruisce il differenziale dv . Poiché $dv_G dv = dv_1 dv_2$, la (A.92) si riscrive come

$$\int_B dr_G dv_G dv_1 dv_2 d\tau \int d\hat{v}' \frac{d\sigma(\omega(v', v), |v|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v| \quad (\text{A.93})$$

dove $\omega(v', v)$ è l'angolo solido che la velocità relativa v dopo l'urto forma con quella prima dell'urto. Le velocità v'_i sono determinate dalle v_i e da \hat{v}' con le usuali considerazioni. In conclusione, ricordando che la (A.93) è una riscrittura del membro di destra della (A.90), otteniamo da quest'ultima, per l'arbitrarietà di B e per τ sufficientemente grande,

$$\lambda(r_G, v_1, v_2, \tau) = \int d\hat{v}' \frac{d\sigma(\omega(v', v), |v|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v| \quad (\text{A.94})$$

Come nella conclusione della dimostrazione della (A.87) possiamo riscrivere questa ultima relazione come

$$\lambda(r_G, v_1, v_2, \tau) = \int d\omega' \frac{d\sigma(\omega', |v|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) \quad (\text{A.95})$$

dove la direzione di v' è individuata dall'angolo solido ω' contato da un asse per v .

Dalla (A.95) si evince che la densità λ delle particelle uscenti nei due fasci non è più il prodotto delle singole distribuzioni, come accadeva per le densità incidenti. L'urto crea correlazioni (tra le particelle) e questo è il punto più delicato nella derivazione dell'equazione di Boltzmann, che appunto si basa sulla dimostrazione che gli urti successivi continuano ad avvenire come se non vi fossero correlazioni, (propagazione del caos).

$\lambda(r_G, v_1, v_2, \tau)$ non dipende esplicitamente da r_G , ciò significa che la densità di particelle prodotte con velocità v_1 e v_2 al tempo τ è uniforme nello spazio, cosa per altro ovvia se si ricorda che tali sono le densità dei fasci incidenti. Chiamando $f_t(v_1, v_2)$ la densità di particelle prodotte fino al tempo t , (per unità di volume spaziale e di velocità), si ha

$$\frac{df_t(v_1, v_2)}{dt} = \int d\omega' \frac{d\sigma(\omega', |v|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v|, \quad v = v_1 - v_2 \quad (\text{A.96})$$

Integrando rispetto a v_1 otteniamo il rateo di crescita della densità di particelle con velocità v_2 :

$$\frac{df_t(v_2)}{dt} = \int dv_1 \int d\omega' \frac{d\sigma(\omega', |v|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v| \quad (\text{A.97})$$

che è la (A.83) se poniamo $\rho_1 = \rho_2 = \rho$.

Per dimostrare la (A.85), dobbiamo calcolare il rateo con cui, per esempio, le particelle del secondo fascio con velocità v'_2 in un "piccolo intorno" di w entrano nel campo di forze e subiscono uno scattering. Il risultato non cambia se pensiamo ρ_2 nulla al di fuori

dell'intorno di w . Per τ sufficientemente grande, il rateo cercato si ottiene integrando la (A.94) rispetto a v_1 e v_2 . Si ha allora

$$\int dv_1 dv_2 d\hat{v}' \frac{d\sigma(\omega(v', v), |v|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v|$$

Per ogni valore di v' , scriviamo $dv_1 dv_2 = dv_G d|v| v^2 d\omega$ contando l'angolo solido ω a partire dalla velocità relativa entrante v' , cosicché $\omega(v', v) = \omega$. Abbiamo allora

$$\int d\hat{v}' dv_G d|v| v^2 d\omega \frac{d\sigma(\omega, |v|)}{d\omega} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v|$$

L'integrale in $d\omega$ ricostruisce la sezione d'urto totale e otteniamo

$$\int dv_G d|v| v^2 d\hat{v}' \frac{\pi R_0^2}{2} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v|$$

che possiamo riscrivere, poiché $v_G = v'_G$ e $|v| = |v'|$, come

$$\int dv'_1 dv'_2 \frac{\pi R_0^2}{2} \rho_1(v'_1) \rho_2(v'_2) |v'_1 - v'_2|$$

Quindi la densità di particelle del secondo fascio con velocità v'_2 che subiscono urti per unità di tempo e di volume (nello spazio delle fasi) è

$$\rho_2(v'_2) \int dv'_1 \frac{\pi R_0^2}{2} \rho_1(v'_1) |v'_1 - v'_2|$$

Cambiata di segno, questa quantità è il rateo considerato nella (A.85), ponendo $\rho_1 = \rho_2 = \rho$.

APPENDICE B

Appendice B. Complementi sul gas di Lorentz

In questa appendice dimostrerò alcune proprietà del gas di Lorentz che, per ragioni di spazio, ho preferito non inserire nel testo. Nella Sezione B.1 studieremo il caso di una particella quando entrambi i tipi di ostacoli sono presenti; nella Sezione B.2 studierò il gas vero e proprio (e non una singola particella) dimostrando che la densità del gas ha con grande probabilità lo stesso comportamento, nel limite macroscopico, del valore aspettato di una singola particella, come determinato nei Capitoli 1 e 3. Il risultato può quindi essere interpretato in termini di legge dei grandi numeri. Nella Sezione B.3 tornerò, con maggiori dettagli, sul paradosso dell'irreversibilità e nella B.4 discuterò il comportamento a tempi lunghi del gas di Lorentz.

B.1. Limite macroscopico con ostacoli di due tipi

In questa sezione dimostrerò l'analogo del Teorema 1.1 nel caso in cui siano presenti, con uguale probabilità, ostacoli sia di tipo 1 che di tipo 2. Le notazioni sono quelle del Capitolo 1. La probabilità che la configurazione di ostacoli sia \underline{b} , $P^\epsilon(\underline{b})$, ha l'espressione (1.8)-(1.9) con $p = 1/2$. Lo stato iniziale è $(0, e_1)$ e (q_t, v_t) è lo stato al tempo t , definito in termini della configurazione di ostacoli \underline{b} . In questo contesto si ha:

Teorema B.1.1. *Per ogni funzione regolare e limitata $\phi(r, v)$ e per ogni $\tau > 0$ esiste il limite*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} E^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_{\epsilon^{-1}\tau}, v_{\epsilon^{-1}\tau}) \right) =: \Gamma(\phi, \tau) \quad (\text{B.1})$$

dove, chiamando $v_0 = e_1$,

$$\begin{aligned} \Gamma(\phi, \tau) = e^{-\rho\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{v_1, \dots, v_n} \prod_{i=1}^n \mathbf{1}_{v_i \perp v_{i-1}} \\ \times \left(\frac{\rho}{2}\right)^n \int_0^\tau d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \phi\left(v_0\tau_1 + \cdots + v_n(\tau - \tau_n), v_n\right) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

La serie in (B.2) è assolutamente convergente.

Dimostrazione.

Le difficoltà nascono dal fatto che le traiettorie possono auto-intersecarsi, quando vi sono due tipi di ostacoli. Come vedremo, la probabilità di una traiettoria è ancora $(\rho\epsilon/2)^{n_1}(1 - \rho\epsilon)^{n_0}$, n_0 il numero di siti vuoti, n_1 di siti con ostacoli. Tuttavia $n_0 + n_1$ non è più uguale, in generale, alla durata t della traiettoria, proprio a causa delle auto-intersezioni. In sostanza, in contrasto con quanto avveniva con ostacoli solo di tipo 1, ora la probabilità di una traiettoria dipende da come la traiettoria è fatta. Vi sono due tipi di auto-intersezione, quelle “mild” e quelle “hard”: se l’auto-intersezione avviene in un sito vuoto è “mild”, se in un sito con ostacolo è “hard”. Entrambe sono possibili, ma quelle mild cambiano poco le probabilità, quelle hard sono catastrofiche ma, fortunatamente, sono rare e il loro peso trascurabile nel limite.

Ciò premesso, iniziamo la dimostrazione vera e propria che segue abbastanza fedelmente l’analoga del Teorema 1.3.1. Sia quindi $\mathcal{T} = (q_s, v_s)_{0 \leq s \leq t-1}$. \mathcal{T} determina i parametri $(n; t_1, \dots, t_n; v_1, \dots, v_n)$, $0 \leq t_1 < \dots < t_n \leq t-1$ sono gli istanti di collisione, v_i la velocità uscente dalla i -esima collisione, $v_i = v_{t_i+1}$, mentre chiamiamo $v_0 = e_1$. Si ha $v_{i-1} \perp v_i$, $i = 1, \dots, n$. La corrispondenza tra \mathcal{T} e $(n; t_1, \dots, t_n; v_1, \dots, v_n)$ è biunivoca.

Per evitare incontri hard, indichiamo con \mathcal{G} un insieme di traiettorie “buone”, così fatto. Si osservi che le velocità v_i con i pari sono orizzontali e quelle con i dispari, verticali. Nei corrispondenti intervalli di tempo la particella si muove orizzontalmente e, rispettivamente, verticalmente. \mathcal{G} è allora definito come l’insieme delle traiettorie in cui non accade che due qualunque tratti orizzontali, o verticali, siano allineati (appartengono cioè ad una stessa retta). Definiamo quindi

$$\Gamma^\epsilon(\phi, \tau) = \sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{G}} \phi(\epsilon q_t, v_t) \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}} P^\epsilon(\underline{b}) \quad (\text{B.3})$$

Dimostreremo che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Gamma^\epsilon(\phi, \tau) = \Gamma(\phi, \tau) \quad (\text{B.4})$$

con $\Gamma(\phi, \tau)$ come nella (B.2), e questo concluderà il teorema perché

$$\begin{aligned} |E^\epsilon(\phi(\epsilon q_t, v_t)) - \Gamma^\epsilon(\phi, \tau)| &\leq \|\phi\| \sum_{\mathcal{T} \notin \mathcal{G}} \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}} P^\epsilon(\underline{b}) \\ &\leq \|\phi\| \left(1 - \sum_{\mathcal{T} \in \mathcal{G}} \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}} P^\epsilon(\underline{b}) \right) \\ &\leq \|\phi\| (1 - \Gamma^\epsilon(1, \tau)) \end{aligned}$$

dove $\Gamma^\epsilon(1, \tau)$ è dato dalla (B.3) con $\phi = 1$. Facendo il limite per $\epsilon \rightarrow 0$ e supponendo di aver già dimostrato la (B.4), abbiamo allora

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} |E^\epsilon(\phi(\epsilon q_t, v_t)) - \Gamma^\epsilon(\phi, \tau)| \leq \|\phi\| (1 - \Gamma(1, \tau)) = 0$$

l’ultima uguaglianza si ottiene verificando tramite la (B.2) che $\Gamma(1, \tau) = 0$. Basterà quindi dimostrare la (B.4).

Sia dunque $\mathcal{T} \in \mathcal{G}$. Indichiamo con $Q = (q_s)_{0 \leq s \leq t-1}$ la parte spaziale di \mathcal{T} , conoscendo \mathcal{T} conosciamo sia Q che gli ostacoli in Q , $\{b^*(q), q \in Q\}$. Viceversa, Q con la specificazione $\{b^*(q), q \in Q\}$ determina \mathcal{T} e \mathcal{T} è il cilindro di base Q e specificazione $\{b^*(q), q \in Q\}$, secondo la terminologia del Capitolo 2. Si ha allora, come nella (1.21),

$$\sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}} P^\epsilon(\underline{b}) = \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) \quad (\text{B.5})$$

Se la traiettoria ha n collisioni si ha (usando ora per la prima volta che $\mathcal{T} \in \mathcal{G}$),

$$\left(\frac{\epsilon\rho}{2}\right)^n (1 - \epsilon\rho)^{t-n} \leq \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) \leq \left(\frac{\epsilon\rho}{2}\right)^n \min\{1, (1 - \epsilon\rho)^{t-n-n^2}\} \quad (\text{B.6})$$

Infatti, poiché la traiettoria è in \mathcal{G} , la particella urta con ostacoli sempre diversi, da cui il fattore $(\epsilon\rho/2)^n$. Inoltre ogni segmento rettilineo della traiettoria interseca la traiettoria precedente al più in n siti, quindi il numero di possibili autointersezioni è certamente maggiorato da n^2 , ma comunque non può eccedere t , da cui la stima a destra nella (B.6).

Abbiamo allora, osservando che il numero di configurazioni possibili di velocità è 2^n ,

$$\begin{aligned} |\Gamma^\epsilon(\phi, \tau)| &\leq \sum_{n=0} \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} \sum_{\{v_{i-1} \perp v_i\}} \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) |\phi(\epsilon q_t, v_t)| \\ &\leq \|\phi\| \sum_{n=0} (\rho\epsilon)^n \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} \leq \|\phi\| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\tau\rho)^n}{n!} \end{aligned}$$

esattamente come nel Teorema 1.3.1. Possiamo quindi fare il limite $\epsilon \rightarrow 0$ termine a termine, cosicché $\Gamma(\phi, \tau)$ sarà la somma su n del limite di

$$\Gamma_n^\epsilon = \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} \sum_{\{v_{i-1} \perp v_i\}} \mathbf{1}_{(t_1, \dots, t_n, v_1, \dots, v_n) \in \mathcal{G}} \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) \phi(\epsilon q_t, v_t) \quad (\text{B.7})$$

dove $(t_1, \dots, t_n, v_1, \dots, v_n) \in \mathcal{G}$ ci ricorda che $(n, t_1, \dots, t_n, v_1, \dots, v_n)$ è in corrispondenza con una traiettoria che è in \mathcal{G} .

$$q_t = v_0 t_1 + v_1(t_2 - t_1) + \dots + v_n(t - t_n), \quad v_t = v_n \quad (\text{B.8})$$

Sia

$$K_n^\epsilon = \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} \sum_{\{v_{i-1} \perp v_i\}} \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) \phi(\epsilon q_t, v_t) \quad (\text{B.9})$$

cioè l'espressione (B.7) senza la condizione di appartenenza a \mathcal{G} .

Vogliamo dimostrare che K_n^ϵ e Γ_n^ϵ hanno lo stesso limite per $\epsilon \rightarrow 0$. Sia i l'indice del primo tempo in cui la condizione di essere in \mathcal{G} è violata, cioè quando avviene un urto dopo il quale la particella si muove su una retta di cui una parte era stata già percorsa. Fissati t_1, \dots, t_{i-1} vi saranno non più di n valori di t_i per cui ciò accade, quindi l'insieme dei t_1, \dots, t_n per cui la condizione è violata all'iesimo tempo per la prima volta ha cardinalità al più $t^{n-1}n$. Se ne conclude che per ogni (v_1, \dots, v_n) , $v_{i-1} \perp v_i$, si ha

$$\sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} \mathbf{1}_{(t_1, \dots, t_n, v_1, \dots, v_n) \notin \mathcal{G}} \leq t^{n-1}n^2 \quad (\text{B.10})$$

e quindi che

$$|K_n^\epsilon - \Gamma_n^\epsilon| \leq (\rho\epsilon)^n n^2 t^{n-1} \leq \epsilon \rho^n n^2 \tau^{n-1} \quad (\text{B.11})$$

D'altra parte la somma in K_n^ϵ è la somma di Riemann dell'integrale nella (B.2), in completa analogia con quanto visto nella dimostrazione del Teorema 1.3.1 e così si conclude che K_n^ϵ e quindi Γ_n^ϵ convergono al termine ennesimo della (B.2). Il Teorema B.1.1 è dimostrato. \square

Procedendo come nel Capitolo 3, si può derivare l'equazione limite nel caso in cui la distribuzione dei due tipi di ostacoli sia simmetrica, $p = 1/2$. Ometto i dettagli e riporto solo il risultato:

$$\frac{\partial F_\tau(r, v)}{\partial \tau} + v \nabla_r F_\tau(r, v) = \frac{\rho}{2} [F_\tau(r, v^\perp) - F_\tau(r, v)] + \frac{\rho}{2} [F_\tau(r, -v^\perp) - F_\tau(r, v)] \quad (\text{B.12})$$

La soluzione di questa equazione è:

$$F_\tau(r, v) = e^{-\rho\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{v_{i-1} \perp v_i\}} \left[\frac{\rho}{2}\right]^n \int_0^\tau d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 F_0\left(r - v_0\tau_1 - \cdots \right. \\ \left. \cdots - v_n(\tau - \tau_n), v_0\right) \mathbf{1}_{v_n=v} \quad (\text{B.13})$$

Anche l'evoluzione (B.12) è dissipativa, l'entropia è ancora data dalla (4.1) ed è una funzione crescente. La produzione di entropia è

$$I(f) = \frac{\rho}{2} \sum_{v \in \mathcal{V}} \int dr \frac{1}{2} \left\{ [f(r, v) - f(r, v^\perp)] \log \frac{f(r, v)}{f(r, v^\perp)} \right. \\ \left. + [f(r, v) - f(r, -v^\perp)] \log \frac{f(r, v)}{f(r, -v^\perp)} \right\} \\ \geq \rho \sum_v \int dr \left\{ \left(\sqrt{f(r, v^\perp)} - \sqrt{f(r, v)} \right)^2 + \left(\sqrt{f(r, -v^\perp)} - \sqrt{f(r, v)} \right)^2 \right\}$$

Il fattore ρ nell'ultima disuguaglianza invece del fattore 2ρ nella (4.4) è dovuto al fatto che nella (B.12) appare $\rho/2$ invece di ρ .

B.2. Limite macroscopico per la densità di particelle

In questa sezione studieremo il vero e proprio gas di Lorentz (discretizzato) e non solo il moto di una sua particella. Per semplificare la trattazione ritorno al caso di ostacoli solo di tipo 1, ma usando le tecniche della Sezione B.1 non è difficile estendere i risultati al caso generale.

Ricordiamo dal Capitolo 1 che l'ipotesi fondamentale sul gas di Lorentz è che non vi sia interazione tra particelle, che quindi supporremo interagire solo con gli ostacoli. Sebbene

non interagenti, le particelle esercitano un'influenza l'un l'altra. Infatti, poiché vedono la stessa configurazione di ostacoli, dal moto di una particella determiniamo la configurazione degli ostacoli sulla sua traiettoria e, conseguentemente, il moto delle altre particelle ne risulta influenzato. Si hanno quindi correlazioni non banali tra le traiettorie delle particelle e tutto il problema consisterà nel dimostrare che tali correlazioni divengono trascurabili nel limite macroscopico, $\epsilon \rightarrow 0$.

Il numero di particelle del gas $N = N_\epsilon$ dipenderà dal parametro di scala ϵ , ma nelle considerazioni di questa sezione la dipendenza può essere abbastanza arbitraria, l'unica richiesta è che $N_\epsilon \rightarrow \infty$ quando $\epsilon \rightarrow 0$. Chiamiamo $(q^{(i)}, v^{(i)})$ lo stato della i -esima particella mentre $(\underline{q}, \underline{v})$ è lo stato delle N_ϵ particelle. Si considera allora uno spazio i cui elementi, $(\underline{b}, \underline{q}, \underline{v})$, descrivono le configurazioni degli ostacoli e delle particelle. La probabilità in questo spazio è

$$\mathbb{P}^\epsilon(\underline{b}, \underline{q}, \underline{v}) = P^\epsilon(\underline{b}) \prod_{i=1}^{N_\epsilon} Q^\epsilon(q^{(i)}, v^{(i)}) \quad (\text{B.14})$$

con Q^ϵ definito nella (3.7) e P^ϵ nella (1.8) con $p = 1$. Occorre sottolineare che nell'assumere la (B.14) abbiamo fatto l'ipotesi di "caos iniziale", rafforzando quella della Sezione 3.1, in quanto si richiede l'indipendenza non solo tra particelle e ostacoli, ma anche delle particelle tra loro.

Introduciamo ora il campo di densità

$$Y_0^\epsilon(\phi) = \sum_{q,v} \sum_{i=1}^{N_\epsilon} \phi(\epsilon q^{(i)}, v^{(i)}) \quad (\text{B.15})$$

Tale espressione può riscriversi come

$$Y_0^\epsilon(\phi) = \epsilon^2 \sum_{q,v} \phi(\epsilon q, v) \left(\epsilon^{-2} \sum_{i=1}^{N_\epsilon} \mathbf{1}_{(q^{(i)}, v^{(i)})=(q,v)} \right) \quad (\text{B.16})$$

Il termine che moltiplica ϕ è la densità di particelle nel sito $q \in \mathbb{Z}^2$ con velocità v , in quanto ϵ^2 è il volume della cella unitaria in unità macroscopiche. La somma su q moltiplicata per ϵ^2 è un'approssimazione discreta dell'integrale quindi $Y_0^\epsilon(\phi)$ ha il significato dell'integrale della densità di particelle mediato sulla funzione test ϕ . In sistemi realistici la densità di particelle per unità di volume macroscopico è un numero grande e conviene normalizzarlo, per esempio contando grammo-molecole o, invece che il numero di particelle, considerando la massa per unità di volume. Per semplicità noi studieremo la variabile

$$X_\tau^\epsilon(\phi) = \frac{1}{N_\epsilon} \sum_{i=1}^{N_\epsilon} \phi(\epsilon q_t^{(i)}, v_t^{(i)}), \quad t = [\epsilon^{-1} \tau] \quad (\text{B.17})$$

Per linearità

$$\mathbb{E}^\epsilon(X_\tau^\epsilon(\phi)) = \mathcal{E}^\epsilon(\phi(\epsilon q_t^{(1)}, v_t^{(1)})) \quad (\text{B.18})$$

dove l'ultima aspettazione è come nella (3.12).

Quindi $\mathbb{E}^\epsilon(X_\tau^\epsilon(\phi))$ converge all'espressione (3.13), qualunque sia il modo in cui scegliamo N in funzione di ϵ .

Il punto chiave di questa sezione è il teorema seguente in cui si vedrà che se ϵ è piccolo e N_ϵ è grande, allora con grande probabilità $X_\tau^\epsilon(\phi)$ è vicino alla sua media e quindi all'espressione (3.13). Si comporta perciò (con gran probabilità, e non solo in media) come predetto dall'equazione macroscopica del gas di Lorentz, (3.21).

Teorema B.2.1. *Se $N_\epsilon \rightarrow \infty$ quando $\epsilon \rightarrow 0$, allora per ogni funzione regolare e limitata $\phi(r, v)$, per ogni $\tau > 0$ e per ogni $\delta > 0$,*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{P}^\epsilon (|X_\tau^\epsilon(\phi) - \mathbb{E}^\epsilon(X_\tau^\epsilon(\phi))| > \delta) = 0 \quad (\text{B.19})$$

Dimostrazione.

Chiamiamo

$$\Gamma^\epsilon(\phi, \tau) := \mathbb{E}^\epsilon(X_\tau^\epsilon(\phi)) \quad (\text{B.20})$$

Usando la disuguaglianza di Chebishev, Teorema 2.1.2,

$$\mathbb{P}^\epsilon (|X_\tau^\epsilon(\phi) - \Gamma^\epsilon(\phi, \tau)| > \delta) \leq \delta^{-2} \mathbb{E}^\epsilon ([X_\tau^\epsilon(\phi) - \Gamma^\epsilon(\phi, \tau)]^2) \quad (\text{B.21})$$

Sviluppando il quadrato e ricordando la (B.20):

$$\mathbb{E}^\epsilon ([X_\tau^\epsilon(\phi) - \Gamma^\epsilon(\phi, \tau)]^2) = \mathbb{E}^\epsilon (X_\tau^\epsilon(\phi)^2) - \Gamma^\epsilon(\phi, \tau)^2 \quad (\text{B.22})$$

Ricordando la (B.18) e il Teorema 3.1.1, $\Gamma^\epsilon(\phi, \tau) \rightarrow \Gamma(\phi, \tau)$ con $\Gamma(\phi, \tau)$ dato dalla (3.13). Il Teorema B.2.1 sarà quindi dimostrato se verifichiamo che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}^\epsilon (X_\tau^\epsilon(\phi)^2) = \Gamma(\phi, \tau)^2 \quad (\text{B.23})$$

Si ha

$$X_\tau^\epsilon(\phi)^2 = \frac{1}{N_\epsilon^2} \sum_{i=1}^{N_\epsilon} \phi(\epsilon q_t^{(i)}, v_t^{(i)})^2 + \frac{1}{N_\epsilon^2} \sum_{i \neq j} \phi(\epsilon q_t^{(i)}, v_t^{(i)}) \phi(\epsilon q_t^{(j)}, v_t^{(j)}) \quad (\text{B.24})$$

Poiché ϕ è una funzione limitata e $N_\epsilon \rightarrow \infty$ per $\epsilon \rightarrow 0$, il primo termine si annulla. Il secondo contiene $N_\epsilon^2 - N_\epsilon$ termini, quindi, chiamando

$$A^\epsilon = \mathbb{E}^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_t^{(1)}, v_t^{(1)}) \phi(\epsilon q_t^{(2)}, v_t^{(2)}) \right) \quad (\text{B.25})$$

la (B.23) è conseguenza di

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} A^\epsilon = \Gamma(\phi, \tau)^2 \quad (\text{B.26})$$

Esplicitando la aspettazione nella (B.25) e chiamando $\phi_\epsilon(q, v) = \phi(\epsilon q, v)$,

$$A^\epsilon = \sum_{q^{(1)}, v^{(1)}} \sum_{q^{(2)}, v^{(2)}} \sum_{\underline{b}} Q^\epsilon(q^{(1)}, v^{(1)}) Q^\epsilon(q^{(2)}, v^{(2)}) P^\epsilon(\underline{b}) \phi_\epsilon(T_t(\underline{b}, q^{(1)}, v^{(1)})) \phi_\epsilon(T_t(\underline{b}, q^{(2)}, v^{(2)}))$$

Chiamando $\mathcal{T}^{(1)} = (q_s^{(1)}, v_s^{(1)})_{0 \leq s \leq t}$ e $\mathcal{T}^{(2)} = (q_s^{(2)}, v_s^{(2)})_{0 \leq s \leq t}$ le traiettorie delle due particelle, individuate, al solito, con i parametri $(n^{(1)}, t_1^{(1)}, \dots, t_{n^{(1)}}^{(1)})$ e $(n^{(2)}, t_1^{(2)}, \dots, t_{n^{(2)}}^{(2)})$, abbiamo

$$A^\epsilon = \sum_{q^{(1)}, v^{(1)}} \sum_{q^{(2)}, v^{(2)}} Q^\epsilon(q^{(1)}, v^{(1)}) Q^\epsilon(q^{(2)}, v^{(2)}) \sum_{\mathcal{T}^{(1)}, \mathcal{T}^{(2)}} \phi(\epsilon q_t^{(1)}, v_t^{(1)}) \phi(\epsilon q_t^{(2)}, v_t^{(2)}) \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}^{(1)}, \mathcal{T}^{(2)}} P^\epsilon(\underline{b})$$

Adesso la dimostrazione segue quella del Teorema B.1.1. Introduciamo infatti la nozione di traiettorie buone: \mathcal{G} indica l'insieme delle traiettorie $(\mathcal{T}^{(1)}, \mathcal{T}^{(2)})$ tali che i tratti orizzontali della prima non appartengano alle rette cui appartengono quelli della seconda e altrettanto per i tratti verticali. Chiamiamo B^ϵ l'espressione che si ottiene da A^ϵ quando si limita la somma alle sole traiettorie in \mathcal{G} :

$$B^\epsilon = \sum_{q^{(1)}, v^{(1)}} \sum_{q^{(2)}, v^{(2)}} Q^\epsilon(q^{(1)}, v^{(1)}) Q^\epsilon(q^{(2)}, v^{(2)}) \sum_{(\mathcal{T}^{(1)}, \mathcal{T}^{(2)}) \in \mathcal{G}} \phi(\epsilon q_t^{(1)}, v_t^{(1)}) \phi(\epsilon q_t^{(2)}, v_t^{(2)}) \sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}^{(1)}, \mathcal{T}^{(2)}} P^\epsilon(\underline{b}) \quad (\text{B.27})$$

Basterà dimostrare che per ogni ϕ e τ ,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} B^\epsilon = \Gamma(\phi, \tau)^2 \quad (\text{B.28})$$

L'argomento (per cui basta la (B.28)) è simile a quello usato sotto la (B.4) ed è omissis.

Dati $\mathcal{T}^{(1)}$ e $\mathcal{T}^{(2)}$, sia Q l'unione di $q_s^{(1)}$, $0 \leq s \leq t-1$, e di $q_s^{(2)}$, $0 \leq s \leq t-1$; sia inoltre $b^*(q)$, $q \in Q$, la configurazione di ostacoli in Q , determinata da $\mathcal{T}^{(1)}$ e $\mathcal{T}^{(2)}$. Si ha

$$\sum_{\underline{b} \Rightarrow \mathcal{T}^{(1)}, \mathcal{T}^{(2)}} P^\epsilon(\underline{b}) = \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q))$$

Se $(\mathcal{T}^{(1)}, \mathcal{T}^{(2)}) \in \mathcal{G}$, e $n^{(i)}$, $i = 1, 2$, il numero di urti nelle due traiettorie, allora il numero di ostacoli in Q è $n = n^{(1)} + n^{(2)}$ e il numero di siti che appartengono ad entrambe le traiettorie non è maggiore di $n^{(1)}n^{(2)} \leq n^2$ e, ovviamente, minore di t . Si ha, con queste notazioni, esattamente l'analogo della (B.6):

$$(\epsilon\rho)^n (1 - \epsilon\rho)^{t-n} \leq \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) \leq (\epsilon\rho)^n \min\{1, (1 - \epsilon\rho)^{t-n-n^2}\} \quad (\text{B.29})$$

Dalla (B.27), otteniamo, con argomenti oramai usuali,

$$|B^\epsilon| \leq \|\phi\|^2 \sum_{n^{(1)}, n^{(2)}} \left\{ \sum_{q^{(1)}, v^{(1)}} \sum_{q^{(2)}, v^{(2)}} Q^\epsilon(q^{(1)}, v^{(1)}) Q^\epsilon(q^{(2)}, v^{(2)}) \right\} \frac{(\epsilon\rho t)^{n^{(1)}+n^{(2)}}}{n^{(1)}!n^{(2)}!} \quad (\text{B.30})$$

Le somme su $q^{(i)}, v^{(i)}$ è uguale a 1, e la somma su $n^{(1)}, n^{(2)}$ uniformemente convergente, quindi possiamo fare il limite per $\epsilon \rightarrow 0$ termine a termine, tenendo fissi cioè $n^{(1)}$ e $n^{(2)}$.

In analogia con la (B.7) definiamo

$$\Gamma_{n^{(1)}, n^{(2)}}^\epsilon = \sum_{q^{(1)}, v^{(1)}} \sum_{q^{(2)}, v^{(2)}} Q^\epsilon(q^{(1)}, v^{(1)}) Q^\epsilon(q^{(2)}, v^{(2)}) \sum_{0 \leq t_1^{(1)} < \dots < t_{n^{(1)}}^{(1)} < t} \sum_{0 \leq t_1^{(2)} < \dots < t_{n^{(2)}}^{(2)} < t} \mathbf{1}_{(t_1^{(1)}, \dots, t_{n^{(2)}}^{(2)}) \in \mathcal{G}} \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) \phi(\epsilon q_t^{(1)}, v_t^{(1)}) \phi(\epsilon q_t^{(2)}, v_t^{(2)}) \quad (\text{B.31})$$

dove $(t_1^{(1)}, \dots, t_{n^{(2)}}^{(2)}) \in \mathcal{G}$ ci ricorda che le traiettorie $\mathcal{T}^{(i)}$ con i dati parametri devono essere in \mathcal{G} . Definiamo poi

$$K_{n^{(1)}, n^{(2)}}^\epsilon = \sum_{q^{(1)}, v^{(1)}} \sum_{q^{(2)}, v^{(2)}} Q^\epsilon(q^{(1)}, v^{(1)}) Q^\epsilon(q^{(2)}, v^{(2)}) \sum_{0 \leq t_1^{(1)} < \dots < t_{n^{(1)}}^{(1)} < t} \sum_{0 \leq t_1^{(2)} < \dots < t_{n^{(2)}}^{(2)} < t} \prod_{q \in Q} \pi^\epsilon(b^*(q)) \phi(\epsilon q_t^{(1)}, v_t^{(1)}) \phi(\epsilon q_t^{(2)}, v_t^{(2)}) \quad (\text{B.32})$$

cioè l'espressione (B.31) senza la condizione di appartenenza a \mathcal{G} . Usando la (B.29) possiamo sostituire nelle (B.31) e (B.32) al prodotto $\pi^\epsilon(b^*(q))$ su $q \in Q$ il valore $(\epsilon\rho)^n (1-\epsilon\rho)^{t-n}$, $n = n^{(1)} + n^{(2)}$. Al solito si riconosce in $K_{n^{(1)}, n^{(2)}}^\epsilon$ una struttura di somme di Riemann che poi, sommate su $n^{(1)}$ e $n^{(2)}$, riproducono $\Gamma(\phi, \tau)^2$. Per dimostrare la (B.28) basterà perciò dimostrare che $|\Gamma_{n^{(1)}, n^{(2)}}^\epsilon - K_{n^{(1)}, n^{(2)}}^\epsilon|$ si annulla quando $\epsilon \rightarrow 0$. A tal scopo fissiamo tutto della particella 1 e vediamo che restrizioni sono imposte alla 2 affinché le due traiettorie siano in \mathcal{G} . La prima restrizione è su $q^{(2)}$ che non deve appartenere a nessuna delle rette cui appartengono i segmenti della traiettoria 1. $\epsilon q^{(2)}$ deve appartenere ad un insieme limitato, in base all'ipotesi che il supporto spaziale di $F_0(r, v)$ sia compatto. Chiamando R il diametro di tale insieme, se ne deduce che il numero di siti proibiti a $q^{(2)}$ è maggiorato da $n^{(1)}\epsilon^{-1}R$. Poiché la probabilità di essere in un sito è maggiorata da $C\epsilon^2$ la probabilità che $q^{(2)}$ sia in un sito sbagliato è maggiorata da una costante per ϵ e si annulla nel limite. Analogamente, si veda anche l'argomento conclusivo della dimostrazione del Teorema B.1.1, l'insieme di tempi $(t_i^{(2)})$ che sono proibiti ha cardinalità $c_n t^{n-1}$, $n \equiv n^{(2)}$, e quindi la differenza $|\Gamma_{n^{(1)}, n^{(2)}}^\epsilon - K_{n^{(1)}, n^{(2)}}^\epsilon|$ si annulla quando $\epsilon \rightarrow 0$. Il teorema B.2.1 è dimostrato. \square

B.3. Paradossi

Formuleremo qui il paradosso sulla reversibilità-irreversibilità per una sola particella (e un solo tipo di ostacoli). Nel Capitolo 4, invece, avevamo discusso il caso del gas di Lorentz in cui si evitavano le probabilità, essendo $F_\tau(r, v)$ una densità di particelle. Ora $F_\tau(r, v)$ è una densità di probabilità e si potrebbe pensare che, essendo già in un contesto probabilistico, non vi sia più paradosso. Vedremo invece che esso può essere convenientemente riformulato anche in questo contesto.

Userò le stesse ipotesi e notazioni del Capitolo 3. $Q^\epsilon(q, v)$ è definita dalla (3.7) (è la probabilità che lo stato iniziale sia (q, v)), $\mathcal{P}^\epsilon(\underline{b}, q, v)$ è definita nella (3.11) e \mathcal{E}^ϵ ne indica l'aspettazione.

$(q_t, v_t) = T_t(\underline{b}, q, v)$ è lo stato al tempo t , $(q_0, v_0) = (q, v)$, \underline{b} la configurazione di ostacoli. T_{-t} è l'inversa di T_t e vale la (3.18) in cui \hat{T}_t è il flusso temporale (in avanti nel tempo) con la convenzione che agli istanti d'urto la velocità sia quella uscente.

Indicando con $\phi_\epsilon(q, v) = \phi(\epsilon q, v)$, $\epsilon > 0$, e con t la parte intera di $\epsilon^{-1}\tau$, si ha, come dimostrato nel Teorema 3.1.1, che per ogni τ e per ogni funzione test ϕ ,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi_\epsilon(q, v) \right) = \sum_v \int dr F_0(r, v) \phi(r, v) \quad (\text{B.33})$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi_\epsilon(T_t(\underline{b}, q, v)) \right) = \sum_v \int dr F_\tau(r, v) \phi(r, v) \quad (\text{B.34})$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi_\epsilon(T_{2t}(\underline{b}, q, v)) \right) = \sum_v \int dr F_{2\tau}(r, v) \phi(r, v) \quad (\text{B.35})$$

Poiché

$$T_{2t}(\underline{b}, q, v) = T_t(\underline{b}, T_t(\underline{b}, q, v)) \quad (\text{B.36})$$

possiamo interpretare la (B.35) anche come limite macroscopico al tempo τ , per un dato al tempo 0 il cui limite macroscopico è definito dalla (B.34). Ma allora $F_{2\tau}$ deve essere la soluzione al tempo τ della (3.21), con dato iniziale F_τ . Bene, questo è proprio ciò che accade!

Indichiamo ora con $R(q, v) = (q, -v)$ l'operatore di inversione delle velocità e osserviamo che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi_\epsilon(R(q, v)) \right) = \sum_v \int dr F_0(r, -v) \phi(r, v) \quad (\text{B.37})$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi_\epsilon(RT_t(\underline{b}, q, v)) \right) = \sum_v \int dr F_\tau(r, -v) \phi(r, v) \quad (\text{B.38})$$

La (B.37) è infatti evidentemente vera, la (B.38) richiede una dimostrazione che è tuttavia semplice ed è omessa.

Per la (3.18) si ha $(q, v) = T_{-t}(\underline{b}, T_t(\underline{b}, q, v))$ e quindi

$$R(q, v) = \hat{T}_t(\underline{b}, RT_t(\underline{b}, q, v)) \quad (\text{B.39})$$

Ma allora possiamo leggere la (B.37) come

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi_\epsilon(\hat{T}_t(\underline{b}, RT_t(\underline{b}, q, v))) \right) = \sum_v \int dr F_0(r, -v) \phi(r, v) \quad (\text{B.40})$$

che confrontata con la (B.38) ci dice che $F_0(r, -v)$ è la soluzione al tempo τ della (3.21) con dato iniziale $F_\tau(r, -v)$. Ciò non è in generale vero! come dimostrato nella (4.9).

Siamo dunque arrivati ad un paradosso. Nel nostro caso sarà facile dirimerlo, ma il lettore deve immaginarlo in un altro contesto quando non si disponeva di vere o complete dimostrazioni e si procedeva, almeno parzialmente, per congetture. Non è quindi sorprendente che esso abbia avuto enorme impatto sino al punto di indurre alla conclusione che l'assurdo potrebbe nascere proprio dal supporre la convergenza ad una equazione irreversibile quando la dinamica di partenza è reversibile.

Nel presentare il paradosso abbiamo chiaramente ingannato il lettore, pretendendo in più occasioni che l'unica ipotesi nel Teorema 3.1.1 fosse la convergenza al tempo 0 delle aspettative (B.33). In realtà abbiamo dimostrato il teorema sotto l'ipotesi molto più restrittiva che la misura iniziale fosse prodotto. Ma tale ipotesi non è in realtà veramente necessaria e può essere rilassata, può bastare infatti che la misura $Q^\epsilon(q, v)$ sia tale che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}^\epsilon \left(\phi(\epsilon q_0, v_0) \right) = \sum_v \int dr \phi(r, v) f_0(r, v), \quad \text{per ogni funzione test } \phi \quad (\text{B.41})$$

Non è quindi qui che deve essere cercato l'errore nel paradosso, che invece nasce dalla non validità dell'altra ipotesi, questa veramente essenziale, usata nella dimostrazione del Teorema 3.1.1, l'ipotesi cioè che *la configurazione degli ostacoli è indipendente dalla distribuzione del dato iniziale*. Ciò non accade se prendiamo per dato iniziale $(q_t, v_t) = T_t(\underline{b}, q, v)$, in quanto (q_t, v_t) dipende, tramite l'evoluzione, da \underline{b} e quindi ci è una forte correlazione tra stato della particella e configurazione di ostacoli. Esiste quindi una correlazione e non possiamo applicare il teorema 3.1.1, ma rimane comunque il dubbio del perché il risultato sia comunque corretto se andiamo in avanti nel tempo e non più se torniamo indietro. Il motivo è evidente nel caso in cui vi sia una particella con un solo tipo di ostacoli. Infatti quelli incontrati nel passato non saranno mai più incontrati nel futuro, mentre se si inverte la velocità, il moto ripercorre la stessa traiettoria all'indietro, incontrando quindi esattamente gli stessi ostacoli! Questo spiega perché la correlazione esistente al tempo t tra particella ed ostacoli sia irrilevante per il futuro e determinante per l'andare nel passato.

Nel caso di molte particelle, gas di Lorentz, o anche di una singola particella ma con due tipi di ostacoli, non è più vero che gli ostacoli del passato non sono incontrati nel futuro. Non è più evidente, perciò, che il moto nell'intervallo $[\tau, 2\tau]$ sia ancora descritto dall'equazione (3.21) usata nell'intervallo $[0, \tau]$. Il motivo per cui ciò in realtà accada è in generale molto più sottile e per certi versi non veramente chiarito, ma risulta abbastanza evidente nel caso semplice che stiamo trattando. Si invita quindi il lettore a rileggere le dimostrazioni delle Sezioni B.1 e B.2 in quest'ottica.

Sgombrato il campo dagli equivoci che il paradosso può aver generato, rimane da discutere il risultato comunque paradossale di un'evoluzione limite irreversibile mentre quella prima del limite è reversibile. Il problema è di capire dove e come tale transizione sia avvenuta. La perdita di reversibilità e la conseguente crescita di entropia sono facilmente riconoscibili nel sistema meccanico: ad ogni step temporale lo stato della particella si randomizza, in quanto la particella ha orbite diverse dipendentemente dalla configurazione di ostacoli \underline{b} . Anche se inizialmente lo stato della particella è certo, già a $t = 1$ potrà avere più valori e quindi la sua entropia sarà aumentata. Allo stesso tempo però si è specificata un

po' la configurazione di ostacoli, là dove la particella è passata. Se guardiamo sia la particella che gli ostacoli, vedremo l'entropia della particella aumentare e quella degli ostacoli diminuire e complessivamente l'entropia totale rimanere costante, non preciserò meglio questa affermazione, di cui tuttavia si può dare una formulazione rigorosa. In generale però non è possibile separare l'evoluzione dello stato della particella dalla specificazione della configurazione di ostacoli che nel moto si viene determinando, poiché questa potrà avere influenza sulle collisioni successive. Quindi la "riduzione delle variabili" (a quelle che descrivono lo stato della particella) fa crescere l'entropia, ma la dinamica ridotta non è in generale autonoma. Per avere equazioni chiuse occorre in generale specificare lo stato interamente, e, per il sistema totale, l'entropia rimane costante.

L'irreversibilità quindi nasce nel momento in cui si stabilisce (come abbiamo fatto) che il moto della particella nel futuro dipende dal suo stato nel presente e non dalla sua traiettoria passata. In tal caso possiamo dimenticare l'informazione acquisita sulla configurazione di ostacoli, perché non rilevante nel moto futuro della particella, e avremo una crescita di entropia in accordo con l'equazione limite che è dissipativa.

B.4. Equilibrio, equilibrio locale e limiti idrodinamici

L'equazione (3.21) valida quando vi sono solo ostacoli di tipo 1 o la (B.12) quando vi sono (con uguale probabilità) anche ostacoli di tipo 2, descrivono il comportamento del gas di Lorentz in quella che abbiamo chiamato la "scala macroscopica". Tale scala è determinata dal cammino libero medio di una particella del gas e dal tempo medio tra urti, entrambi proporzionali a ϵ^{-1} . In questo regime ciascuna particella ha un numero finito di urti in intervalli finiti di tempo: le traiettorie sono segmenti rettilinei mutuamente ortogonali le cui lunghezze sono aleatorie. Questa è una fase transitoria dell'evoluzione in cui il gas ha ancora "ricordo del suo stato iniziale" ed è detta cinetica. Le (3.21) e (B.12) che la descrivono sono equazioni cinetiche, in particolare sono equazioni lineari di Boltzmann con velocità discrete. La cinetica è una prima scala macroscopica in cui si osserva il gas, ne esistono altre e qui ne considereremo due. Una studia il limite per $t \rightarrow \infty$ ed è di particolare interesse per la Meccanica Statistica in quanto gli stati limite quando $t \rightarrow \infty$ sono gli stati di equilibrio del sistema e ne determinano la termodinamica. Considereremo anche il modo in cui l'equilibrio viene raggiunto studiando il comportamento idrodinamico del sistema.

L'analisi può svilupparsi su due livelli, studiando direttamente il gas di Lorentz oppure, più semplicemente e come faremo qui, le equazioni cinetiche. Uno stato di equilibrio per la (3.21) è una funzione $f(r, v)$ tale che

$$v \cdot \nabla f(r, v) = \rho (f(r, v^\perp) - f(r, v)) \quad (\text{B.42})$$

Infatti la funzione $f_t(r, v) = f(r, v)$ per ogni t è soluzione della (3.21). In uno stato di equilibrio la produzione di entropia $I(f) = 0$, in quanto $I(f_t) = dS(f_t)/dt$ e $f_t \equiv f$.

Quindi, per ogni r ,

$$f(r, e_1) = f(r, e_2), \quad f(r, e_3) = f(r, e_4) \quad (\text{B.43})$$

Chiamando $r = (x, y)$ e usando la (B.42),

$$\frac{\partial f(r, e_1)}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial f(r, e_2)}{\partial y} = 0 \quad (\text{B.44})$$

Poiché $f(r, e_1) = f(r, e_2)$ si ha

$$\nabla f(r, e_1) = 0, \quad f(r, e_1) = f(r, e_2) = \frac{D_1}{2} \quad (\text{B.45})$$

Analogamente

$$f(r, e_3) = f(r, e_4) = \frac{D_3}{2} \quad (\text{B.46})$$

D_1 è la densità di particelle che hanno velocità e_1 o e_2 mentre D_3 di quelle con velocità e_3 o e_4 . Le densità di particelle con velocità e_1 ed e_2 sono uguali tra loro così come quelle con velocità e_3 ed e_4 .

Un analogo argomento mostra che nel caso della (B.12) all'equilibrio $f(r, v) = D/4$, D è la densità di particelle, che in equilibrio non dipende né da r né da v .

In conclusione l'equilibrio è caratterizzato da due densità D_1 e D_3 , nel caso della (3.21), e da una sola densità D , nel caso della (B.12).

Passiamo ora al comportamento idrodinamico delle evoluzioni governate dalle (3.21) e (B.12). In generale il regime idrodinamico è caratterizzato dallo stabilirsi di un equilibrio locale, cioè il sistema se osservato localmente, appare in equilibrio, ma i parametri che descrivono l'equilibrio variano sia nello spazio che nel tempo. Il regime idrodinamico emerge quando si osserva il sistema in una appropriata scala spazio temporale. Iniziamo l'analisi dalla (3.21), introducendo il parametro di scala $\lambda > 0$; λ gioca un ruolo analogo a quello che aveva ϵ nel definire il regime cinetico. Supponiamo dunque che il dato iniziale per la (3.21) dipenda da λ e abbia la forma

$$f_{0,\lambda}(r, v) = f_0(\lambda r, v) \quad (\text{B.47})$$

dove f_0 è una funzione non negativa, regolare e limitata, che non dipende da λ . Chiamando $f_{t,\lambda}$ la soluzione della (3.21) con dato iniziale $f_{0,\lambda}$, definiamo

$$f_t^{(\lambda)}(r, v) = f_{\lambda^{-1}t, \lambda}(\lambda^{-1}r, v) \quad (\text{B.48})$$

Nella (B.48) t e r sono tempo e spazio in unità idrodinamiche, le stesse quantità in unità cinetiche sono $\lambda^{-1}t$ e $\lambda^{-1}r$. Si osservi l'analogia con il limite cinetico studiato nel Capitolo 1, identico per quanto riguarda lo scaling spazio-temporale. La differenza essenziale che distingue l'attuale dal limite cinetico, è che in quest'ultimo si variava, al variare di ϵ , anche la densità degli ostacoli. Nel contesto attuale ciò corrisponderebbe a sostituire $\lambda\rho$ a ρ nella (3.21). $f_t^{(\lambda)}$ soddisfa ad un'equazione apparentemente simile alla (3.21):

$$\frac{\partial f_t^{(\lambda)}(r, v)}{\partial t} + v \cdot \nabla f_t^{(\lambda)}(r, v) = \lambda^{-1}\rho \left(f_t^{(\lambda)}(r, v^\perp) - f_t^{(\lambda)}(r, v) \right) \quad (\text{B.49})$$

da cui differisce per il fattore λ^{-1} . La differenza non è marginale in quanto vogliamo studiare il comportamento proprio per $\lambda \rightarrow 0$. Osserviamo anche che se nella (3.21) avessimo avuto $\lambda\rho$ invece di ρ , allora la (B.49) avrebbe ρ senza il pericoloso fattore λ^{-1} . Infatti la (3.21) è invariante per scaling cinetico:

$$r \rightarrow \lambda^{-1}r, \quad t \rightarrow \lambda^{-1}t, \quad \rho \rightarrow \lambda\rho$$

Torniamo ora alla (B.49) e sommiamo le equazioni con $v = e_1, e_2$. Si ha, chiamando

$$D_{t,1}^{(\lambda)}(r) = f_t^{(\lambda)}(r, e_1) + f_t^{(\lambda)}(r, e_2), \quad D_{t,3}^{(\lambda)}(r) = f_t^{(\lambda)}(r, e_3) + f_t^{(\lambda)}(r, e_4) \quad (\text{B.50})$$

$$\frac{\partial D_{t,1}^{(\lambda)}(r)}{\partial t} + \frac{\partial f_t^{(\lambda)}(r, e_1)}{\partial x} + \frac{\partial f_t^{(\lambda)}(r, e_2)}{\partial y} = 0 \quad (\text{B.51})$$

Un'equazione analoga vale per $D_{t,3}^{(\lambda)}$. Il fatto significativo della (B.51) è che è scomparso il fattore pericoloso λ^{-1} , ma il vantaggio è solo apparente in quanto la (B.51) non è un'equazione chiusa in $D_{t,1}^{(\lambda)}$, poiché la sua derivata temporale dipende dalle $f_t^{(\lambda)}(r, e_i)$ nella cui evoluzione riappare il termine λ^{-1} .

A questo punto interviene l'equilibrio locale, che qui presento come un'ipotesi, ma che nel contesto presente e con opportune ipotesi sul dato iniziale si può effettivamente dimostrare. L'ipotesi di equilibrio locale è che

$$f_t^{(\lambda)}(r, e_1) \approx f_t^{(\lambda)}(r, e_r) \approx \frac{1}{2} D_{t,1}^{(\lambda)}(r) \quad (\text{B.52})$$

dove \approx vuol dire uguaglianza nel limite $\lambda \rightarrow 0$, con sufficiente uniformità in r e t (affinché quanto segue sia corretto). Supponendo dunque che esista il limite $D_{t,1}(r)$ di $D_{t,1}^{(\lambda)}(r)$ e delle sue derivate con sufficienti uniformità, otteniamo dalla (B.51),

$$\frac{\partial D_{t,1}(r)}{\partial t} + \nabla \cdot j_t(r) = 0 \quad (\text{B.53})$$

dove la corrente $j_t(r)$ è

$$j_t(r) = D_{t,1}(r) \frac{1}{2} (1, 1) \quad (\text{B.54})$$

Si osservi che la velocità media per particella in r nello stato $f(r, v)$, $v = e_1, e_2$, è

$$\langle v \rangle = \frac{e_1 f(r, e_1) + e_2 f(r, e_2)}{f(r, e_1) + f(r, e_2)}$$

In uno stato di equilibrio, le due densità sono uguali, quindi

$$\langle v \rangle = \frac{1}{2} (1, 1)$$

La corrente $j_t(r)$ è allora uguale alla densità di particelle in uno stato di equilibrio la cui densità sia uguale a $D_{t,1}(r)$, moltiplicata per la velocità media per particella in equilibrio. La (B.53) è dunque l'usuale legge di conservazione della massa.

La densità limite $D_{t,3}(r)$ obbedisce ad un'equazione analoga. La (B.53) con la sua analoga per $D_{t,3}(r)$ sono le "equazioni di Eulero" per il gas di Lorentz (con ostacoli di tipo

1) e lo scaling spazio temporale usato per derivarle è lo scaling di Eulero. Il procedimento si generalizza alla vera equazione di Boltzmann mediante un'analisi perturbativa nota come il "metodo o espansione di Hilbert".

Consideriamo ora il caso in cui vi sono ostacoli dei due tipi, partendo dall'equazione (B.12). Consideriamo un dato iniziale come nella (B.47) e scaliamo la soluzione come nella (B.48). Invece della (B.49) otteniamo

$$\frac{\partial f_t^{(\lambda)}(r, v)}{\partial t} + v \cdot \nabla f_t^{(\lambda)}(r, v) = \lambda^{-1} \rho \left(\frac{1}{2} f_t^{(\lambda)}(r, v^\perp) + \frac{1}{2} f_t^{(\lambda)}(r, -v^\perp) - f_t^{(\lambda)}(r, v) \right) \quad (\text{B.55})$$

Ricordando che all'equilibrio le densità di particelle con velocità v è indipendente da v , consideriamo, in luogo della (B.50), la densità totale di particelle in r :

$$D_t^{(\lambda)}(r) = \sum_{i=1}^4 f_t^{(\lambda)}(r, e_i) \quad (\text{B.56})$$

Invece della (B.51) si ha

$$\frac{\partial D_t^{(\lambda)}(r)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [f_t^{(\lambda)}(r, e_1) - f_t^{(\lambda)}(r, e_3)] + \frac{\partial}{\partial y} [f_t^{(\lambda)}(r, e_2) - f_t^{(\lambda)}(r, e_4)] = 0 \quad (\text{B.57})$$

L'ipotesi di equilibrio locale, (B.52), diventa ora

$$f_t^{(\lambda)}(r, e_i) \approx \frac{1}{4} D_t^{(\lambda)}(r), \quad i = 1, \dots, 4 \quad (\text{B.58})$$

Facendo il limite per $\lambda \rightarrow 0$ della (B.57) con l'ipotesi di equilibrio locale rafforzata da condizioni di uniforme convergenza, si riottiene la (B.53) ma con $j_t \equiv 0$. Si ottiene quindi il risultato sorprendente che il dato iniziale non cambia, che certamente contrasta con la nostra intuizione fisica. Supponiamo che inizialmente la densità sia concentrata in una regione finita, per esempio il cerchio unitario C . Poiché non vi sono forze esterne (pareti) che lo confinano ci aspetteremmo che dopo qualche tempo almeno parte del gas sia uscita da C .

A ben guardare, il risultato ottenuto non afferma che tutto ciò non sia vero, dice semplicemente che non avviene nella scala temporale considerata. A tempi $\lambda^{-1}t$ tale fenomeni non sono ancora significativi e nel limite $\lambda \rightarrow 0$ non sono affatto presenti. Per evidenziarli occorre allora considerare scale temporali più lunghe, la scelta giusta, in questo caso (e in quelli in cui il fenomeno fisico ha natura diffusiva) è di scalare il tempo come il quadrato della distanza, si definisce perciò

$$f_t^{(\lambda)}(r, v) = f_{\lambda^{-2}t, \lambda}(\lambda^{-1}r, v) \quad (\text{B.59})$$

e $D_t^{(\lambda)}(r)$ come nella (B.56) con però $f_t^{(\lambda)}$ data dalla (B.59). Nel limite $\lambda \rightarrow 0$ si può dimostrare che $D_t^{(\lambda)}(r) \rightarrow D_t(r)$ dove

$$\frac{\partial D_t(r)}{\partial t} = \frac{\rho}{2} \frac{\partial^2 D_t(r)}{\partial r^2} \quad (\text{B.60})$$

La (B.60) è un'equazione di diffusione, $\rho/2$ è “il coefficiente di diffusione”. Le sue soluzioni hanno le proprietà che avevamo congetturato precedentemente. Se per esempio $D_0(r) = D$ per $|r| = 1$ e 0 altrove, la soluzione $D_t(r)$ diventa positiva per $t > 0$ anche fuori di C , ma anche troppo! Infatti $D_t(r)$ diventa positiva ovunque, questa è una caratteristica delle equazioni di diffusione come la (B.60), in cui appunto la velocità di propagazione è infinita, (anche se la densità decade come e^{-cr^2} per r grandi, c dipende da t).

Il paradosso di velocità di propagazione infinita è ovviamente artificiale, è infatti un artefatto del limite $\lambda \rightarrow 0$. Nella (B.12) la velocità di propagazione è unitaria, a tempi $\lambda^{-2}t$ quindi il dato iniziale si è espanso al più di $\lambda^{-2}t$, ma noi misuriamo le distanze in scala λ^{-1} quindi in questa scala, la distanza diventa $\lambda^{-1}t$, che appunto diverge per $\lambda \rightarrow 0$.

Il procedimento che si usa nel derivare la (B.60) è perturbativo, si applica anche a casi più generali ed è noto come l'espansione di Chapman-Enskog. Rimando a testi specializzati per maggiori informazioni su questi temi e sul limite idrodinamico di equazioni cinetiche.

APPENDICE C

L'equazione di Broadwell

L'equazione di Broadwell è un'equazione cinetica, non lineare, con velocità discrete. Il tipico esempio di modello meccanico per l'equazione di Broadwell è costituito da un sistema di quadrati rigidi in \mathbb{R}^2 , uguali, di massa m e lato $\ell > 0$. Le diagonali dei quadrati sono dirette come gli assi coordinati così come le velocità, che si suppongono unitarie. Gli urti sono elastici e di due tipi. Urti con velocità parallele ed opposte (il primo caso in Fig. C.1): le velocità uscenti sono allora perpendicolari a quelle entranti. Urti tra particelle con velocità perpendicolari tra loro (il secondo caso in Fig. C.1, in cui i quadrati sono raffigurati all'istante esatto di collisione): in tal caso le particelle si scambiano la velocità. Invece di questo modello ne considererò una versione discreta anche nelle posizioni, ma i risultati che citerò sono validi anche nel caso continuo.

Come nel gas di Lorentz le particelle sono puntiformi, hanno velocità in \mathcal{V} e si muovono in modo da essere nei siti del reticolo \mathbb{Z}^2 ai tempi interi. Le particelle urtano tra loro con urti del tipo

$$(e_1, e_3) \longleftrightarrow (e_2, e_4) \quad (\text{C.1})$$

Conviene identificare la particella con velocità e_1 prima dell'urto con quella che dopo l'urto ha velocità e_2 , e viceversa. Poiché le particelle sono identiche, la fisica non cambia usando questa o altre convenzioni.

Definiamo l'evoluzione nell'intervallo temporale $[t, t+1]$, con t intero, poi, per iterazione, risulterà definita a tutti i tempi. La prima operazione per passare da t a $t+1$ consiste nel far avvenire le collisioni nei siti in cui vi sono particelle con velocità opposte, (in accordo alla convenzione usata anche nel gas di Lorentz di attribuire ad una particella ad un istante d'urto la sua velocità entrante). Se in un dato sito vi sono n coppie di particelle con velocità (e_1, e_3) e m coppie con velocità (e_2, e_4) , si applica la (C.1) per ciascuna coppia.¹ Dopo aver eseguito questa operazione in tutti i siti di \mathbb{Z}^2 , si procede facendo muovere (senza urti) le particelle per un tempo unitario nella direzione della loro velocità. Durante questa operazione è possibile che due particelle con velocità opposte si incontrino a metà strada tra un sito e l'altro. In base a quanto detto, le particelle si attraversano senza collidere. Il motivo per non far avvenire la collisione è che se avvenisse le posizioni da quell'istante non sarebbero più in \mathbb{Z}^2 . Nel modello di Broadwell continuo, descritto all'inizio, queste patologie sono assenti. Per mantenere l'analogia col gas di Lorentz, tratterò solo il modello discreto. Possiamo però migliorarlo con un corretto conteggio degli urti, recuperando quelli "a mezza strada" facendoli avvenire in ritardo, cioè al tempo $t+1$ quando le particelle

¹Causa l'indistinguibilità non importa come siano formate le coppie, purché ciascuna sia fatta di particelle con velocità opposte; se in numero dispari una rimarrà spaia.

arrivano in siti di \mathbb{Z}^2 . Quindi, se durante il tragitto, tra un sito e l'altro, una particella ne incontra un'altra con velocità opposta, allora quando arriva al sito finale, si ricorda dell'incontro e cambia velocità in accordo alla (C.1). In questa operazione applichiamo le stesse regole per gli “urti multipli” illustrate nella precedente nota a pie' di pagina.

Così con un po' di fatica e in modo alquanto artificiale, è definita la dinamica. Supporremo il gas rarefatto, più precisamente che il numero medio di particelle in (q, v) sia $\epsilon f_0(\epsilon q, v)$, con f_0 una funzione regolare e a supporto compatto per ogni valore di v . Per spiegare la ragione di questa ipotesi conviene interpretare il gas come composto da due altri gas, il primo costituito dalle particelle con velocità e_1 ed e_2 e l'altro da quelle con velocità e_3 ed e_4 . Per come è definita la dinamica, le particelle di un gas appartengono sempre a quello stesso, in quanto le velocità e_1 ed e_2 si scambiano tra loro e così le e_3 ed e_4 . È importante osservare che in questo modo le particelle di un gas fungono da “ostacoli” per le particelle dell'altro. L'indipendenza della distribuzione delle particelle e l'ipotesi di rarefazione consentono allora di verificare esattamente al tempo iniziale le condizioni di indipendenza degli ostacoli nel gas di Lorentz.² Se tale condizione permanesse almeno approssimativamente durante l'evoluzione, allora il rateo di cambio delle densità avrebbe la stessa espressione che nel gas di Lorentz, cioè la densità (normalizzata) $f_\tau(r, v)$ dovrebbe soddisfare nel limite $\epsilon \rightarrow 0$, l'equazione di Broadwell

$$\frac{\partial f_\tau(r, e_1)}{\partial \tau} + e_1 \nabla f_\tau(r, e_1) = 2[f_\tau(r, e_4)f_\tau(r, e_2) - f_\tau(r, e_3)f_\tau(r, e_1)] \quad (C.2)$$

ed analoghe per le $f_\tau(r, e_i)$, $i > 1$.

Nel termine di collisione, cioè nel membro di destra della (C.2), $f_\tau(r, e_4)$ rappresenta la densità di ostacoli per le particelle con velocità e_2 . Le collisioni (e_2, e_4) producono particelle con velocità e_1 , esse sono quindi il “termine di guadagno” per il gas di particelle con velocità e_1 . Il primo termine nel membro di destra della (C.2) va quindi identificato con il primo nella (??), con $f_\tau(r, e_4) \rightarrow \rho$. Il fattore 2, presente nella (C.2) ma non nella (??), tiene conto del fatto che ora gli ostacoli per le particelle e_1 non sono fissi. Nel sistema di riferimento in cui lo sono, le particelle e_1 hanno velocità doppia e quindi il flusso contro l'ostacolo, si veda la (??), è anch'esso raddoppiato. Analogo argomento si usa per giustificare il termine di perdita, cioè il secondo termine nel membro di destra della (C.2).

Siamo arrivati così ad una congettura ben precisa sull'evoluzione del gas di Broadwell in condizioni di rarefazione: le densità normalizzate limite dovrebbero risolvere la (C.2). Con una certa sorpresa si è (solo recentemente) scoperto che la congettura è falsa e che il gas non si comporta affatto come descritto dalla (C.2). Le deviazioni sono tanto più significativa quanto più passa il tempo. La patologia causa del fenomeno è dovuta al fatto che, agli istanti successivi quello iniziale, non è più verificata la condizione che le particelle di un gas, pensate come ostacoli per l'altro, siano indipendenti da questo, come richiesto nell'analisi del gas di Lorentz. Gli urti creano infatti forti correlazioni tra i due gas, tali da influenzare in modo macroscopico il rateo con cui avvengono le collisioni successive e la situazione peggiora quanto più il tempo passa.

²L'analogia non è tuttavia completa, in quanto avevamo supposto costante la densità degli ostacoli nel gas di Lorentz, ma i risultati dei capitoli precedenti si estendono anche al caso non uniforme.

Tre tipi di conclusioni si possono trarre da questa analisi. La prima è che l'ipotesi chiave per la deduzione di un'equazione cinetica del tipo (C.2) è quella che Boltzmann chiamò "Propagazione del caos". Questa è l'ipotesi che i flussi di particelle con velocità opposta, siano sostanzialmente indipendenti a tutti i tempi (se lo sono inizialmente). La propagazione del caos è, bisogna sottolinearlo, un'ipotesi e, per quanto visto, un'ipotesi molto delicata e non ovviamente, o sempre, soddisfatta. Si ha "regime cinetico" quando vale la propagazione del caos.

La seconda morale di questo esempio è di non prestare eccessiva fiducia in modelli così schematizzati quale è il gas di Broadwell. Da questo punto di vista è da considerarsi circostanza fortunata che anche il gas di Lorentz, non presenti analoghe patologie, e dia invece luogo ad equazioni fisicamente ragionevoli. (D'altra parte, se ciò non fosse accaduto, non sarebbe certamente stato oggetto di queste note!).

La terza considerazione, forse più personale, è che conviene essere molto sospettosi e non prestare fiducia eccessiva in considerazioni assiomatiche, peraltro spesso usate per costruire teorie macroscopiche. Le ho usate spesso anch'io nel testo, ma solo a livello interpretativo, per giustificare o spiegare fatti di cui si abbia certezza sperimentale e/o (per altra via) teorica.

Concludo con due referenze bibliografiche: la dimostrazione che il gas di quadrati descritto all'inizio dell'appendice non converge all'equazione di Broadwell è dovuto a Uchiyama, [55]. La dimostrazione nel caso discreto è dovuta a De Masi, Esposito e Presutti, [[11]].

APPENDICE D

Complementi sul modello di Ising

Nella prima sezione di questa appendice introdurrò un modello di gas reticolare che è equivalente a quello di Ising da un punto di vista matematico ma che fisicamente descrive un gas di particelle. Nella Sezione D.2 dimostrerò il Teorema 8.6 usando, nel corso della prova, la disuguaglianza di Hölder che, a sua volta, verrà dimostrata nella sezione D.3.

D.1. Gas sul reticolo

Il gas sul reticolo (lattice gas) è un modello di particelle puntiformi in cui si trascurano le velocità e le posizioni sono vincolate ad appartenere al reticolo \mathbb{Z}^d . Si suppone inoltre che in ogni sito reticolare vi sia al più una particella.

Da un punto di vista fisico l'assenza di velocità è basata sull'ipotesi che i fenomeni convettivi siano trascurabili e che la parte significativa dell'energia sia quella potenziale, ipotesi ben verificata in molti casi. Comunque in una teoria dell'equilibrio, quale quella che svolgeremo, le velocità sono facilmente inseribili nello schema, ma, per semplicità, considererò il caso senza velocità.

La discretizzazione delle posizioni è facilmente giustificabile se si sceglie il passo reticolare molto minore delle distanze su cui varia l'interazione: in tal caso spostare una particella al sito del reticolo che gli sta più vicino comporta una variazione trascurabile dell'energia. L'ipotesi che vi sia al più una particella per sito è invece più delicata. È certamente accettabile però se le forze sono sufficientemente repulsive all'origine, poiché in tal caso non si avranno collassi (si veda il Capitolo 9) e le particelle in media saranno a distanza finita, (basterà allora considerare un passo reticolare molto minore di tale distanza).

Supponiamo che le particelle siano confinate nella regione Λ , che supponiamo un sottoinsieme finito di \mathbb{Z}^d . Una configurazione del sistema è allora un elemento

$$\eta_\Lambda = \{\eta_\Lambda(x), x \in \Lambda\} \in \{0, 1\}^\Lambda \quad (\text{D.1})$$

identificando i siti x in cui $\eta_\Lambda(x) = 1$, con quelli in cui vi sono particelle. Definiamo inoltre la variabile numero di occupazione $\eta(x)$, $x \in \Lambda$, come la funzione su $\{0, 1\}^\Lambda$ che assegna ad una configurazione η_Λ il valore che essa ha in x .

Chiamiamo $V(x, y)$ il potenziale di interazione tra due particelle che si trovano in x e y . Supporremo il potenziale invariante per traslazione: $V(x, y) = V(0, y - x)$ e simmetrico: $V(x, y) = V(y, x)$. L'energia (potenziale) è

$$H_\Lambda = \frac{1}{2} \sum_{x \neq y} V(x, y) \eta(x) \eta(y), \quad x, y \in \Lambda \quad (\text{D.2})$$

intesa come funzione su $\{0, 1\}^\Lambda$. Chiameremo inoltre λ il potenziale chimico, n_Λ il numero di particelle in Λ :

$$n_\Lambda = \sum_{x \in \Lambda} \eta(x) \quad (\text{D.3})$$

L'energia dovuta al potenziale chimico è

$$-\lambda n_\Lambda \quad (\text{D.4})$$

e quella complessiva

$$H_\Lambda - \lambda n_\Lambda \quad (\text{D.5})$$

Il modello diventa tipo Ising con la trasformazione

$$\eta(x) = \frac{1 + \sigma(x)}{2} \quad (\text{D.6})$$

Infatti in queste variabili si ha (nell'equazione che segue le somme debbono intendersi estese a Λ)

$$\begin{aligned} H_\Lambda - \lambda n_\Lambda &= \frac{1}{2} \sum_{x \neq y} V(x, y) \frac{\sigma(x)\sigma(y)}{4} + \sum_x \sigma(x) \left\{ \frac{1}{4} \sum_{y: y \neq x} V(x, y) - \frac{1}{2} \lambda \right\} \\ &+ \left\{ \frac{1}{2} \sum_{x \neq y} \frac{1}{4} V(x, y) - \frac{1}{2} |\Lambda| \lambda \right\} \end{aligned}$$

L'espressione così ottenuta corrisponde all'energia nel modello di Ising con parametri

$$J(x, y) = -\frac{1}{4} V(x, y); \quad h(x) = -\frac{1}{4} \sum_{y: y \neq x} V(x, y) + \frac{1}{2} \lambda$$

in cui il campo magnetico non è costante come nel Capitolo 8. Supponendo tuttavia finita la portata dell'interazione, $h(x)$ ha un valore costante eccetto quando x è vicino al bordo di Λ , si può dimostrare però che tale dipendenza diventa trascurabile nel limite termodinamico.

Nel modello di gas reticolare il potenziale Ω_Λ della (??) ha un'interpretazione diretta:

$$\Omega_\Lambda(\mu_\Lambda) = E_\Lambda(\mu_\Lambda) - T S_\Lambda(\mu_\Lambda) - \lambda N_\Lambda(\mu_\Lambda)$$

con μ_Λ una probabilità su $\{0, 1\}^\Lambda$.

$$E_\Lambda(\mu_\Lambda) = \sum_{\eta_\Lambda \in \{0, 1\}^\Lambda} H_\Lambda(\eta_\Lambda) \mu_\Lambda(\eta_\Lambda); \quad N_\Lambda(\mu_\Lambda) = \sum_{\eta_\Lambda} n_\Lambda(\eta_\Lambda) \mu_\Lambda(\eta_\Lambda)$$

e l'entropia

$$S_\Lambda(\mu_\Lambda) = -k \sum_{\eta_\Lambda} \mu_\Lambda(\eta_\Lambda) \log \mu_\Lambda(\eta_\Lambda)$$

Il funzionale (??) in questo contesto è

$$\Pi_\Lambda = -\frac{1}{|\Lambda|} \Omega_\Lambda$$

ed ha direttamente l'interpretazione del funzionale di pressione. La soluzione del problema variazionale di massimizzazione di Π_Λ definisce la misura di Gibbs che ha l'espressione

$$\mu_{\beta,\lambda,\Lambda}(\eta_\Lambda) = \frac{1}{Z_{\beta,\lambda,\Lambda}} \left(e^{-\beta[H_\Lambda(\eta_\Lambda) - \lambda N_\Lambda(\eta_\Lambda)]} \right) \quad (\text{D.7})$$

con la pressione

$$\Pi_\Lambda(\mu_{\beta,\lambda,\Lambda}) = \frac{1}{\beta|\Lambda|} \log Z_{\beta,\lambda,\Lambda} \quad (\text{D.8})$$

D.2. Convessità della pressione

La pressione nel modello di Ising in un volume finito Λ è

$$P_{\beta,h,\Lambda}(H_\Lambda) = \frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left\{ \sum_{\sigma_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma_\Lambda)} \right\} \quad (\text{D.9})$$

dove ho esplicitato la dipendenza da H_Λ .

Lemma D.2.1. *La pressione $P_{\beta,h,\Lambda}(H_\Lambda)$ è una funzione convessa di H_Λ :*

$$P_{\beta,h,\Lambda}(\alpha H'_\Lambda + (1-\alpha)H''_\Lambda) \leq \alpha P_{\beta,h,\Lambda}(H'_\Lambda) + (1-\alpha)P_{\beta,h,\Lambda}(H''_\Lambda) \quad (\text{D.10})$$

per ogni H'_Λ, H''_Λ , $0 \leq \alpha \leq 1$.

Dimostrazione

Chiamando

$$H_\Lambda(\sigma_\Lambda) = \alpha H'_\Lambda(\sigma_\Lambda) + (1-\alpha)H''_\Lambda(\sigma_\Lambda), \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (\text{D.11})$$

si ha

$$Z_{\beta,h,\Lambda}(H_\Lambda) = \sum_{\sigma_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma_\Lambda)} = \sum_{\sigma_\Lambda} e^{-\beta H'_\Lambda(\sigma_\Lambda)\alpha} e^{-\beta H''_\Lambda(\sigma_\Lambda)(1-\alpha)} \quad (\text{D.12})$$

Nel caso particolare in cui $\alpha = 1/2$, possiamo applicare la disuguaglianza di Cauchy-Schwartz ottenendo

$$Z_{\beta,h,\Lambda}(H_\Lambda) \leq \left\{ \sum_{\sigma_\Lambda} e^{-\beta H'_\Lambda(\sigma_\Lambda)} \right\}^\alpha \left\{ \sum_{\sigma_\Lambda} e^{-\beta H''_\Lambda(\sigma_\Lambda)} \right\}^{1-\alpha} \quad (\text{D.13})$$

Per un valore generico di α in $[0, 1]$ usiamo, invece della disuguaglianza di Cauchy-Schwartz, la disuguaglianza di Hölder:

Disuguaglianza di Hölder. Sia S un insieme di cardinalità finita, $f(x)$ e $g(x)$ funzioni su S , $\mu(x)$ una misura non negativa su S , p e q due numeri positivi tali che

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 \quad (\text{D.14})$$

Si ha allora:

$$\left| \sum_{x \in S} \mu(x) f(x) g(x) \right| \leq \left\{ \sum_{x \in S} \mu(x) |f(x)|^p \right\}^{1/p} \left\{ \sum_{x \in S} \mu(x) |g(x)|^q \right\}^{1/q} \quad (\text{D.15})$$

La (D.15) sarà dimostrata nella prossima sezione. Per un qualunque α in $(0, 1)$, la (D.13) si ottiene dalla (D.12) ponendo $S = \{-1, 1\}^\Lambda$, $x = \sigma_\Lambda$ e

$$\begin{aligned} \mu(\sigma_\Lambda) &= 1, & f(\sigma_\Lambda) &= e^{-\beta H'_\Lambda(\sigma_\Lambda)}, & g(\sigma_\Lambda) &= e^{-\beta H''_\Lambda(\sigma_\Lambda)}, \\ p &= \frac{1}{\alpha}, & q &= \frac{1}{1-\alpha} \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

La (D.10) si ricava allora ricordando che

$$P_{\beta, h, \Lambda} = \frac{1}{\beta |\Lambda|} \ln Z_{\beta, h, \Lambda} \quad (\text{D.17})$$

concludendo la dimostrazione del lemma. \square

Teorema D.2.2. *Il limite termodinamico della pressione nel modello di Ising è una funzione convessa della hamiltoniana H , quando H varia nell'insieme (convesso) delle interazioni considerate nel Teorema 8.3.1.*

Dimostrazione

La dimostrazione è un corollario del Lemma D.2.1, in quanto il limite di funzioni convesse è convesso. \square

Teorema D.2.3. *Il limite termodinamico della pressione nel modello di Ising è una funzione convessa della temperatura $T = 1/k\beta$ e del campo magnetico h .*

Dimostrazione

Poiché il limite di funzioni convesse è convesso, basterà dimostrare la convessità in un volume finito Λ .

La convessità in h è un corollario del Lemma D.2.1 in quanto il campo magnetico è un parametro che moltiplica un termine della hamiltoniana. Analogamente si dimostra che

$\beta P_{\beta,h,\Lambda}$ è una funzione convessa di β . Poiché è una funzione regolare di β la sua derivata seconda è non negativa. Chiamando per semplicità $p(\beta) = P_{\beta,h,\Lambda}$ si ha allora

$$\frac{d^2 \beta p(\beta)}{d\beta^2} = 2 \frac{dp(\beta)}{d\beta} + \beta \frac{d^2 p(\beta)}{d\beta^2} \geq 0$$

D'altra parte, ricordando che $\beta = \beta(T) = 1/kT$

$$\frac{d^2 p(\beta(T))}{dT^2} = \frac{1}{kT^3} \left(2 \frac{dp(\beta)}{d\beta} + \beta \frac{d^2 p(\beta)}{d\beta^2} \right) \geq 0$$

che dimostra la convessità in T . □

D.3. La disuguaglianza di Hölder

In questa sezione dimostrerò la disuguaglianza di Hölder, enunciata nella sezione precedente. La disuguaglianza è in realtà valida in condizioni molto più generali, si veda per esempio il libro di Dunford-Schwartz, [13], da cui è tratta la mia dimostrazione. Dal punto di vista notazionale, conviene sottolineare che le espressioni che coinvolgono f e g nel lato destro della (D.15) sono le norme ℓ_p ed ℓ_q di f e g :

$$\|f\|_p = \left\{ \sum_{x \in S} \mu(x) |f(x)|^p \right\}^{1/p} \quad (\text{D.18})$$

Dimostrazione della (D.15).

La dimostrazione si ottiene in tre passi. Dimostreremo dapprima che

$$\text{per } a \text{ e } b \text{ positivi } ab \leq a^p/p + b^q/q \quad (\text{D.19})$$

Dalla (D.19) seguirà facilmente che

$$|f(x)g(x)| \leq \frac{|f(x)|^p}{p\|f\|_p} \|f\|_p \|g\|_q + \frac{|g(x)|^q}{q\|g\|_q} \|f\|_p \|g\|_q \quad (\text{D.20})$$

che moltiplicata per $\mu(x)$ e sommata su x dimostra la (D.15).

Per provare la (D.19) si definisce la funzione

$$\phi(t) := \frac{t^p}{p} + \frac{t^{-q}}{q}$$

notando che $\phi(t)$ ha un minimo in $t = 1$, quindi, poiché $\phi(1) = 1$

$$\phi(a^{1/q} b^{-1/p}) \geq 1$$

da cui la (D.19).

Per ottenere la (D.20) si pone, nella (D.19),

$$a = \frac{|f(x)|}{\|f\|_p}, \quad b = \frac{|g(x)|}{\|g\|_q}$$

□

APPENDICE E

Proprietà delle misure microcanoniche

E.1. Dimostrazione della (9.28)

Da un punto di vista euristico la (9.28) è una chiara conseguenza della (9.27). Si osservi infatti che l'elemento di volume dx che appare nel membro di destra della (9.27) può scriversi, quando $\Delta E \equiv dE$ è molto piccolo, come $dx = d\sigma(x_E)d\ell$ dove $d\sigma(x_E)$ è l'elemento di area sulla superficie $\{H(\cdot) = E\}$ e $d\ell$ è l'elemento di lunghezza in direzione perpendicolare alle superficie di energia e che misura la distanza tra la superficie con energia E e quella con energia $E + dE$. Poiché $dE = |\nabla H(x)|d\ell$ la (9.27) diventa la (9.28).

Vediamo ora, senza entrare in troppi dettagli, come questo argomento possa essere reso rigoroso. Per ipotesi la superficie di energia $\{H(\cdot) = E\}$ è regolare e compatta con $\nabla H(x) \neq 0$. È allora possibile “rettificare l'insieme” $\{E \leq H(\cdot) \leq E + \Delta E\}$, almeno se ΔE abbastanza piccolo, come vedremo qui appresso. L'insieme può essere infatti ricoperto da curve

$$x = f(x_E, \ell), \quad 0 \leq \ell \leq \ell_{x_E} \quad (\text{E.1})$$

di equazione

$$\frac{dx}{d\ell} = \frac{\nabla H(x)}{|\nabla H(x)|}, \quad f(x_E, 0) = x_E, \quad \text{con } H(x_E) = E \quad (\text{E.2})$$

con ℓ l'ascissa curvilinea.

In ogni punto le curve sono dirette normalmente alla superficie di energia che passa per quel punto. Per l'ipotesi fatta, ogni x in $\{E \leq H(\cdot) \leq E + \Delta E\}$ è dunque individuato univocamente da una coppia (x_E, ℓ) e identificheremo $x = (x_E, \ell)$. Chiamando $d\sigma(x_E)$ la misura d'area sulla superficie $\{H(\cdot) = E\}$, si ha in $\{E \leq H(\cdot) \leq E + \Delta E\}$

$$dx = d\sigma(x_E)d\ell J(x_E, \ell), \quad x = (x_E, \ell) \quad (\text{E.3})$$

dove

$$J(x_E, \ell) = \text{Jacobiano della trasformazione } (x_E, \ell) \rightarrow x \quad (\text{E.4})$$

Per definizione di misura d'area,

$$J(x_E, 0) = 1 \quad (\text{E.5})$$

Nelle coordinate (x_E, ℓ) l'insieme $\{E \leq H(\cdot) \leq E + \Delta E\}$ non è un “rettangolo”, nel senso che “l'altezza”, cioè l'intervallo di variazione di ℓ , dipende in generale dal punto x_E sulla “base”. Introduciamo allora per ogni x_E la nuova coordinata:

$$\ell \rightarrow e = H(x_E, \ell)$$

Nella rappresentazione $x = (x_E, e)$, l'insieme $\{E \leq H(\cdot) \leq E + \Delta E\}$ diventa un “rettangolo” in quanto $E \leq e \leq E + \Delta E$, qualunque sia x_E . Nelle nuove coordinate la (E.3) si scrive

$$dx = d\sigma(x_E) de \frac{J(x_E, \ell)}{|\nabla H(x)|} \quad (\text{E.6})$$

in quanto $de = |\nabla H(x)| d\ell$.

Faremo ora tendere $\Delta E \rightarrow 0$ nella (9.27). Vogliamo dimostrare che per ogni insieme regolare $A \subset \{H(\cdot) = E\}$ e usando la notazione

$$A \times \Delta E = \{(x_E, e) : x_E \in A, E \leq e \leq E + \Delta E\} \quad (\text{E.7})$$

si ha

$$\lim_{\Delta E \rightarrow 0} \int_{A \times \Delta E} d\mu_{E, \Delta E, n, \Lambda} = \int_A d\mu_{E, n, \Lambda} \quad (\text{E.8})$$

Ricordando la (9.27),

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{1}{n!} \int_A d\sigma(x_E) \frac{1}{\Delta E} \int_E^{E+\Delta E} de \frac{J(x_E, e)}{|\nabla H(x_E, e)|} \\ = \frac{1}{n!} \int_A d\sigma(x_E) \frac{1}{|\nabla H(x_E, e)|} \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

poiché

$$\lim_{e \rightarrow E} J(x_E, e) = 1, \quad \lim_{e \rightarrow E} |\nabla H(x_E, e)| = |\nabla H(x_E)|$$

Ponendo $A = \{H(\cdot) = E\}$ nella (E.9) abbiamo sulla sinistra il limite di $Z_{E, \Delta E, n, \Lambda}$ che identifica $Z_{E, n, \Lambda}$ come la costante di normalizzazione nella (9.28).

E.2. Invarianza temporale delle misure micro-canoniche

In questa sezione dimostrerò che la misura microcanonica è invariante per il flusso dinamico S_t . Il risultato estende al caso di misure sulle superficie il classico Teorema di Liouville sull'invarianza della misura di volume di Lebesgue rispetto ad un flusso hamiltoniano, Teorema A.2.

Teorema E.2.1. *Si supponga che la superficie $\{H(\cdot) = E\}$ sia regolare e $\nabla H \neq 0$. Sia A in $\{H(\cdot) = E\}$ un qualunque insieme regolare e con frontiera regolare. Allora, per ogni t ,*

$$\mu(A) = \mu(S_t A)$$

ovvero

$$\frac{1}{n!} \int_A d\sigma_E(x) \frac{1}{|\nabla H(x)|} = \frac{1}{n!} \int_{S_t A} d\sigma_E(x) \frac{1}{|\nabla H(x)|} \quad (\text{E.10})$$

Dimostrazione.

Chiamiamo per brevità

$$\lambda(A) = \int_A \frac{d\sigma_E(x)}{n!} \frac{1}{|\nabla H(x)|} \quad (\text{E.11})$$

e, per ogni insieme misurabile B contenuto nello spazio delle fasi,

$$V(B) = \int_B \frac{dx}{n!}$$

La dimostrazione renderà precise le seguenti affermazioni:

$$V(A \times \Delta E) \approx \lambda(A)\Delta E, \quad (\text{si vedano le (E.7)-(E.8)-(E.9)}) \quad (\text{E.12})$$

$$V(A \times \Delta E) = V(S_t[A \times \Delta E]), \quad (\text{Teorema di Liouville}) \quad (\text{E.13})$$

$$S_t[A \times \Delta E] \approx [S_t A] \times \Delta E; \quad V(S_t[A \times \Delta E]) \approx V([S_t A] \times \Delta E) \quad (\text{E.14})$$

Dalla (E.14) e dalla (E.12) con $A \rightarrow S_t A$,

$$V(S_t[A \times \Delta E]) \approx \lambda(S_t A)\Delta E \quad (\text{E.15})$$

Usando allora la (E.12) e (E.13) si conclude

$$\lambda(A)\Delta E \approx \lambda(S_t A)\Delta E \quad (\text{E.16})$$

Le approssimazioni diventeranno uguaglianze nel limite $\Delta E \rightarrow 0$ in cui la (E.16) implicherà $\lambda(A) = \lambda(S_t A)$, dimostrando così il Teorema.

Come già osservato, la (E.12) è vera nel senso della (E.9), cioè

$$\lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta E} V(A \times \Delta E) = \lambda(A)$$

La (E.13) è invece conseguenza del Teorema di Liouville. Rimane così da dimostrare la (E.14). Iniziamo dal confronto tra

$$S_t(x_E, e) \quad \text{con} \quad (S_t(x_E), e)$$

Chiamando $y := S_t(x_E, e)$, per la conservazione dell'energia $H(y) = e$ e quindi $y = (z', e)$ per un qualche z' . D'altra parte y tende a $z := S_t(x_E)$ quando $e \rightarrow E$, perché S_t è continua. Per la continuità della rappresentazione nelle coordinate (x_E, e) ne segue che $y = (z', e)$ con $z' \rightarrow z$ quando $e \rightarrow E$. Tutte le convergenze sono uniformi perché lavoriamo in un compatto, quindi per ogni $\epsilon > 0$ esiste δ tale che se $\Delta E \leq \delta$ allora

$$\left((S_t A)_\delta^- \right) \times \Delta E \subset S_t[A \times \Delta E] \subset \left((S_t A)_\delta^+ \right) \times \Delta E$$

dove, denotando con $d(x, C)$ la distanza di x dall'insieme C e con B^c il complementare di B si ha

$$B_\delta^- = \left\{ x \in B : d(x, B^c) \leq \delta \right\}, \quad B_\delta^+ = \left\{ x : d(x, B) \leq \delta \right\}$$

Abbiamo perciò

$$\lambda\left(\left((S_t A)_\delta^-\right)\right) \leq \frac{1}{\Delta E} V(S_t[A \times \Delta E]) \leq \lambda\left(\left((S_t A)_\delta^+\right)\right) \quad (\text{E.17})$$

Ricordando che la frontiera di A è per ipotesi regolare e poiché S_t è una trasformazione regolare, la frontiera di $S_t A$ è anch'essa regolare. Quindi i limiti superiore ed inferiore nella (E.17) diventano uguali nel limite in cui $\Delta E \rightarrow 0$ e $\delta \rightarrow 0$. In questo limite perciò le (E.12) e (E.14) diventano esatte e l'argomento presentato con le (E.15)-(E.16) dimostra il Lemma. \square

APPENDICE F

Il Teorema di Ricorrenza di Poincaré

In questa appendice dimostrerò il Teorema di Ricorrenza di Poincaré, seguendo l'approccio di Rokhlin, poi ripreso da Ornstein nel suo famoso teorema sull'isomorfismo degli schemi di Bernoulli con stessa entropia, [45].

Teorema F.0.2. *Sia (Ω, μ) uno spazio di probabilità e sia T una trasformazione invertibile di Ω in sé che conserva μ . Allora in un qualunque insieme $F \subset \Omega$ di misura non nulla quasi tutti i punti di F tornano in F infinite volte.*

Nella applicazione citata nel Capitolo 10, $\Omega = \{H(\cdot) = E\}$ e μ è la misura microcanonica su Ω . La regione Λ in cui le particelle si muovono è divisa in due parti uguali Λ_1 e Λ_2 , l'insieme F è allora l'insieme delle configurazioni di particelle in cui tutte sono in Λ_1 , tale insieme ha misura microcanonica non nulla. $T = S_\tau$, $\tau > 0$ è un'unità temporale. Per il teorema di Poincaré se la configurazione iniziale ξ è in F , allora, a meno che non sia in un insieme di misura nulla, la traiettoria che inizia da ξ tornerà infinite volte in F , [si può anche dire che in ogni suo intorno comunque piccolo quasi tutte le configurazioni danno luogo a traiettorie infinitamente ricorrenti in F]. Cioè esistono infiniti istanti $n\tau$ in cui il sistema è in uno stato in cui tutte le particelle sono in Λ_1 .

Dimostrazione.

La prova usa una costruzione geometrica, detta “torre di Rokhlin”. La base della torre è un segmento orizzontale che rappresenta simbolicamente l'insieme F , Fig. F.1. Sia

$$G_0 = \{x \in F : Tx \in F\} \tag{F.1}$$

$$F_1 = \{y = Tx : x \in F \setminus G_0\} \tag{F.2}$$

Cioè F è diviso in due intervalli, uno G_0 a sinistra, l'altro, $T^{-1}F_1$, a destra. F_1 è il tetto di $F \setminus G_0$, simbolicamente è un segmento parallelo ad F sopra $F \setminus G_0$, in modo tale che la verticale per $x \in T^{-1}F_1$ incontri F_1 in Tx , si veda Fig. F.2. In questo modo l'azione di T su $F \setminus G_0$ è rappresentata da uno shift verticale che porta da $T^{-1}F_1$ a F_1 , mentre T trasforma G_0 in un qualche insieme contenuto in F . (I punti di TG_0 non sono necessariamente tutti in $F \setminus G_0$, come la Fig.2 può lasciar intendere).

Si definisca ora:

$$G_1 = \{x \in F_1 : Tx \in F\} \quad (\text{F.3})$$

$$F_2 = \{y = Tx : x \in F_1 \setminus G_1\} \quad (\text{F.4})$$

Si ha:

$$F_2 \cap F_1 = F_2 \cap F = \emptyset \quad (\text{F.5})$$

Per definizione $F \cap F_2 = \emptyset$, rimane quindi da dimostrare che se $x \in F_1$, allora $Tx \notin F_1$. Se $Tx \in F_1$ allora per costruzione esisterebbe $z \in F$ tale che $Tz = Tx$ (graficamente z è sulla verticale sotto Tx in F), e questo contraddice l'invertibilità di T . Ciò dimostra la (F.5).

Nella costruzione grafica della torre di Rokhlin divideremo F_1 in due segmenti adiacenti, G_1 è sulla sinistra, $T^{-1}F_2$ sulla destra; sopra $T^{-1}F_2$ disegniamo F_2 come un segmento orizzontale e in modo tale che la verticale per $y \in F_2$ incontra F_1 nel punto x tale che $Tx = y$, si veda la Fig. F.2.

Procedendo iterativamente definiamo

$$G_n = \{x \in F_n : Tx \in F\} \quad (\text{F.6})$$

$$F_{n+1} = \{y = Tx : x \in F_n \setminus G_n\} \quad (\text{F.7})$$

e come prima $F_{n+1} \cap F_i = \emptyset$ per ogni $i \leq n$ ($F_0 \equiv F$). Graficamente, si veda la Fig. F.3, G_n è alla sinistra di F_n e F_{n+1} è un segmento orizzontale sopra $T^{-1}F_{n+1}$ in modo tale che l'azione di T sia rappresentata come uno shift verticale da $T^{-1}F_{n+1}$ a F_{n+1} .

Sia

$$\mathcal{B} = \{x \in F : T^n x \in F_n, \text{ per ogni } n \geq 1\} \quad (\text{F.8})$$

quindi \mathcal{B} è l'insieme dei punti di F che non tornano mai in F , graficamente i punti che hanno durante il moto sempre un tetto sopra di loro. Si ha

$$1 \geq \mu(\mathcal{B} \cup T\mathcal{B} \cup \dots \cup T^{n-1}\mathcal{B}) = n\mu(\mathcal{B}) \quad (\text{F.9})$$

poichè gli insiemi $T^i\mathcal{B}$ sono disgiunti e T conserva la misura. (La prima disuguaglianza invece sfrutta l'assunzione che μ sia una misura di probabilità). Quindi $\mu(\mathcal{B}) \leq 1/n$ per ogni n e perciò $\mu(\mathcal{B}) = 0$.

$F \setminus \mathcal{B}$ è l'insieme dei punti di F che tornano almeno una volta in F , però non è detto che quando tornano in F tornino proprio in $F \setminus \mathcal{B}$, se così fosse avremmo concluso il teorema. Basterà tuttavia dimostrare che $F^{(1)}$ definito come il luogo in F dove ritornano per la prima volta i punti di F , ha la stessa misura di F . Infatti, per iterazione, la prova del teorema segue poi facilmente.

Si ha

$$F^{(1)} = TG_0 \cup TG_1 \dots TG_n \dots$$

e

$$\mu(TG_0 \cup TG_1 \dots \cup TG_n \dots) = \mu(G_0 \cup G_1 \dots \cup G_n \dots)$$

per l'invarianza sotto T della μ .

Inoltre

$$\mu(G_0 \cup G_1 \dots \cup G_n \dots) = \sum_i \mu(G_i)$$

perché gli insiemi G_i sono disgiunti.¹ Usando ancora l'invarianza della misura

$$\mu(G_i) = \mu(T^{-i}G_i)$$

quindi

$$\sum_i \mu(G_i) = \sum_i \mu(T^{-i}G_i) = \mu(G_0 \cup T^{-1}G_1 \dots)$$

L'ultima uguaglianza discende dal fatto che gli insiemi $T^{-i}G_i$ sono tra loro disgiunti, come evidente dalla costruzione grafica. Da questa risulta anche ovvio che gli insiemi $T^{-i}G_i$ ricoprono $F \setminus \mathcal{B}$ e quindi

$$\mu(G_0 \cup T^{-1}G_1 \dots) = \mu(F \setminus \mathcal{B}) = \mu(F)$$

avendo già dimostrato che $\mu(\mathcal{B}) = 0$. In conclusione perciò

$$\mu(TG_0 \cup TG_1 \dots TG_n \dots) = \mu(F)$$

e quindi la dimostrazione del teorema è completata. □

¹Sto usando la σ -additività della misura, che estende la proprietà di additività della misura a unioni numerabili di insiemi disgiunti e che è verificata da misure di Lebesgue.

APPENDICE G

Il teorema di Perron-Frobenius

Sia T una matrice $n \times n$ di elementi $T(i, j)$, T^* la trasposta di T , $\langle a, b \rangle$ il prodotto scalare in \mathbb{R}^n . Supporremo tutti gli elementi $T(i, j)$ strettamente positivi,

$$0 < T' \leq T(i, j) \leq T'', \quad \text{per ogni } i, j$$

Teorema G.0.3 (Teorema di Perron-Frobenius). *T ha un autovalore $\lambda > 0$ che è anche autovalore di T^* , gli autovettori corrispondenti, rispettivamente d e s , (d per destro, s per sinistro), soddisfano quindi le relazioni $Td = \lambda d$, $T^*s = \lambda s$, cioè*

$$\sum_j T(i, j)d(j) = \lambda d(i), \quad \sum_j s(j)T(j, i) = \lambda s(i) \quad (\text{G.1})$$

e hanno tutte le componenti strettamente positive (ovvero tutte negative).

Sia per T che per T^* , λ è un autovalore semplice e inoltre ogni altro autovalore κ verifica

$$|\kappa| \leq \lambda[1 - 2p], \quad p = \left(\frac{T'}{T''} \right)^2 \frac{1}{n} \quad (\text{G.2})$$

Infine, normalizzando d e s in modo che $\langle s, d \rangle = 1$, il sotto-spazio $\{u - \langle s, u \rangle d, u \in \mathbb{R}^n\}$ è invariante per l'azione di T ed esiste una costante c per cui

$$\|[\lambda^{-1}T]^n u - \langle s, u \rangle d\| \leq c[\max_i |u(i)|][1 - 2p]^n \quad (\text{G.3})$$

Dimostrazione.

Sia Σ lo spazio delle misure di probabilità su $\{1, \dots, n\}$:

$$\Sigma = \left\{ \psi \in \mathbb{R}^n : \psi(i) \geq 0; \sum_{i \in S} \psi(i) = 1 \right\} \quad (\text{G.4})$$

e U la trasformazione di Σ in sé:

$$U\psi(i) = \frac{\sum_j T(i, j)\psi(j)}{\sum_{i, j} T(i, j)\psi(j)} \quad (\text{G.5})$$

Σ è un insieme convesso e compatto, U è una trasformazione continua su Σ , allora per il Teorema di punto fisso di Schauder Tychonoff, si veda il Teorema V.10.5 in [13], esiste $d \in \Sigma$ tale che

$$Ud = d; \quad \text{che implica } Td = \lambda d, \text{ con } \lambda = \sum_{i,j} T(i,j)d(j) \quad (\text{G.6})$$

Poiché $d \in \Sigma$ e T ha elementi positivi, $Td(i) > 0$ per ogni i , quindi dall'ultima relazione nella (G.6) si deduce che $\lambda > 0$ e dalla seconda che $d(i) > 0$ per ogni i .

È allora ben definita la matrice

$$P(i,j) = \frac{T(i,j)d(j)}{\lambda d(i)} \quad (\text{G.7})$$

$P(i,j)$ è una probabilità di transizione:

$$\sum_j P(i,j) = 1, \quad \text{per ogni } i \quad (\text{G.8})$$

Le matrici $\lambda^{-1}T$ e P sono coniugate dalla trasformazione

$$V\psi(i) = d(i)^{-1}\psi(i) \quad (\text{G.9})$$

di \mathbb{R}^n in sé. Si ha infatti

$$P = V[\lambda^{-1}T]V^{-1}, \quad [\lambda^{-1}T] = V^{-1}PV \quad (\text{G.10})$$

in quanto, per ogni vettore ψ ,

$$PV\psi(i) = \sum_j \frac{T(i,j)d(j)}{\lambda d(i)} V(j)\psi(j) = \frac{1}{\lambda d(i)} \sum_j T(i,j)\psi(j) = \{V\lambda^{-1}T\psi\}(i)$$

Poiché $PV = V[\lambda^{-1}T]$, se ψ è un autovettore di T con autovalore γ , $V\psi$ è un autovettore di P con autovalore $\lambda^{-1}\gamma$ e viceversa.

Se invece ϕ è autovettore di T^* (ovvero autovettore sinistro di T) con autovalore γ , dalla relazione $V^{-1}P = [\lambda^{-1}T]V^{-1}$ si conclude che $V^{-1}\phi$ è un autovettore sinistro di P (ovvero autovettore di P^*) con autovalore $\lambda^{-1}\gamma$, e viceversa.

In conclusione gli autovalori di T si ottengono da quelli di P moltiplicandoli per λ , gli autovettori applicando V^{-1} agli autovettori di P e quelli di T^* applicando V . La dimostrazione del teorema è allora ridotta allo studio della matrice P .

P ha autovalore 1 con autovettore il vettore costante, (di componenti tutte uguali tra loro): sarà il vettore che corrisponde all'autovettore d di T . 1 è anche un autovalore per P^* il cui autovettore μ , se normalizzato in modo da appartenere a Σ , si interpreta come una misura di probabilità invariante per P , in quanto

$$\sum_j \mu(j)P(j,i) = \sum_j P^*(i,j)\mu(j) = \mu(i) \quad (\text{G.11})$$

L'esistenza e unicità sono conseguenza della seguente proprietà (la cui dimostrazione è posposta):

Lemma G.0.4. Per ogni i e j in $\{1, \dots, n\}$ esiste il limite $\lim_{k \rightarrow \infty} P^k(i, j)$, tale limite non dipende da i e, indicandolo con $\mu(j)$,

$$|P^k(i, j) - \mu(j)| \leq (1 - 2p)^k \quad (\text{G.12})$$

dove

$$p = \min_{i,j} P(i, j) > 0 \quad (\text{G.13})$$

Corollari. Il vettore $\mu = \{\mu(j)\}$, definito nel lemma, è soluzione dell'equazione (G.11):

$$\sum_j \mu(j) P(j, i) = \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_j P^k(\ell, j) P(j, i) = \lim_{k \rightarrow \infty} P^{k+1}(\ell, i) = \mu(i)$$

Unicità di μ : se ν è una misura invariante, (ovvero un autovettore di P^*),

$$\sum_i \nu(i) P^k(i, j) = \nu(j) \left[\sum_i \nu(i) \right] \quad (\text{G.14})$$

e quindi nel limite $k \rightarrow \infty$, usando la (G.12), otteniamo $\nu(j)$ proporzionale a $\mu(j)$.

Dimostrazione del Lemma

Chiamando M_k e m_k il massimo e il minimo su i di $P^k(i, j)$ e i_k e j_k un corrispondente massimizzante e minimizzante, si ha

$$\begin{aligned} M_k &= P^k(i_k, j) = \sum_{\ell} P(i_k, \ell) P^{k-1}(\ell, j) = P(i_k, j_{k-1}) m_{k-1} + \sum_{\ell \neq j_{k-1}} P(i_k, \ell) P^{k-1}(\ell, j) \\ &\leq P(i_k, j_{k-1}) m_{k-1} + M_{k-1} \sum_{\ell \neq j_{k-1}} P(i_k, \ell) = P(i_k, j_{k-1}) m_{k-1} + (1 - P(i_k, j_{k-1})) M_{k-1} \end{aligned}$$

che si migliora sostituendo $P(i_k, j_{k-1})$ con il minimo p di $P(i, j)$. Quindi

$$M_k \leq (1 - p) M_{k-1} + p m_{k-1}$$

Analogamente

$$m_k \geq (1 - p) m_{k-1} + p M_{k-1}$$

e

$$M_k - m_k \leq (1 - 2p) [M_{k-1} - m_{k-1}] \quad (\text{G.15})$$

che dimostra il lemma. \square

Corollario. 1 è un autovalore semplice di P , infatti se $u = Pu$ allora $u = P^n u$ e facendo il limite per $n \rightarrow \infty$,

$$u(i) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_j P^n(i, j) u(j) = \sum_j \mu(j) u(j)$$

per la (G.12). Quindi u è proporzionale all'autovettore 1.

Lo spazio

$$\mathcal{X} = \left\{ u \in \mathbb{R}^n : \langle \mu, u \rangle = 0 \right\} \quad (\text{G.16})$$

è trasformato in sé da P in quanto $P^* \mu = \mu$ (ovvero, μ è invariante). Si ha

$$P^n[u - \langle \mu, u \rangle 1] = \sum_j [P^n(i, j) - \mu(j)] u(j)$$

e quindi

$$|P^n[u - \langle \mu, u \rangle 1]| \leq [1 - 2p]^n [\max_j |u(j)|] \quad (\text{G.17})$$

Infine se u è autovettore con autovalore $\kappa \neq \lambda$, allora $\langle \mu, u \rangle = 0$, in quanto $0 = \langle \mu, Pu - \kappa u \rangle = \langle \mu, u - \kappa u \rangle$ e quindi, per la (G.17),

$$|\kappa| \leq \lambda(1 - 2p) \quad (\text{G.18})$$

Un limite inferiore per p si ottiene dalla (G.13)

$$p = \min_{i,j} P(i, j) = \min_{i,j} \frac{T(i, j)d(j)}{\lambda d(i)} \quad (\text{G.19})$$

Scegliamo d con la normalizzazione $\sum d(i) = 1$ e chiamiamo d' e d'' il minimo e il massimo di $d(i)$. Si ricordi che T' e T'' indicano il minimo e il massimo di $T(i, j)$. Dall'equazione $Td = \lambda d$ si ottiene

$$T' \leq \lambda d(i) \leq T''$$

che implica, sommando su i ,

$$\lambda \leq T'' n, \quad d' \geq \frac{T'}{\lambda}$$

Quindi

$$p \geq \frac{T'd'}{T''} \geq \frac{(T')^2}{\lambda T''} \geq \frac{(T')^2}{(T'')^2 n}$$

da cui la (G.2).

Ricordando che gli autovalori di T^* si ottengono da quelli di P applicando V abbiamo

$$s(i) = V\mu(i) = \frac{\mu(i)}{d(i)} \quad (\text{G.20})$$

quindi

$$\sum_j s(j)T(j, i) = \lambda d(i), \quad \mu(i) = \frac{d(i)s(i)}{\sum_j d(j)s(j)} \quad (\text{G.21})$$

La (G.3) è allora conseguenza della (G.17). Il teorema è dimostrato. \square

Bibliografia

- [1] V.I. Arnold, A. Avez *Ergodic problems of classical mechanics*, W.A. Benjamin, New York, Amsterdam (1968).
- [2] C. Boldrighini, L. Bunimovich, Ya.G. Sinai *On the Boltzmann equation for the Lorentz gas*, Jour. Stat. Phys. **32** 477–501 (1983).
- [3] L. Breiman *Probability*, Addison-Wesley (1968).
- [4] L. Bunimovich ,.
- [5] M. Cassandro *Voce: Meccanica Statistica delle transizioni di fase*, Dizionario delle Scienze Fisiche, Enciclopedia Treccani.
- [6] C. Cattaneo *Lezioni di Meccanica Razionale*, Pellegrini Editore, Pisa (1961).
- [7] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti *Mathematical Theoty of Rarefied Gases*, Springer Series in Applied Mathematics n.106, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1994).
- [8] I.P. Cornfeld, S.V. Fomin e Ya.G. Sinai *Ergodic Theory*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1982).
- [9] M. Chricton *Jurassik Park*, Garzanti Editore (1982).
- [10] G.F. Dell’Antonio *Elementi di Meccanica. I Meccanica Classica*, Liguori Editore (1996).
- [11] A. De Masi, R. Esposito, E. Presutti *Kinetic limits of HPP cellular automaton*, J. Stat. Phys. **66**, 403–464 (1992).
- [12] R.J. Di Perna, P.L. Lions *On the Cauchy problem for the Boltzmann equation: global existence and weak stability*, Ann. Math. **130**, 321–366 (1989).
- [13] N. Dunford, J.T. Schwartz *Linear Operators. Part I: General Theory*, Interscience Publishers, J. Wiley-Sons (1957).
- [14] P. e T. Ehrenfest in “*P. Ehrenfest, Collected Scientific Papers*, North Holland (1959).
- [15] E. Fermi *Thermodynamics*, Dover (1956).
- [16] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam *Los Alamos Scientific Laboratory Report, n. LA-1940*, (1955).
- [17] E. Fermi *Collected papers*, 978 (1965).

- [18] J. Frölich *Classical and quantum Statistical Mechanics in 1 and 2 dimensional two components Yukawa and Coulomb systems*, Commun. Math. Phys. **47**, 233–268 (1976).
- [19] G. Gallavotti *The elements of Mechanics*, Springer-Verlag (1983).
- [20] G. Gallavotti *Rigorous theory of the Boltzmann equation in the Lorentz gas*, Nota Interna 358, Istituto di fisica, Università di Roma (1972).
- [21] G. Gallavotti *Aspetti della teoria ergodica qualitativa e statistica del moto*, Quaderni dell’UMI, **21**, Pitagora Editore, Bologna (1982).
- [22] G. Gallavotti *Voci: Meccanica Statistica, Insiemi Statistici, Limite Termodinamico*, Dizionario delle Scienze Fisiche, Enciclopedia Treccani
- [23] W.T. Grandy *Foundations of Statistical Mechanics. Volume I: Equilibrium Theory. Volume II: nonequilibrium phenomena*, D. Reidel Publ. Co., Dordrecht, Boston.
- [24] G. Grimmett *Percolation*, Sprineger-Verlag, (1989).
- [25] P.R. Halmos *Lectures on Ergodic Theory*, Math. Soc. Japan (1956).
- [26] R. Huang *Statistical Mechanics*, J. Wiley and Sons (1963).
- [27] A.I. Khincin *Mathematical foundations of information theory*, Dover (1957).
- [28] A.I. Khincin *Mathematical foundations of Statistical Mechanics*, Dover (1949).
- [29] L.D. Landau, E.M. Lifschitz *Meccanica*, Boringhieri Editore (1965).
- [30] L.D. Landau, E.M. Lifschitz *Statistical Physics*, Pergamon Press (1959).
- [31] L.D. Landau, E.M. Lifschitz *Fluid mechanics*, Pergamon Press (1959).
- [32] O.E. Lanford III *Time evolution of large classical systems*, Proceedings 1974 Batelle Rencontre on Dynamical Systems; Lecture Notes in Physics **35**, Springer-Verlag (1975).
- [33] O.E. Lanford III *On the derivation of the Boltzmann equation*, in *Non Equilibrium Phenomena I. The Boltzmann equation*, “Studies in Statistical Mechanics Vol.X”, eds. J.L. Lebowitz, E.W. Montroll, North Holland (1983).
- [34] J.L. Lebowitz *Boltzmann’s Entropy and Time’s Arrow*, Physics Today, pagg. 32–38 (1993).
- [35] J.L. Lebowitz *Macroscopic Laws and Microscopic Dynamics: Boltzmann’s Entropy Revisited*, Physica A, **194**, 1–27(1993).
- [36] J.L. Lebowitz, H. Spohn *Transport porperties of the Lorentz gas: Fourier’s law*, Jour. Stat. Phys. **19**, (1978).

- [37] J. Lewis, C. Pfister *Large deviations and the thermodynamic formalism: a new proof of the equivalence of ensembles*, Proceedings of the Leuven Congress: On 3 levels: micro, meso and macroscopic approaches in physics, Ed. Verbeure (1993).
- [38] E.M. Lifschitz, L.P. Pitaevskii *Physical Kinetics*, Pergamon Press, Oxford, New York (1981).
- [39] A. Martin-Löf *Lecures on Statistical Physics and the foundations of Thermodynamics*, Lecture Notes in Physics **101**, Springer-Verlag (1978).
- [40] H.A. Lorentz *Le mouvement des électrons dans les métaux*, Arch. Néerl. **10**, 336 (1905).
- [41] C.B. Morrey *On the derivation of the equations of hydrodynamics from Statistical Mechanics*, Commun. Pure Applied Math. **8**, 279 (1955).
- [42] R.G. Newton *Scattering theory of waves and particles*, Mc Graw-Hill Company (1966).
- [43] E. Olivieri *Elementi di Meccanica Statistica classica*, Quaderni del CNR, (1993).
- [44] E. Olivieri *Voce: fase, coesistenza di*, Dizionario delle Scienze Fisiche, Enciclopedia Treccani.
- [45] D.S. Ornstein *Ergodic Theory, Randomness and Dynamical Systems*, Yale Univ. Press (1974).
- [46] W. Pauli *Pauli Lectures in Physics. Vol. 3: Thermodynamics and the kinetic theory of gases*, The MIT Press (1977).
- [47] W. Pauli *Pauli Lectures in Physics. Vol. 4: Statistical Mechanics*, The MIT Press (1977).
- [48] E. Presutti *Introduzione alla Meccanica Statistica*, Quaderni del CNR, (1979).
- [49] M. Reed, B. Simon *Methods of modern mathematical physics. III. Scattering theory*, Academic Press, New York, S. Francisco, London (1979).
- [50] D. Ruelle *Statistical Mechanics*, Benjamin (1969).
- [51] D. Ruelle *Thermodynamic formalism. In the series "Encyclopedia of Mathematics*, Addison-Wesley (1978).
- [52] Ya.G. Sinai *Dynamical systems with elastic reflections. Ergodic properties of dispersing billiards*, Russian Math. Surveys **25**, 141–192(1970).
- [53] Ya.G. Sinai .
- [54] H. Spohn *Large scale dynamics of interacting particle systems*, Text and Monographs in Physics, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, (1991).
- [55] K. Uchiyama *On the Boltzmann-Grad limit for the Broadwell model of the Boltzmann equation*, J. Stat. Phys. **52**, 331–355 (1988).
- [56] A.S. Wightman *Introduction, in "Convexity in the theory of lattice gas, by R.B. Israel*, Princeton University Press (1979).

Bibliografia