

Capitolo 3

Introduzione alla Teoria Ergodica

§1. Introduzione. La teoria ergodica, come disciplina matematica, attualmente trova la sua collocazione nell'ambito della teoria della probabilità e della teoria dei sistemi dinamici. Però la sua origine si riconduce al tentativo di spiegare i fenomeni termodinamici macroscopici mediante una teoria atomistica microscopica, compiuta a partire dalla seconda metà dell'ottocento da alcuni fisici (Helmholtz, Maxwell, e Boltzmann a cui si deve il termine ergodico, su tutti). In questa introduzione cercheremo di spiegare appunto quale sia il legame tra la teoria ergodica ed i fondamenti della termodinamica.

Ricordiamo innanzitutto che la termodinamica tratta la materia come un continuo, e si pone come obiettivo di inquadrare in una teoria unitaria i fenomeni che avvengono in conseguenza degli scambi di calore tra i vari corpi. Notiamo che la nozione di calore viene assunta come primitiva, e quindi ci fa uscire dall'ambito puramente meccanico. La teoria si basa essenzialmente su quattro assiomi che possono essere enunciati nel modo seguente:

1. **Principio zero.** Un sistema isolato raggiunge uno *stato di equilibrio*, nel quale i valori delle variabili macroscopiche (pressione, volume, etc.) sono costanti nel tempo.
2. **Primo Principio, o principio di conservazione dell'energia.** In un processo ciclico,¹ la quantità di calore assorbita da un sistema è pari al lavoro compiuto dallo stesso. Detto in un modo equivalente, esiste una funzione di stato (l'energia interna U) la cui variazione tra due stati A e B , è pari alla somma del calore assorbito meno il lavoro compiuto dal sistema, per passare da A a B .
3. **Secondo Principio, o esistenza dell'entropia.** Nella formulazione di Carathéodory, il secondo principio si enuncia dicendo che non è possibile,

¹Si dice *ciclico* un processo alla fine del quale il sistema ritorna nell'identico stato di partenza.

partendo da uno stato A , raggiungere tutti gli altri possibili stati mediante un processo adiabatico ². In altre parole, mediante trasformazioni adiabatiche, certi stati non sono accessibili al sistema. Ad esempio, mediante trasformazioni cicliche adiabatiche (irreversibili) posso riscaldare un sistema isolato, ma non posso raffreddarlo. Da questo principio segue l'esistenza dell'entropia e dei vari potenziali termodinamici (energia libera, eccetera).

A questi principi classici si aggiunge poi il cosiddetto **Terzo Principio** (di Nernst, 1906), secondo il quale per ogni sistema esiste una temperatura critica, al di sotto della quale l'energia interna e l'energia libera coincidono, e dunque l'entropia è nulla. Di questo ultimo principio (che è strettamente connesso al passaggio dalla meccanica classica alla meccanica quantistica) qui non ci occuperemo, e faremo riferimento ai principi classici.

Da tali principi, in particolare si può giungere a dimostrare (vedi Lanford...) ad esempio che esiste una nuova grandezza, la temperatura assoluta, che caratterizza gli stati di equilibrio, nel senso che sistemi diversi tutti alla medesima temperatura, se posti in contatto termico, permangono nel loro stato di equilibrio (sono in mutuo equilibrio).

Il programma atomistico ottocentesco (che in larga misura è correntemente adottato ancora oggi in Fisica) si proponeva di dedurre come teoremi i tre principi sopra enunciati, a partire dalla dinamica (retta dalle equazioni di Newton) di un sistema composto da un grandissimo numero (dell'ordine di 10^{23}) di minuscole unità (gli atomi o le molecole) non accessibili sperimentalmente. Per comprendere come sia possibile introdurre una grandezza come la temperatura in un contesto meccanico discuteremo il caso del gas perfetto.

§2. Il gas perfetto. Nello studio del comportamento dei gas più comuni (aria, ossigeno, idrogeno, etc.), si è giunti sperimentalmente a stabilire che la pressione p risulta essere con buona approssimazione proporzionale alla temperatura T del gas, ed inversamente proporzionale al volume V del recipiente in cui è racchiuso (per fissare le idee si pensi alla comune pompa da bicicletta). La legge di stato³ (detta "legge dei gas perfetti") si può scrivere come

$$pV = nRT \quad (1)$$

dove n è la quantità di gas in esame (usualmente espressa in moli), ed R una costante dimensionale che viene detta costante dei gas. Questa legge viene seguita con molta accuratezza dai gas che si trovino abbastanza lontani dal punto di liquefazione (cioè a temperature sufficientemente alte, e densità non troppo grandi).

Un modello atomistico risalente a Clausius, che riproduce la legge dei gas perfetti, consiste di N particelle non interagenti che urtano elasticamente le pareti di

²Si dice *adiabatico* un processo in cui non vi sia scambio di calore.

³La legge di stato è una relazione tra pressione, volume e temperatura, caratteristica di ogni sistema

un contenitore cubico di lato L . Questo a patto che si definisca opportunamente in termini microscopici il concetto di pressione. Consideriamo inizialmente la particella i -esima, che urta elasticamente una parete del contenitore, per esempio quella posta ad $x = 0$, perpendicolare all'asse delle x . Se indichiamo con v_x^i è la componente lungo l'asse delle x della velocità prima dell'urto, dopo l'urto tale componente varrà $-v_x^i$, le altre rimangono invariate.⁴ La variazione della quantità di moto della particella nella direzione x sarà dunque $\Delta Q^i = 2m_i v_x^i$, e tale variazione sarà dovuta all'impulso⁵ della forza esercitata dalla parete sulla particella. L'intervallo di tempo tra due successive collisioni con la parete considerata sarà dato da $2L/v_x^i$, per cui in un certo intervallo di tempo \bar{t} , la particella subirà un numero di urti pari a $v_x^i \bar{t}/2L$, sicché l'impulso della forza esercitata dalla parete sulla particella nell'intervallo di tempo \bar{t} , sarà

$$\Delta Q_{tot}^i = \frac{m_i (v_x^i)^2}{L} \bar{t}.$$

Quindi l'impulso totale delle forze che la parete esercita sul gas sarà semplicemente la somma dei singoli impulsi, cioè trovo

$$\Delta Q_{tot} = \frac{\sum_i m_i (v_x^i)^2}{L} \bar{t}.$$

Poiché l'impulso è definito come l'integrale nel tempo della forza, la relazione precedente si scrive anche come

$$\frac{1}{\bar{t}} \int_0^{\bar{t}} F_x dt = \frac{\sum_i m_i (v_x^i)^2}{L}.$$

Se *definiamo* ora come pressione p la *media temporale* della componente normale della forza per unità di superficie che la parete esercita sul gas⁶, ovvero mediante la relazione

$$\frac{1}{\bar{t}} \int_0^{\bar{t}} F_x dt = pL^2,$$

otteniamo allora

$$pV = \sum_i m_i (v_x^i)^2. \quad (2)$$

⁴Questa *legge di riflessione* è l'unica compatibile con la conservazione dell'energia e la conservazione della quantità di moto parallela alla superficie.

⁵Ricordiamo che l'equazione di Newton per una particella $m\mathbf{a} = \mathbf{F}$ comporta per la quantità di moto $\mathbf{Q} = m\mathbf{v}$ la relazione

$$\mathbf{Q}(t_1) - \mathbf{Q}(t_0) = \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{F} dt.$$

L'integrale a secondo membro viene detto impulso della forza nell'intervallo (t_0, t_1) .

⁶Per il principio di azione e reazione la forza media che la parete esercita sul gas è eguale a quella che il gas esercita sulla parete, solo cambiata di verso.

A questo punto facciamo una ipotesi di natura statistica sulle velocità \mathbf{v}_i delle particelle, che è un'ipotesi che riguarda la scelta dei possibili dati iniziali. È chiaro che è possibile scegliere le velocità iniziali in modo che siano tutte dirette per esempio nel piano yz in modo che la pressione sulla parete ortogonale all'asse delle x risulti nulla, ma tutti sentiamo istintivamente che tale scelta è particolarissima ed *altamente improbabile*. Ci appare più naturale pensare che le velocità iniziali delle particelle abbiano un orientamento casuale, cioè che valga⁷

$$\sum_i m_i (v_x^i)^2 = \sum_i m_i (v_y^i)^2 = \sum_i m_i (v_z^i)^2 .$$

Risulta allora che la (2) si può riscrivere in termini dell'energia cinetica totale⁸ del gas nel modo seguente

$$pV = \frac{2}{3} K_{tot} . \quad (3)$$

Questa fornisce l'equazione del gas perfetto una volta che si identifichi la temperatura T con l'energia cinetica media per particella, cioè si ponga

$$T = \frac{K_{tot}}{k_B N} ,$$

con una opportuna costante dimensionale k_B , detta costante di Boltzmann.

§3. Il teorema del viriale: un modello più realistico di gas perfetto. Nel paragrafo precedente si è visto che la pressione, che è una variabile macroscopica, deve essere pensata come una media temporale di una quantità microscopica. Questo d'altra parte è ragionevole, perché si è supposto che i tempi della dinamica microscopica siano molto più brevi delle scale di tempo su cui si effettuano le misure macroscopiche. Ad esempio si stima che una molecola di gas subisca un urto in media ogni 10^{-10} secondi, da confrontarsi con la durata di un secondo tipica delle misure macroscopiche. Nell'esempio seguente, in cui si analizza un modello più realistico di gas, dove sono presenti anche forze tra le molecole di questo, e dunque l'energia cinetica non è più costante del moto, la legge di stato conterrà non l'energia cinetica stessa, ma la sua media temporale.

Consideriamo dunque il moto delle N molecole descritto dal sistema delle equazioni di Newton

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = \mathbf{F}_i^{ext} + \sum_{i \neq j} \mathbf{F}_{ij} ,$$

⁷In accordo con il principio idrostatico di Pascal, che la pressione sia ovunque la medesima nel fluido.

⁸Definita da

$$K_{tot} = \sum_i \frac{1}{2} m_i [(v_x^i)^2 + (v_y^i)^2 + (v_z^i)^2] .$$

dove m_i è come prima la massa dell' i -esima particella, \mathbf{F}_i^{ext} la forza dovuta alle pareti del contenitore, \mathbf{F}_{ij} la forza sull' i -esima particella esercitata dalla j -esima. L'equazione di stato si ottiene nel modo seguente. Dalle equazioni di moto⁹ si ottiene la relazione

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_i m_i \dot{\mathbf{x}}_i \cdot \mathbf{x}_i \right) - 2K_{tot} = \sum_i \mathbf{F}_i^{ext} \cdot \mathbf{x}_i + \sum_{j, i \neq j} \mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{x}_i . \quad (4)$$

Ora si noti che la media temporale di una derivata è trascurabile, in quanto¹⁰

$$\frac{1}{\bar{t}} \int_0^{\bar{t}} \frac{d}{dt} f(t) dt = \frac{f(\bar{t}) - f(0)}{\bar{t}} \rightarrow 0, \quad \text{per } \bar{t} \rightarrow +\infty .$$

Dunque, mediando nel tempo entrambi i membri della (4), si ottiene

$$-2\bar{K}_{tot} = \overline{\sum_i \mathbf{F}_i^{ext} \cdot \mathbf{x}_i} + \overline{\sum_{i, j \neq i} \mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{x}_i} , \quad (5)$$

dove il primo addendo del termine a destra è detto *viriale* delle forze esterne, ed il secondo viriale delle forze interne, e con la barra si è indicata l'operazione di media temporale. Per ricavare l'equazione di stato del gas perfetto, per prima cosa si ammette che il viriale delle forze interne sia trascurabile, in quanto si ammette che per densità sufficientemente basse le molecole urtino più frequentemente con le pareti che non fra di loro.¹¹ Per valutare il viriale delle forze esterne, ricordiamo che avevamo definito la pressione mediante la media temporale della componente normale della forza che una porzione di parete $d\sigma$ esercita sul gas, cioè, detta \mathbf{n} la normale alla parete, avevamo posto

$$p \mathbf{n} d\sigma_k \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\sum_i \mathbf{F}_{i,k}^{ext}} ,$$

dove $\mathbf{F}_{i,k}^{ext}$ è la forza che l'areola $d\sigma_k$ esercita sull' i -esima particella. Dividendo la superficie del contenitore in un certo numero di areole $d\sigma_k$ locate nei punti \mathbf{r}_k , si otterrà

$$\overline{\sum_i \mathbf{F}_i^{ext} \cdot \mathbf{x}_i} = \sum_k p \mathbf{r}_k \cdot \mathbf{n} d\sigma_k \rightarrow \int_{\partial V} p \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} d\sigma ,$$

⁹Basta moltiplicare ogni equazione del moto scalarmente per \mathbf{x}_i , usare l'identità $\dot{\mathbf{x}}_i \cdot \mathbf{x} = \frac{d}{dt} (\dot{\mathbf{x}}_i \cdot \mathbf{x}_i) - \dot{\mathbf{x}}_i \cdot \dot{\mathbf{x}}_i$ e poi sommare su i .

¹⁰Si ammette che la funzione f sia limitata.

¹¹Tener conto delle mutue interazioni tra molecole è il principale problema della *teoria dei gas reali*. La teoria (fenomenologica) più semplice porta all'equazione di stato di **van Der Waals**, che è nella forma

$$nRT = (V - nb) \left(p - \frac{an^2}{V^2} \right) ,$$

dove i coefficienti a e b sono appunto legati alla natura delle forze interne del gas.

dove, ricordando che la forza $F_{i,k}^{ext}$ è non nulla solo in prossimità dell'areola, si è posto $\mathbf{x}_i = \mathbf{r}_k$.¹² Ora, se ammettiamo che i dati iniziali generici diano una pressione p costante sulla superficie del contenitore, usando il teorema di Stokes, otteniamo

$$\int_{\partial V} p \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} d\sigma = p \int_{\partial V} \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} d\sigma = -p \int_V \operatorname{div} \mathbf{r} d^3\mathbf{r} = -3pV.$$

Sostituendo nella (5) si ottiene l'equazione di stato nella forma

$$pV = \frac{3}{2} \overline{K}_{tot}, \quad (6)$$

che è analoga alla (3).

Questi due esempi giustificano la seguente

Definizione 1 *Le variabili macroscopiche si devono identificare con le medie temporali di opportune variabili dinamiche.*

Dunque, dato un generico sistema dinamico (\mathcal{M}, Φ^t) (Φ^t essendo un gruppo ad un parametro di diffeomorfismi dello spazio delle fasi \mathcal{M}), la teoria ergodica ha come oggetto di studiare le medie temporali delle variabili dinamiche. Nei paragrafi seguenti esporremo i risultati più elementari di tale studio.

§4. Dipendenza delle Medie Temporali dai dati iniziali. Come detto nel paragrafo precedente, si assume che le quantità macroscopiche siano le medie temporali di opportune variabili dinamiche

$$\overline{F}(x_0) = \frac{1}{\bar{t}} \int_0^{\bar{t}} F(x(t)) dt,$$

dove $x_0 = x(0)$ è il dato iniziale che determina la traiettoria, cioè l'insieme delle velocità e posizioni iniziali di tutte le particelle che compongono il sistema. Qui $x(t) \stackrel{\text{def}}{=} \Phi^t x_0$ denota il movimento con dato iniziale x_0 . L'espressione precedente mostra che le medie temporali dovrebbero dipendere da un gran numero di parametri (cioè dallo stato microscopico del sistema), mentre sperimentalmente si osserva che le medie in realtà dipendono da pochi parametri macroscopici (ad esempio l'energia totale – che sappiamo essere associata alla temperatura – ed il volume). Come si può risolvere questa contraddizione?

Storicamente la prima risposta è stata data da Boltzmann, che a tal fine introdusse la cosiddetta *ipotesi ergodica*. Per illustrarla incominceremo con una discussione euristica del problema. Notiamo innanzitutto che, per quanto detto sulle differenze tra scale di tempo microscopiche e macroscopiche, si può ritenere che valga

$$\overline{F}(x_0) \simeq \lim_{\bar{t} \rightarrow +\infty} \frac{1}{\bar{t}} \int_0^{\bar{t}} F(x(t)) dt;$$

¹²Ricordo che le medie temporali sono integrali lungo l'orbita del sistema, ma l'integrando è nullo se $\mathbf{x}(t)_i \neq \mathbf{r}_k$ perché allora le forze sono nulle.

l'ipotesi ergodica postula che le medie temporali su tempo infinito dipendano unicamente dall'energia del sistema, in quanto, per i sistemi interessanti per la termodinamica, Boltzmann riteneva che le orbite fossero in qualche modo dense sulla superficie dell'energia.¹³ Torneremo nel seguito ad una analisi piú approfondita di questa ipotesi; mostriamo ora la tremenda semplificazione che una ipotesi di questo tipo comporta, supponendo (per fissare le idee) che la media temporale $\bar{F}(x_0)$ sia costante in una certa regione A , e nulla nel suo complementare.

Faremo uso del Teorema di Liouville, che è una fondamentale proprietà della dinamica Hamiltoniana. Nel caso in cui $\mathcal{M} = \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$ (che è quello dei sistemi che stiamo considerando, costituiti da N particelle), esso si formula al modo seguente¹⁴

Teorema 1 (di Liouville) *Per i sistemi hamiltoniani, il volume di ogni insieme A (misurabile) dello spazio delle fasi è un invariante del moto, ossia, detto $\Phi^t A$ l'evoluto dell'insieme A mediante il flusso, vale*

$$\int_A dx = \int_{\Phi^t A} dx, \tag{7}$$

dove dx è l'usuale misura di Lebesgue. In altri termini vale

$$|\det D\Phi^t x| = 1 \quad \forall t. \tag{8}$$

Osservazione. In questo caso si dice anche che la misura di Lebesgue è *invariante* per il flusso Φ^t . In generale una misura μ ¹⁵ si dirá invariante per il flusso se vale $\mu(A) = \mu(\Phi^{-t}A)$, per ogni tempo t e per ogni insieme misurabile A .

Dimostrazione. Una dimostrazione elementare si può trovare nel capitolo secondo delle dispense di Meccanica Razionale 1 dei medesimi autori. Una dimostrazione meno elementare ma piú breve è la seguente. La relazione (7) equivale alla relazione

$$\frac{d}{dt} \int_{\Phi^t A} dx = 0. \tag{9}$$

Sia $B \stackrel{\text{def}}{=} \Phi^t A$, allora si ha (essendo $\chi_B(x)$ la funzione caratteristica dell'insieme B)¹⁶

$$\int_{\Phi^{dt} B} dx = \int_{\mathcal{M}} \chi_{\Phi^{dt} B}(x) dx = \int_{\mathcal{M}} \chi_B(\Phi^{-dt} x) dx,$$

¹³Anzi, Boltzmann riteneva che le superfici di energia costante fossero costituite da un'unica orbita (*ipotesi ergodica in senso stretto*).

¹⁴Nel caso generale in cui lo spazio delle fasi sia una varietà, risulta piú complesso definire l'integrale, perché ciò richiede l'introduzione di quelle che vengono chiamate le *forme di volume*.

¹⁵Una misura μ è una funzione che assegna un valore positivo ad ogni insieme $A \in \mathcal{A}$ di una famiglia \mathcal{A} di insiemi. La famiglia \mathcal{A} di insiemi deve godere di alcune proprietà (essere chiusa per intersezione, unione e complementazione), mentre μ deve essere numerabilmente additiva, cioè deve valere $\mu(\bigcup_{n=0}^{+\infty} A_n) = \sum_{n=0}^{+\infty} \mu(A_n)$ se gli insiemi A_n sono a due a due disgiunti.

¹⁶Si usa $\chi_{\Phi^t B}(x) = \chi_B(\Phi^{-t}x)$.

o anche, denotando con $v(x)$ il campo vettoriale hamiltoniano,

$$\int_{\Phi^{dt}B} dx = \int_{\mathcal{M}} \chi_B(x - v(x)dt + O(dt^2)) dx ,$$

in quanto vale $\Phi^{-dt}x = x - v(x)dt + O(dt^2)$. Sia ora $F_n(x)$ una successione di funzioni regolari a supporto compatto che converge (in norma L^1) alla funzione $\chi_B(x)$. Ora

$$\int_{\mathcal{M}} F_n(x - v(x)dt + O(dt^2)) dx = \int_{\mathcal{M}} F_n(x) dx - dt \int_{\mathcal{M}} v_i(x) \partial_{x_i} F_n(x) dx + O(dt^2) .$$

Essendo per i campi hamiltoniani $\operatorname{div}v = 0$, si ha $v_i \partial_{x_i} F_n = \operatorname{div}(v F_n)$, e troviamo quindi

$$\int_{\mathcal{M}} v_i(x) \partial_{x_i} F_n(x) dx = \int_{\mathcal{M}} \operatorname{div}(v(x) F_n(x)) dx = 0 ,$$

dove l'ultima eguaglianza segue dal teorema di Stokes e dal fatto che F_n , essendo a supporto compatto è nulla all'infinito. Passando al limite trovo

$$\int_{\Phi^{dt}B} dx = \int_{\mathcal{M}} \chi_B(x) dx + O(dt^2) = \int_B dx + O(dt^2)$$

ovvero la derivata $\frac{d}{dt} \int_B dx$ è nulla, che è la (9).

Infine, dalla (7) segue immediatamente la (8) effettuando il cambiamento di variabile $y = \Phi^{-t}x$. Vale infatti

$$\int_A dx = \int_{\Phi^t A} dx = \int_A |\det D\Phi^t x| dy ,$$

per ogni insieme A , da cui segue appunto $|\det D\Phi^t x| = 1$.

Q.E.D.

Torniamo ora al problema di valutare la media temporale $\bar{F}(x_0)$ utilizzando l'ipotesi ergodica. Preliminarmente, usando il Teorema di Liouville, si mostra facilmente che l'integrale della media temporale di una qualunque funzione $F(x)$ (a supporto compatto) risulta eguale all'integrale della funzione medesima, si ha cioè

$$\int_{\mathcal{M}} \bar{F}(x_0) dx_0 = \int_{\mathcal{M}} F(x) dx . \quad (10)$$

Infatti, scambiando l'integrale rispetto al tempo con l'integrale sui dati iniziali otteniamo

$$\int_{\mathcal{M}} \bar{F}(x_0) dx_0 = \frac{1}{t} \int_{\mathcal{M}} dx_0 \int_0^{\bar{t}} dt F(x(t)) = \frac{1}{t} \int_0^{\bar{t}} dt \int_{\mathcal{M}} F(x(t)) dx_0 ;$$

ora, operiamo nell'ultimo integrale il cambiamento di variabile $x = \Phi^t x_0$, e poiché per il teorema di Liouville vale $dx_0 = dx$, si ottiene

$$\int_{\mathcal{M}} \bar{F}(x_0) dx_0 = \frac{1}{t} \int_0^{\bar{t}} dt \int_{\mathcal{M}} F(x) dx = \int_{\mathcal{M}} F(x) dx ,$$

dato che $\int_{\mathcal{M}} F(x) dx$ è indipendente dal tempo.

Usiamo ora l'ipotesi provvisoria fatta sopra che $\bar{F}(x_0)$ sia indipendente dal dato iniziale x_0 in una certa regione $A \in \mathcal{M}$, e nulla nel complementare. Allora si ha che per ogni $x_0 \in A$ vale

$$\int_{\mathcal{M}} \bar{F}(x_0) dx_0 = \text{Vol}(A) \bar{F}(x_0),$$

e quindi usando la relazione (10) otteniamo

$$\bar{F} = \langle F \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\int_{\mathcal{M}} F(x) dx}{\text{Vol}(A)}. \quad (11)$$

Detto a parole, otteniamo che la media temporale coincide con la *media in fase*, cioè l'integrale temporale lungo una traiettoria del sistema coincide con l'integrale della funzione sullo spazio delle fasi. L'enorme semplificazione consiste nel fatto che non è necessario conoscere l'evoluzione del sistema (la soluzione delle equazioni del moto) per poter calcolare le medie temporali, ma basta saper calcolare degli integrali definiti, un compito molto meno complicato. Inoltre questa semplificazione è efficace proprio dove è impossibile determinare le orbite del sistema. Si pensi all'esempio dello standard map discusso nel Capitolo 1, per un valore del parametro ϵ tale che ogni orbita riempia uniformemente il quadrato (vedi ad esempio la figura ...). Mentre evidentemente non si riesce a dare un'espressione per l'orbita, è molto naturale ritenere che la media temporale coincida con la media della funzione sul quadrato.

In definitiva Boltzmann propone di sostituire le medie temporali con le medie in fase. Uno dei problemi matematici della teoria ergodica consiste nel caratterizzare i sistemi per cui ciò è possibile. Una risposta è fornita dal teorema ergodico di Birkhoff che ora andiamo ad enunciare. Prima però abbiamo bisogno di una definizione.

Definizione 2 Il flusso Φ^t è detto metricamente indecomponibile se ogni sottoinsieme invariante A (cioè con $\Phi^t A = A$) di \mathcal{M} è banale, cioè ha misura nulla oppure ha misura nulla il suo complementare $\mathcal{M} \setminus A$.

In sostanza il flusso è metricamente indecomponibile se Φ^t non ammette costanti del moto (misurabili). Infatti se f è una costante del moto (cioè se $f(\Phi^t x_0) = f(x_0)$ per tutti i t , e quasi tutti gli x_0), gli insiemi del tipo $A = \{x \in \mathcal{M} : f(x) < \text{cost}\}$ sono insiemi invarianti misurabili ed in generale di misura non nulla. Sembrerebbe allora che i flussi hamiltoniani (quelli di interesse per la termodinamica) non siano metricamente indecomponibili, in quanto ammettono sempre l'hamiltoniana stessa come costante del moto. Rimandiamo questa discussione ad una osservazione dopo l'enunciato del seguente Teorema.

Teorema 2 (Ergodico di Birkhoff) Sia μ una misura invariante per il flusso hamiltoniano Φ^t , con $\mu(\mathcal{M}) < +\infty$. Allora per ogni funzione integrabile $f(x)$ il

limite

$$\bar{f}(x_0) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\bar{t} \rightarrow +\infty} \frac{1}{\bar{t}} \int_0^{\bar{t}} f(\Phi^t x_0) dt$$

esiste per quasi ogni x_0 . Inoltre, se Φ^t è metricamente indecomponibile, allora per quasi ogni x_0 la media temporale coincide con la media in fase, vale cioè

$$\bar{f}(x_0) = \langle f \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\int_{\mathcal{M}} f(x) d\mu}{\mu(\mathcal{M})}.$$

Osservazione (Il Teorema di Birkhoff per i sistemi Hamiltoniani). Come abbiamo detto, sembrerebbe che il teorema di Birkhoff non si applichi ai flussi hamiltoniani. Notiamo però che ci possiamo restringere alla superficie di energia costante, ed introdurre su queste superfici una misura ereditata da quella di Lebesgue, che risulta essere invariante¹⁷. Questa misura viene chiamata *misura microcanonica o insieme microcanonico*. Allora, se non esistono altre costanti del moto *oltre l'energia*, il flusso risulta indecomponibile sulla superficie $E = \text{cost}$, per cui le medie temporali risulteranno eguali alle medie in fase ristrette alla superficie dell'energia. Ne segue dunque che le medie temporali risulteranno funzioni solamente dell'energia totale, che nella nostra interpretazione risulta essere un parametro macroscopico. L'applicabilità del teorema di Birkhoff ai sistemi hamiltoniani risulta quindi ricondotto alla domanda se esistano altri integrali primi oltre all'energia.

L'approccio al problema delle medie temporali tramite il teorema di Birkhoff (considerandole cioè come medie su di un tempo infinito) non è l'unico possibile. Inoltre esso non risulta soddisfacente per trattare il problema dell'avvicinamento all'equilibrio. Infatti sperimentalmente si osserva che i valori delle variabili macroscopiche generalmente variano nel tempo fino a portarsi al loro valore di equilibrio, mentre la dipendenza temporale viene persa se il loro valore viene definito tramite una media temporale su tempo infinito. Dunque, è giocoforza definire i valori delle quantità macroscopiche come medie temporali su un tempo lungo, ma finito, ed allora il teorema di Birkhoff non si applica più. È possibile però un altro approccio che si riconduce al teorema ergodico di Von Neumann, che per gli autori risulta più soddisfacente. Esso verrà illustrato nei prossimi paragrafi.

§5. Distribuzione di Probabilità dei dati iniziali. Vogliamo dunque considerare le medie temporali fino ad un tempo \bar{t} grande (rispetto ai tempi microscopici) ma fissato, cioè considerare le quantità

$$\bar{f}(x_0) = \frac{1}{\bar{t}} \int_0^{\bar{t}} f(\Phi^t x_0) dt,$$

¹⁷Senza dimostrazione riportiamo che questa misura è data da $d\sigma/|\text{grad}H|$ dove $d\sigma$ è l'ordinaria misura di superficie.

dove sottointendiamo la dipendenza dal parametro \bar{t} . Ora, i dati iniziali x_0 non risultano accessibili sperimentalmente, e potremo solamente fornire la valutazione della probabilità che essi si trovino in una data regione dello spazio delle fasi. In questo modo anche la $\tilde{f}(x_0)$ diventa una variabile stocastica¹⁸, perchè i suoi valori non risultano essere fissati, ma vengono assunti con diversa probabilità (in dipendenza della distribuzione di probabilità che assegnamo ai dati iniziali x_0). Ci si deve aspettare quindi che, se effettuiamo misure a tempi diversi, anche in uno stato di equilibrio, si riscontreranno valori (leggermente) diversi. In altre parole ci si deve attendere che anche all'equilibrio le variabili macroscopiche *fluttuino* leggermente attorno al loro valore medio. Quello che richiediamo allora è che, all'equilibrio, la distribuzione di probabilità di $\tilde{f}(x_0)$ sia indipendente dal tempo. Questo in particolare implica che la distribuzione di equilibrio μ_{eq} per i dati iniziali sia indipendente dal tempo. Bisogna dunque risolvere i due problemi seguenti:

1. Come dare sui dati iniziali delle distribuzioni di probabilità μ che siano indipendenti dal tempo, cioè siano di equilibrio.
2. Se la distribuzione iniziale μ_0 non è di equilibrio, e quindi dà luogo ad una distribuzione di probabilità μ_t dipendente dal tempo, mostrare sotto quali condizioni μ_t converga alla distribuzione di equilibrio.

Esempio:

Supponiamo di mescolare un bicchiere di acqua con un cucchiaino. Allora, appena tolgo il cucchiaino dall'acqua ho un vortice al centro del bicchiere. Dunque la distribuzione di probabilità che scelgo per i dati iniziali microscopici deve tenere conto del fatto che la velocità \mathbf{v} del fluido e la posizione \mathbf{x} non sono scorrelate, ma si deve avere $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \omega \wedge \mathbf{x}$ (ω è la vorticità). C'è un moto d'assieme del fluido, e i dati microscopici devono tenerne conto; ho un vincolo sulle possibili configurazioni microscopiche, che deve rispecchiarsi nella scelta della distribuzione iniziale μ_0 . Col passare del tempo la vorticità, che inizialmente è concentrata al centro del bicchiere, comincia a diffondere fino a che la velocità (macroscopica) del fluido si annulla. In questa situazione l'unico vincolo è quello dell'energia fissata. Dal punto di vista macroscopico devo ritenere che tutte le possibili configurazioni microscopiche che rispettano questo vincolo siano egualmente probabili. È questa la distribuzione di equilibrio.

In tutti questi ragionamenti risulta essenziale sapere come evolve la probabilità. Per determinare la legge di evoluzione di μ , ricorriamo al seguente ragionamento dovuto a Poincaré. Se supponiamo che ad un evento E_1 al tempo $t = 0$ segua necessariamente l'evento E_2 al tempo t , ed inoltre che l'evento E_2 non possa accadere senza che prima accada E_1 (ad esempio non ci può essere il tuono senza che prima ci sia stato il lampo), dobbiamo assegnare agli eventi E_1

¹⁸I termini variabile stocastica, variabile casuale e *random variable* sono sinonimi.

ed E_2 la medesima probabilità, cioè

$$p(E_1) = p(E_2).$$

Ora all'evento E_1 corrisponde un certo insieme $A \subset \mathcal{M}$ e si ha $p(E_1) = \mu_0(A)$, dove μ_0 è la distribuzione di probabilità al tempo $t = 0$. Analogamente ad E_2 corrisponde un insieme $B \subset \mathcal{M}$ con $p(E_2) = \mu_t(B)$, essendo μ_t la distribuzione di probabilità al tempo t . In una visione deterministica, gli eventi E_1 ed E_2 sono equivalenti solo se $B = \Phi^t A$, per cui da $p(E_1) = p(E_2)$ segue $\mu_0(A) = \mu_t(B)$, e poiché $A = \Phi^{-t} B$, si ottiene la legge fondamentale di evoluzione

$$\mu_t(B) = \mu_0(\Phi^{-t} B). \quad (12)$$

Osservazione. Non vorremmo enfatizzare troppo il ragionamento che ci ha portato alla relazione (12). Di fatto essa viene postulata e non dedotta. La (12) rappresenta un particolarissimo processo stocastico, in particolare a diffusione nulla. Se vogliamo, essa non è altro che la definizione di processo stocastico deterministico. In teoria delle probabilità vengono studiati processi stocastici più generali, come ad esempio il famoso *moto browniano*.

Dalla (12) segue un utilissimo teorema che, per i flussi hamiltoniani, caratterizza completamente le misure di probabilità che ammettono densità (rispetto alla misura di Lebesgue)

Teorema 3 *La densità ρ di una distribuzione di probabilità è una costante del moto (dipendente in generale dal tempo), soddisfa cioè a*

$$\partial_t \rho + \{\rho, H\} = 0, \quad (13)$$

dove abbiamo indicato con $\{.,.\}$ la parentesi di Poisson, e con H l'hamiltoniana del sistema.

Dimostrazione. Nel caso in cui la misura di probabilità μ ammette densità ρ , la (12) si scrive come

$$\int_{\Phi^t A} \rho(x, t) dx = \int_A \rho(x, 0) dx,$$

oppure, operando il cambiamento di variabile $x = \Phi^t x_0$ al membro di sinistra, nel modo seguente (con $x(t) = \Phi^t x_0$)

$$\int_A \rho(x(t), t) dx_0 = \int_A \rho(x, 0) dx,$$

poiché per il Teorema di Liouville si ha $dx = dx_0$. Allora, prendendo la derivata rispetto al tempo otteniamo

$$\int_A \left(\partial_t \rho + \{\rho, H\} \right) dx_0 = 0,$$

e poiché l'insieme A è arbitrario segue la tesi.

Q.E.D.

Come utile corollario ricaviamo che le distribuzioni stazionarie (cioè con $\partial_t \rho = 0$) sono costanti del moto, soddisfano cioè la relazione $\{\rho, H\} = 0$. In particolare ogni funzione di H fornisce una distribuzione stazionaria di probabilità. Le due distribuzioni più usate sono la cosiddetta distribuzione **microcanonica** e quella **canonica**. La distribuzione microcanonica si ottiene assumendo che l'energia del sistema sia nota e pari ed E , mentre per il resto tutte le configurazioni compatibili siano equiprobabili: la distribuzione assume la forma $\mu = \delta(H(x) - E)$ dove con $\delta(x)$ abbiamo indicato la funzione delta di Dirac. La distribuzione canonica è invece definita dalla densità¹⁹

$$\rho = \frac{\exp(\beta H(x))}{Z(\beta)}, \quad (14)$$

dove $Z(\beta)$ è una costante di normalizzazione evidentemente data da

$$Z(\beta) = \int_{\mathcal{M}} \exp(-\beta H(x)) dx,$$

mentre β è un parametro legato all'energia media, che viene interpretato come

$$\beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Osservazione (Il teorema di Krylov-Bogolubov). Si deve notare che le misure costruite nella maniera sopra indicata non sono le più generali misure invarianti. Vi sono infinite altre misure invarianti che non sono assolutamente continue rispetto alla misura di Lebesgue, cioè non si possono esprimere mediante una densità che sia integrabile (rispetto alla misura di Lebesgue). Un esempio tipico di misura non assolutamente continua è fornito dalla delta di Dirac. L'esistenza di infinite misure invarianti appare come corollario del teorema di Krylov e Bogolubov (1937) il quale stabilisce l'esistenza di almeno una misura invariante per diffeomorfismi generici di varietà. Tale risultato è illustrato nell'appendice A. L'essenza del metodo di Krylov e Bogolubov per la costruzione di tali misure invarianti consiste nel prendere la media temporale di una qualunque misura di partenza, e nel dimostrare che tale media temporale di misure converge in un senso opportuno. Quindi tale teorema costituisce in un certo senso un ampliamento del teorema ergodico di Birkhoff.

§6. Il teorema del ritorno di Poincaré. Discuteremo qui una proprietà generale della dinamica che discende solamente dall'esistenza di una distribuzione di

¹⁹NOTA PER GLI AUTORI. Discussione di Renyi sulla probabilità a condizionata.

probabilità invariante. Si tratta del Teorema del ritorno di Poincaré. L'enunciato è il seguente:²⁰

Teorema 4 (del ritorno di Poincaré) *Per ogni insieme A di misura positiva, l'orbita di ogni punto di A con certezza ritorna infinite volte nell'insieme A .*

La locuzione *con certezza* nell'enunciato del teorema, ha il significato consueto della teoria delle probabilità, cioè significa che l'insieme dei punti per cui l'orbita visita solo un numero finito di volte l'insieme A ha misura nulla. Altrimenti detto, scelto a caso un dato iniziale, con probabilità pari ad uno, l'orbita tornerà infinite volte nell'insieme A . Questo mostra che per una generica funzione f , la funzione $f(\Phi^t x)$ non converge a niente, in quanto i suoi valori continuano ad oscillare per sempre, tornando ad avere ogni volta il valore che aveva all'inizio. Da qui la necessità di considerare la media temporale, se vogliamo avere quantità macroscopiche che ammettano limite al crescere del tempo.

Inoltre, ci si convince che l'enunciato del Teorema di Birkhoff sull'esistenza della media temporale su tempi infiniti è tutt'altro che banale.

Diamo ora la dimostrazione del Teorema del ritorno per le mappe (flussi discreti), che risulta più chiara. La dimostrazione richiede la conoscenza di alcuni fatti relativi alla teoria della misura e non è quindi elementare; risulta però molto intuitiva e può quindi essere seguita facilmente

Dimostrazione. Cominciamo a considerare il sottoinsieme N_1 dei punti di A che non ritornano mai in A , e mostriamo che esso ha misura (probabilità) nulla. Notiamo anzitutto che gli insiemi $\Phi^n N_1$ evoluti di N_1 , con $n \in \mathbb{N}$, sono a due a due disgiunti. Infatti se esistesse $x \in \Phi^n N_1 \cap \Phi^m N_1$ allora $\Phi^{-m} x \in \Phi^{n-m} N_1 \cap N_1$,²¹ cioè $\Phi^{-m} x$ sarebbe un punto di N_1 che ritorna, dopo $n - m$ iterazioni, di nuovo in N_1 cioè in A (perché N_1 è un sottoinsieme di A), contro l'ipotesi che i punti di N_1 non ritornano. Poiché Φ conserva la misura vale $\mu(\Phi^n N_1) = \mu(N_1)$.

Mostriamo ora che $\mu(N_1) = 0$. Consideriamo l'unione $\bigcup_n \Phi^n N_1$ degli evoluti $\Phi^n N_1$ dell'insieme N_1 . Poiché tali insiemi sono a due a due disgiunti la misura dell'unione (che è finita, minore di $\mu(\mathcal{M}) = 1$) sarà eguale alla somma delle misure dei singoli evoluti. Si ha quindi

$$1 \geq \mu\left(\bigcup_{n=0}^{+\infty} \Phi^n N_1\right) = \sum_{n=0}^{+\infty} \mu(\Phi^n N_1) = \sum_{n=0}^{+\infty} \mu(N_1),$$

e quindi deve essere $\mu(N_1) = 0$. Se definiamo ora $A_1 = A \setminus N_1$, cioè il complementare di N_1 in A , ovvero l'insieme dei punti di A che ritornano almeno una volta, allora abbiamo mostrato che si ha $\mu(A_1) = \mu(A)$.

²⁰H. Poincaré, *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, Blanchard (Paris, 1987), tomo 3° paragrafo 297, pagine 155-157; C. Carathéodory, *Über den Wiederkehrssatz von Poincaré*, Berl. Ber. 1919, 580-584.

²¹Si usa la proprietà che l'immagine inversa dell'intersezione coincide con l'intersezione delle immagini inverse.

Iteriamo ora il procedimento, definendo, per ogni intero k , l'insieme N_k dei punti di A_{k-1} che non ritornano in A_{k-1} , e l'insieme $A_k \stackrel{\text{def}}{=} A_{k-1} \setminus N_k$ dei punti che ritornano almeno k volte in A . Con un ragionamento analogo al precedente si trova che $\mu(N_k) = 0$ e dunque $\mu(A_k) = \mu(A)$.

Allora l'insieme $A_\infty = A \setminus \bigcup_k N_k$ risulta essere l'insieme dei punti che ritornano un numero infinito di volte in A , e poiché l'unione (numerabile) di insiemi di misura nulla ha misura nulla, segue che $\mu(A_\infty) = \mu(A)$, cioè la tesi. Q.E.D.

Il teorema del ritorno ha sempre creato molti dubbi sulla possibilità di interpretare la termodinamica mediante una teoria microscopica (reversibile). A questo proposito dobbiamo ricordare il *paradosso di Zermelo*, che ora illustriamo.

Consideriamo un contenitore separato in due cavità che possono essere messe in collegamento mediante un rubinetto. Supponiamo che inizialmente in una cavità sia contenuto del gas, mentre l'altra cavità sia vuota. Se ad un certo punto si apre il rubinetto che collega le due cavità, il gas fluisce verso la cavità vuota fino a quando si raggiunge nelle due cavità la medesima pressione. Ora allo stato di partenza (il gas tutto in una cavità) corrisponde una certa regione dello spazio delle fasi, per cui, secondo il Teorema del ritorno, con certezza il sistema ritornerà (ed infinite volte) in questa regione dello spazio delle fasi. In altri termini il gas ritornerà a ricompimersi da solo nella cavità di partenza, contro l'intuizione, contro i risultati sperimentali e contro il secondo principio della termodinamica.

La risposta che di solito si oppone, seguendo Boltzmann,²² ha il suo fondamento nel teorema²³ che ora andiamo ad enunciare (per le mappe).

Teorema 5 (Kac (1947)) *Sia Φ un diffeomorfismo dello spazio delle fasi \mathcal{M} , con misura invariante μ , che sia ergodico. Fissato un insieme $A \subset \mathcal{M}$, per ogni $x \in A$ indichiamo con $n(x)$ il tempo di primo ritorno in A per l'orbita con dato iniziale x , ovvero il più piccolo intero per cui si ha $\Phi^n x \in A$. Allora si ha*

$$\int_A n(x) d\mu = 1. \quad (15)$$

La relazione (15) (dividendo ambedue i membri per $\mu(A)$) si può rileggere dicendo che il tempo medio di primo ritorno in un insieme A è inversamente proporzionale alla misura dell'insieme stesso (più l'insieme è piccolo, più i tempi si allungano). Nell'esempio di Zermelo del gas, se si prendono le cavità uguali risulta che la misura della regione in cui il gas è tutto in una cavità ha probabilità pari a $1/2^N$, dove N è il numero di particelle che compongono il gas.²⁴ Questo

²²Si veda L. Boltzmann, *La teoria cinetica dei gas*, parte finale

²³M. Kac, *On the notion of recurrence in discrete stochastic processes*, Bull. Amer. Math. Soc. **53**, 1002–1010 (1947).

²⁴Infatti ogni molecola del gas ha probabilità $1/2$ di essere in una delle due metà del contenitore. Se assumiamo che nel gas la probabilità delle molecole siano essenzialmente indipendenti, allora la probabilità che ogni molecola sia nella stessa cavità è semplicemente il prodotto delle probabilità, da cui segue il valore dato nel testo.

numero è molto più che astronomicamente piccolo (dell'ordine di $10^{-10^{23}}$), per cui in media bisognerà aspettare un tempo astronomicamente lungo perchè si abbia il ritorno. Viceversa fissata una scala di tempi (la durata della vita umana), la probabilità che il tempo di primo ritorno sia minore di questo tempo, è astronomicamente piccola. Se si accetta il punto di vista che gli eventi di probabilità trascurabile non accadono, il paradosso di Zermelo si dissolve.

Riporteremo la dimostrazione del teorema nell'Appendice 1. Nell'articolo citato in nota, Kac da una dimostrazione di natura essenzialmente probabilistica, che risulta particolarmente intuitiva. Poichè però non tutti i lettori sono familiari con la teoria dei processi stocastici noi la riscriveremo usando gli insiemi e la teoria della misura.

§7. L'evoluzione come operatore unitario sulle osservabili. Nel teorema ergodico di von Neumann, si cambia un po' la prospettiva, perchè invece di concentrarsi sul flusso Φ^t nello spazio delle fasi (che risulta inosservabile per ipotesi) ci si concentra sull'evoluzione *delle osservabili*, cioè sul cambiamento dei valori delle variabili dinamiche dovuto all'evoluzione del sistema. L'approccio non risulta dei più elementari perchè si fa un certo uso di proprietà degli spazi di Hilbert, che sono presupposte conosciute. In realtà, però, la presentazione diviene del tutto intuitiva se si pensa ogni formula come ambientata in uno spazio di Hilbert finito dimensionale (come ad esempio il familiare spazio euclideo tridimensionale).

Gli spazi di Hilbert entrano in gioco perchè ci si concentra sull'insieme delle funzioni che siano a quadrato sommabile (o quadrato integrabile), tali cioè che

$$\int_{\mathcal{M}} |f(x)|^2 d\mu < +\infty .$$

Le funzioni a quadrato integrabile sono significative nel nostro caso, perchè per tali funzioni la media temporale $\bar{f}(x_0)$, come variabile stocastica, risulta avere finiti non solo la media, ma anche lo scarto.²⁵

Come è noto, lo spazio vettoriale delle funzioni $L^2(d\mu)$ diviene uno spazio di Hilbert se si introduce il prodotto interno

$$\langle f, g \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{M}} f(x)g^*(x) d\mu ,$$

dove abbiamo indicato con $g^*(x)$ il complesso coniugato di $g(x)$. Notiamo che il prodotto interno, dal punto di vista probabilistico, è strettamente collegato alla

²⁵Si osservi anzitutto che, poiché \mathcal{M} ha misura totale finita, le funzioni a quadrato integrabile, sono anche integrabili (a differenza di quanto succede per esempio per le funzioni su \mathbb{R} .) Infatti usando la disuguaglianza di Schwartz si ha

$$\int_{\mathcal{M}} |f(x)| d\mu \leq \left[\int_{\mathcal{M}} |f(x)|^2 d\mu \right]^{1/2} \left[\int_{\mathcal{M}} d\mu \right]^{1/2} \leq \|f\|$$

Dunque esiste finita la media $\langle f \rangle = \int_{\mathcal{M}} f(x) d\mu$. Anche lo scarto quadratico medio, dato da $\delta_f^2 = \int_{\mathcal{M}} f^2(x) d\mu - \langle f \rangle^2$ sarà dunque finito.

correlazione delle funzioni $f(x_0)$, $g(x_0)$ viste come variabili stocastiche (si veda più avanti). L'ambientazione in uno spazio di Hilbert risulta quindi del tutto naturale in un ambito stocastico.

Nel seguito considereremo solo flussi discreti, cioè orbite generate dalla iterazioni di una mappa. Tutte le considerazioni che faremo valgono anche per i flussi continui, anche se le dimostrazioni diventano tecnicamente più complicate.

Definiamo ora l'operatore $\hat{\mathcal{U}}_n$ di evoluzione delle funzioni, in modo naturale, valutando come evolvono i loro valori lungo le traiettorie del sistema, ponendo cioè

$$\hat{\mathcal{U}}_n f(x) = f(\Phi^n x). \quad (16)$$

È semplice verificare che gli operatori $\hat{\mathcal{U}}_n$ godono della proprietà grupale, cioè che vale $\hat{\mathcal{U}}_{n+m} = \hat{\mathcal{U}}_n \hat{\mathcal{U}}_m$, proprio in conseguenza dell'analoga proprietà grupale per l'evoluzione Φ^n sullo spazio delle fasi. Questo in particolare implica che

$$\hat{\mathcal{U}}_n = \hat{\mathcal{U}}_1^n,$$

cioè l'evoluzione (delle funzioni) al tempo n , si ottiene iterando n volte la trasformazione $\hat{\mathcal{U}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{U}}_1$.

Le due proprietà dell'operatore $\hat{\mathcal{U}}$ che giocheranno un ruolo importante nel seguito sono:

1. L'operatore $\hat{\mathcal{U}}$ è **lineare**. Infatti se considero la funzione $h(x) = \alpha f(x) + \beta g(x)$, allora vale

$$\hat{\mathcal{U}} h(x) = h(\Phi x) = \alpha f(\Phi x) + \beta g(\Phi x) = \alpha \hat{\mathcal{U}} f(x) + \beta \hat{\mathcal{U}} g(x).$$

Quindi mentre l'evoluzione del sistema nello spazio delle fasi è non lineare, l'evoluzione nello spazio delle osservabili è lineare. L'operatore $\hat{\mathcal{U}}$ inoltre è invertibile, perché lo è Φ , cioè si ha $\hat{\mathcal{U}}^{-1} f(x) = f(\Phi^{-1} x)$.

2. L'operatore $\hat{\mathcal{U}}$ è **unitario**, cioè conserva la norma delle funzioni, ovvero è l'analogo di una trasformazione ortogonale nello spazio euclideo tridimensionale. Questo segue dal fatto che la misura μ è invariante per Φ . Infatti vale

$$\|\hat{\mathcal{U}} f\|^2 = \int_{\mathcal{M}} |\hat{\mathcal{U}} f(x)|^2 d\mu = \int_{\mathcal{M}} |f(\Phi x)|^2 d\mu = \int_{\mathcal{M}} |f(y)|^2 d\mu = \|f\|^2,$$

dove si è operato il cambiamento di variabile $y = \Phi x$ nel secondo integrale, e si è usato il fatto che la misura μ è invariante. Questo semplice calcolo mostra che $\hat{\mathcal{U}}$ è isometrico.²⁶ Essendo invertibile, risulta poi che $\hat{\mathcal{U}}$ è anche unitario.

²⁶Negli spazi finito dimensionale non esiste differenza tra operatori isometrici e unitari. Negli spazi infinito dimensionale vi sono questione più sottili di dominio e codominio per cui risulta comodo introdurre due nozioni distinte.

Tutto questo dimostra il seguente

Teorema 6 (di Koopman (1930).) *Nello spazio delle osservabili, l'evoluzione è data da un gruppo ad un parametro di operatori lineari unitari.*

La parte più suggestiva del lavoro di Koopman sta nel fatto che si crea un parallelismo fortissimo con l'evoluzione quantistica come descritta dall'equazione di Schrödinger, che fornisce appunto un gruppo ad un parametro di operatori lineari unitari in un opportuno spazio di Hilbert. Naturalmente rimane diversa l'interpretazione fisica degli enti matematici.

§8. Il Teorema ergodico di von Neumann. Usando l'operatore $\hat{\mathcal{U}}$, la media temporale di una funzione si scrive in maniera molto suggestiva. Infatti si ha

$$\bar{f}(x_0) = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(\Phi^k x_0) = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \hat{\mathcal{U}}^k f(x_0) = \left(\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \hat{\mathcal{U}}^k \right) f(x_0). \quad (17)$$

Quindi il problema dello studio della media temporale è ricondotto allo studio dell'operatore $(1/n) \sum \hat{\mathcal{U}}^k$, cioè alla media della serie geometrica dell'operatore $\hat{\mathcal{U}}$. A questo proposito si ha il seguente fondamentale

Teorema 7 (ergodico di von Neumann (1931)) *L'operatore*

$$\hat{\mathcal{S}}_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \hat{\mathcal{U}}^k$$

converge, per $n \rightarrow \infty$, all'operatore $\hat{\mathcal{P}}$ di proiezione (ortogonale) sul sottospazio delle funzioni $f(x)$ invarianti per Φ .

Osservazione. Notiamo che le convergenze di cui si parla sono sempre convergenze nello spazio di Hilbert. Quindi con la frase $f_n(x)$ converge a $f(x)$ intendiamo dire che

$$\int_{\mathcal{M}} |f_n(x) - f(x)|^2 d\mu \rightarrow 0,$$

quando $n \rightarrow \infty$. In particolare la successione $f_n(x)$, per x fissato, può divergere, non ammettere limite, od anche convergere ad un valore diverso da $f(x)$. Fu Kolmogorov il primo a costruire una successione $f_n(x)$ convergente in norma L^2 ad $f(x)$ senza che vi convergesse puntualmente per alcun valore di x .

Osservazione. Il fatto che la media temporale di un operatore unitario converga ad un proiettore (che non è unitario), ha una portata più vasta che non l'ambito della teoria ergodica. Infatti esso ha dato origine alla teoria della *decoerenza quantistica*, cioè al problema se sia possibile in Meccanica Quantistica evitare il ricorso al postulato di precipitazione degli stati, pur di definire il processo di misura mediante medie temporali di operatori.

Dimostrazione. Si danno due casi semplici in cui il limite si riesce a calcolare subito. Il primo caso si ha quando $f(x)$ è una funzione invariante per $\hat{\mathcal{U}}$, cioè quando $\hat{\mathcal{U}}f(x) = f(x)$. In questo caso per ogni n si ha

$$\hat{\mathcal{S}}_n f(x) \equiv \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \hat{\mathcal{U}}^k f(x) = f(x),$$

per cui il limite è $f(x)$. L'altro caso è quello in cui f può essere scritta nella forma

$$f(x) = (\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}})g(x),$$

con una opportuna g . Questo caso si presenta spontaneamente quando si osserva che vale l'identità

$$\left(\frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \hat{\mathcal{U}}^k\right)(\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}}) = \left(\frac{1}{n} \sum_{k=0}^n (\hat{\mathcal{U}}^k - \hat{\mathcal{U}}^{k+1})\right) = \frac{1}{n}(\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}}^{n+1}),$$

la quale si ottiene osservando che il prodotto a primo membro dà una sommatoria telescopica in cui tutti i termini si elidono tranne il primo è l'ultimo. Allora se esiste una $g(x)$ tale che $f(x) = (\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}})g(x)$, usando l'identità precedente trovo

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \hat{\mathcal{U}}^k f(x) = \left(\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \hat{\mathcal{U}}^k\right)(\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}})g(x) = \frac{1}{n}(\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}}^{n+1})g(x),$$

che tende a zero (in norma L^2) poiché

$$\|(\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}}^n)g(x)\| \leq (\|g\| + \|\hat{\mathcal{U}}^n g\|) = 2\|g\|,$$

essendo $\hat{\mathcal{U}}^n$ un operatore unitario, cioè che conserva la norma.

L'osservazione successiva è la seguente: il sottospazio H_1 delle funzioni invarianti è il complemento ortogonale del sottospazio H_2 di tutte le funzioni $f(x)$ che si possono scrivere come $f(x) = (\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}})g(x)$: in formule

$$H_2 = \{f(x) \in L^2(d\mu) : f(x) = (\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}})g(x), g(x) \in L^2(d\mu)\}.$$

Infatti il complemento ortogonale H_2^\perp del sottospazio H_2 è formato dalle funzioni $h(x)$ per cui $\langle h, f \rangle = 0$ per ogni $f \in H_2$, ovvero, usando la definizione di H_2 , quelle per cui $\langle h, (\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}})g \rangle$ per tutte le funzioni $g(x)$. Se ricordiamo²⁷ che,

²⁷Nel nostro caso questo si può far vedere direttamente usando la definizione di $\hat{\mathcal{U}}$ e di prodotto scalare:

$$\begin{aligned} \langle h, (\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}})g \rangle &= \int_{\mathcal{M}} h(x)g^*(x)d\mu - \int_{\mathcal{M}} h(x)g^*(\Phi x)d\mu \\ &= \int_{\mathcal{M}} h(x)g^*(x)d\mu - \int_{\mathcal{M}} h(\Phi^{-1}x)g^*(x)d\mu = \langle (\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}}^{-1})h, g \rangle. \end{aligned}$$

per un operatore unitario $\hat{\mathcal{U}}$, l'operatore aggiunto coincide con il suo inverso $\hat{\mathcal{U}}^{-1}$, la condizione è equivalente a richiedere che $\langle (\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}}^{-1})b, g \rangle = 0$ per tutte le $g(x)$. Ma, poiché il prodotto scalare è non degenere, la condizione comporta $(\mathbf{1} - \hat{\mathcal{U}}^{-1})b(x) = 0$, ovvero $\hat{\mathcal{U}}b(x) = b(x)$, cioè $b(x)$ è invariante.

Ora la dimostrazione si conclude notando che, come in tutti gli spazi di Hilbert, una funzione $f(x)$ si può decomporre nella somma delle sue proiezioni ortogonali su H_1 e su H_2 , cioè vale

$$f(x) = b_1(x) + b_2(x), \quad b_1(x) \in H_1, \quad b_2(x) \in H_2.$$

Ricordiamo che abbiamo mostrato che per le funzioni di H_1 il limite è la funzione stessa, mentre per le funzioni di H_2 il limite si annulla, per cui otteniamo

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \hat{\mathcal{U}}^k f(x) = b_1(x),$$

cioè $f(x)$ viene mandata nella sua proiezione ortogonale sul sottospazio delle funzioni invarianti, che è la tesi. **Q.E.D.**

Osserviamo ora che, se ci mettiamo nel caso ergodico, nel caso cioè di un flusso metricamente indecomponibile, come già visto nel paragrafo 4 le uniche funzioni invarianti sono le costanti. Possiamo dunque dire in questo caso che

$$\bar{f}(x_0) = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \hat{\mathcal{U}}^k f(x_0) \rightarrow \bar{f}, \quad (18)$$

dove \bar{f} è una costante (nel senso di funzione costante sullo spazio delle fasi) che, come mostreremo subito, coincide con la media in fase di f , cioè $\bar{f} = \langle f \rangle$. In questo senso il teorema di von Neumann viene chiamato teorema ergodico, perchè stabilisce che la media temporale (su tempo infinito) coincide con la media in fase. Occorre però puntualizzare che la convergenza di cui parla il Teorema di von Neumann è una convergenza in norma L^2

Occupiamoci adesso di calcolare il valore della funzione costante \bar{f} . Poichè, come abbiamo già notato (vedi equazione (10)), vale

$$\int_{\mathcal{M}} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \hat{\mathcal{U}}^k f(x) d\mu = \int_{\mathcal{M}} f(x) d\mu,$$

passando al limite si ottiene

$$\int_{\mathcal{M}} \bar{f} d\mu = \int_{\mathcal{M}} f(x) d\mu \stackrel{\text{def}}{=} \langle f \rangle,$$

cioè appunto $\bar{f} = \langle f \rangle$ (perchè $\mu(\mathcal{M}) = 1$).²⁸

²⁸Notiamo che la convergenza dell'integrale (convergenza in norma L^1) nel nostro caso è implicata dalla convergenza in media quadratica (quella che noi abbiamo dimostrato), essendo la nostra misura μ finita.

Torniamo ora al caso di media temporale $\bar{f}(x_0)$ fatta fino ad un tempo finito \bar{t} , e chiediamoci il significato del Teorema di von Neumann dal punto di vista probabilistico. Ora la relazione (10) ci dice che $\langle f \rangle$ è la media della variabile stocastica $\bar{f}(x_0)$, per cui $\sigma_f^2 \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{M}} |\bar{f}(x_0) - \langle f \rangle|^2 d\mu$ risulta essere lo scarto quadratico medio di $\bar{f}(x_0)$. Allora il teorema di von Neumann afferma che σ_f^2 si annulla per \bar{t} che tende all'infinito, vale a dire che σ_f^2 sarà piccolo per tempi \bar{t} sufficientemente lunghi. Si può usare questa informazione per stimare la probabilità che il valore di $\bar{f}(x_0)$ si discosti dalla media $\langle f \rangle$ (vedi più sotto il Teorema di Chebishev), ottenendo

$$p(|\bar{f}(x_0) - \langle f \rangle| > k\sigma_f) \leq 1/k^2,$$

essendo k una costante positiva. Dunque ci si attende che $\bar{f}(x_0)$ possa differire dal suo valore medio $\langle f \rangle$ di quantità dell'ordine di σ_f , cioè i valori di $\bar{f}(x_0)$ fluttueranno con una distribuzione molto piccata attorno al valore $\langle f \rangle$. Peraltro questo è quanto si osserva empiricamente.

Teorema 8 (di Chebishev) *Sia z una variabile stocastica, m la sua media e σ^2 il suo scarto. Allora per ogni $k > 0$ vale*

$$p(|z - m| > k) \leq \sigma^2/k^2.$$

Dimostrazione. . Sia A l'insieme per cui $|z - m| \geq k$. Allora valgono le maggiorazioni

$$k\mu(A) \leq \int_A |z - m| d\mu \leq \left[\int_A |z - m|^2 d\mu \right]^{1/2} \left[\int_A d\mu \right]^{1/2},$$

dove, nell'ultima maggiorazione si è fatto uso della disuguaglianza di Schwartz. Ora vale $\int_A |z - m|^2 d\mu \leq \sigma^2$ e $\int_A d\mu = \mu(A)$, per cui sostituendo nella relazione precedente otteniamo la tesi. **Q.E.D.**

§9. L'approccio all'equilibrio: proprietà di mixing dei flussi. Ci proponiamo ora di caratterizzare i flussi per cui la distribuzione μ_0 dei dati iniziali, evolvendo secondo la dinamica, tenda alla distribuzione di equilibrio μ quando t tende all'infinito. Facciamo delle osservazioni macroscopiche iniziali che ci portano a ritenere che il nostro sistema si trovi nella regione B dello spazio delle fasi \mathcal{M} , come abbiamo discusso nell'esempio in cui si mescoli un bicchiere d'acqua con un cucchiaino. Che probabilità μ_0 dobbiamo assegnare inizialmente ad un evento E (cui corrisponde un sottoinsieme A di \mathcal{M})? Poichè sappiamo con certezza che il sistema si trova in una regione B , possiamo dire che E si verificherà soltanto se il dato iniziale si trova in $A \cap B$, cioè dobbiamo assegnare la probabilità condizionata

$$\mu_0(A) = \frac{\mu(A \cap B)}{\mu(B)} = \frac{\int_A \chi_B(x) d\mu}{\mu(B)},$$

dove si è indicato con $\chi_B(x)$ la funzione caratteristica dell'insieme B . In questo modo vediamo che la misura iniziale μ_0 risulta essere assolutamente continua rispetto alla misura di equilibrio μ . Quanto vale allora $\mu_t(A)$, evoluto di μ_0 ? Usando la relazione (12) che determina l'evoluzione della misura si ottiene $\mu_t(A) = \mu_0(\Phi^{-t}A)$ ovvero, in virtù della relazione precedente

$$\mu_t(A) = \frac{\mu(\Phi^{-t}A \cap B)}{\mu(B)}.$$

La richiesta che $\mu_t(A) \rightarrow \mu(A)$, porta dunque a richiedere che

$$\mu(\Phi^{-t}A \cap B) \rightarrow \mu(A)\mu(B). \quad (19)$$

I flussi che godono di questa proprietà sono quelli per cui si avrà sicuramente un approccio all'equilibrio. Tali flussi sono detti mescolanti o mixing secondo la seguente definizione

Definizione 3 (di flusso mescolante) *Un flusso Φ^t è detto mescolante (o mixing) se per ogni coppia di insiemi misurabili A e B la relazione (19) è soddisfatta.*

Il termine mescolante deriva dall'analogia con quando mescoliamo per esempio dello zucchero nell'acqua. Infatti la (19), ricordando che μ è una misura invariante, si può anche scrivere nella forma più comunemente utilizzata, ovvero

$$\mu(A \cap \Phi^t B) \rightarrow \mu(A)\mu(B).$$

Questo mi dice allora che se inizialmente il nostro sistema si trova in una regione B , man mano che il sistema evolve la regione evoluta di B invade in modo sempre più uniforme l'intero spazio delle fasi, tanto che alla fine in ogni insieme A troviamo un pezzo di B grande (in misura) proporzionalmente alla misura di A , come accade quando abbiamo disciolto per bene lo zucchero nell'acqua.

La proprietà di mixing è più forte della indecomponibilità metrica, nel senso che se Φ^t è mixing allora è anche indecomponibile metricamente. Infatti supponiamo che A sia un insieme invariante per Φ^t , e consideriamo i due insiemi A e $\Phi^t A$: poichè A è invariante essi coincidono, d'altra parte, per la proprietà di mixing deve essere $\mu(A \cap \Phi^t A) \rightarrow \mu(A)^2$. Si ottiene dunque la relazione

$$\mu(A) = \mu(A)^2,$$

cioè o vale $\mu(A) = 0$, oppure vale $\mu(A) = 1$, ma allora è il complementare di A che ha misura nulla.

Nel prossimo paragrafo mostreremo che esistono flussi che sono ergodici ma non mixing, ad esempio la rotazione del cerchio di un angolo irrotazionale. Mostriamo anche che il "gatto di Arnol" è invece un esempio di trasformazione mixing.

Dal punto di vista in cui ci siamo messi la seguente proprietà dei sistemi mixing risulta molto interessante:

Teorema 9 (decadimento delle correlazioni) *Se un flusso Φ^t è mixing, allora per ogni coppia di funzioni a quadrato integrabile $f(x)$, $g(x)$ vale*

$$\int_{\mathcal{M}} f(x)g(\Phi^t x) d\mu \rightarrow \int_{\mathcal{M}} f(x) d\mu \int_{\mathcal{M}} g(x) d\mu \quad \text{per } t \rightarrow \infty. \quad (20)$$

La relazione (20) si può riscrivere succintamente come

$$\langle f(0)g(t) \rangle - \langle f(0) \rangle \langle g(0) \rangle \rightarrow 0,$$

dove con $g(t)$ abbiamo indicato $g \circ \Phi^t$. Questa relazione è anche equivalente a

$$\langle f(0)g(t) \rangle - \langle f(0) \rangle \langle g(t) \rangle \rightarrow 0,$$

perchè le medie in fase sono invarianti (in virtù dell'invarianza della misura). Nell'ambito della Statistica o della teoria delle probabilità, la quantità

$$C(a, b) = \langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle$$

è detta correlazione delle variabili stocastiche a e b , ed è presa come indicatore di dipendenza tra le due variabili. In particolare le due variabili a e b sono *scorrelate* se $C(a, b) = 0$. Duindi si può riformulare il teorema dicendo che, se il sistema è mixing, allora le variabili macroscopiche si scorrelano sempre più al crescere del tempo (diventano sempre meno correlate): conoscere il valore di una variabile macroscopica ha poca influenza sulla distribuzione di probabilità dei valori futuri di un'altra variabile macroscopica.

Dimostrazione. La dimostrazione richiede di essere familiari su come viene definito l'integrale di Lebesgue. In caso contrario dovrebbe almeno dare un'idea di come si debba procedere.

Cominciamo col considerare due funzioni semplici, cioè due funzioni della forma

$$f(x) = \sum_{k=1}^n f_k \chi_{A_k}(x), \quad g(x) = \sum_{j=1}^m g_j \chi_{B_j}(x),$$

dove al solito si è indicato con $\chi_C(x)$ la funzione caratteristica dell'insieme C . Allora vale

$$\int_{\mathcal{M}} f(x)g(\Phi^t x) d\mu = \sum_{j,k=1} f_k g_j \int_{\mathcal{M}} \chi_{A_k}(x) \chi_{B_j}(\Phi^t x) d\mu.$$

Utilizziamo ora due proprietà delle funzioni caratteristiche, ossia che $\chi_A(x)\chi_B(x) = \chi_{A \cap B}(x)$, e che vale $\chi_A(\Phi^t x) = \chi_{\Phi^{-t}A}(x)$. Allora troviamo

$$\int_{\mathcal{M}} f(x)g(\Phi^t x) d\mu = \sum_{j,k=1} f_k g_j \int_{\mathcal{M}} \chi_{A_k \cap \Phi^{-t}B_j}(x) d\mu = \sum_{j,k=1} f_k g_j \mu(A_k \cap \Phi^{-t}B_j),$$

ed utilizzando la (19) troviamo alla fine

$$\int_{\mathcal{M}} f(x)g(\Phi^t x)d\mu \rightarrow \sum_{j,k=1} f_k g_j \mu(A_k)\mu(B_j) = \int_{\mathcal{M}} f(x)d\mu \int_{\mathcal{M}} g(x)d\mu ,$$

cioè la proprietà è vera per le funzioni semplici. Poichè le funzioni semplici sono dense nell'insieme delle funzioni integrabili, prendendo opportune successioni di funzioni semplici il teorema si dimostra anche per le generiche funzioni integrabili. **Q.E.D.**

§10. Un esempio di sistema mixing. Come abbiamo detto nel primo capitolo le rotazioni del cerchio di un angolo α irrazionale, sono ergodiche. Questo si verifica abbastanza semplicemente considerando inizialmente le funzioni esponenziali $f_k = \exp(2i\pi kx)$. Allora, poichè vale

$$\bar{f}_k = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e^{2i\pi kx}}{n} \sum_{j=0}^{n-1} e^{2i\pi k j \alpha} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e^{2i\pi kx}}{n} \frac{1 - e^{2i\pi(n+1)\alpha}}{1 - e^{2i\pi j \alpha}} = 0 ,$$

se $k \neq 0$, oppure $\bar{f}_0 = 1$ per $k = 0$, si verifica che

$$\bar{f}_k = \langle f_k \rangle .$$

Per linearità si verifica allora che per i polinomi trigonometrici la media temporale coincide con la media in fase. Per densità si mostra allora che questo vale per tutte le funzioni misurabili, cioè la rotazione è ergodica.

Infatti per ogni funzione misurabile $f(x)$ esiste un polinomio trigonometrico $p_n(x)$ tale che

$$\int |f(x) - p_n(x)| dx \leq \varepsilon$$

ed inoltre $\langle f \rangle = \langle p_n \rangle$. Per quanto mostrato vale $\langle p_n \rangle = \bar{p}_n(x)$ (e quindi anche $\langle f \rangle = \bar{p}_n(x)$), per cui

$$\int |\bar{f}(x) - \langle f \rangle| dx = \int |\bar{f}(x) - \bar{p}_n(x)| dx \leq \frac{1}{n} \sum_k \int |f(x) - p_n(x)| dx \leq \varepsilon$$

ed essendo ε arbitrario, abbiamo la tesi.

Dall'ergodicità si ottiene subito che l'orbita è uniformemente densa, cioè che la frazione di punti che cadono in un dato intervallo A è proporzionale (asintoticamente) alla misura $\mu(A)$ dell'intervallo. Basta infatti considerare la media temporale della funzione caratteristica $\chi_A(X)$ dell'intervallo, notando che la frazione ν_A di punti di un'orbita, che cadono in A , è proprio data da

$$\nu_A = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \chi_A(x_n) .$$

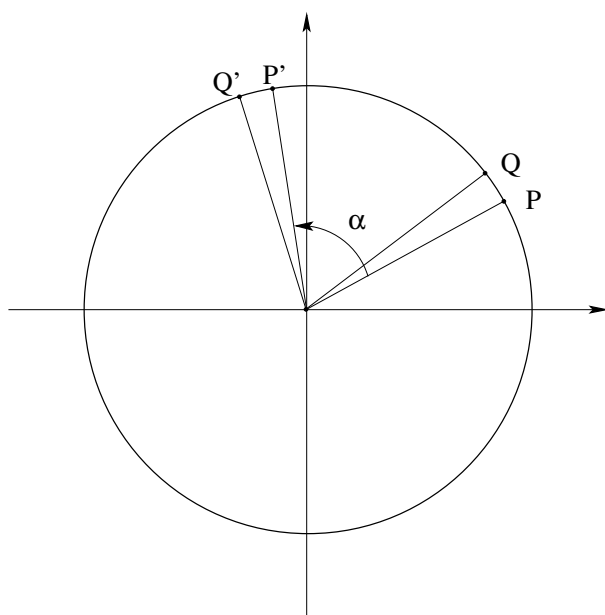


Figura 3.1: Carattere non-mixing della rotazione irrazionale.

Ora passando al limite per $N \rightarrow \infty$ dall'ergodicit  segue

$$\nu_A \rightarrow \int \chi_A(x) d\mu = \mu(A),$$

che era quello che si voleva dimostrare.

Questo sistema non   per  mixing. Intuitivamente lo si capisce perch  la rotazione manda un arco di cerchio ancora in un arco di cerchio della medesima ampiezza (vedi figura 3.1), mentre se fosse mixing si dovrebbe sparpagliare uniformemente lungo tutta la circonferenza. Pi  formalmente lo si ottiene calcolando le correlazioni della funzioni $f_k(x)$ con $f_{-k}(x)$. Vale infatti

$$\langle f_k(\Phi^n x) f_{-k}(x) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(2i\pi k(x + n\alpha) - 2i\pi kx) dx = e^{2i\pi kn\alpha},$$

che non converge a zero per $n \rightarrow \infty$ (il prodotto della media di f_k con la media di f_{-k}).

Viceversa, calcolando le correlazioni, si dimostra abbastanza semplicemente che il gatto di Arnold   un sistema mixing. Ricordo che il gatto di Arnold   una trasformazione del toro definito da

$$\mathbf{x}' = \hat{A}\mathbf{x} \quad \mathbf{x} \in [0, 1] \times [0, 1]$$

dove la matrice \hat{A}   data da

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Le funzioni

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \exp(2i\pi\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}),$$

dove $\mathbf{k} = (k_x, k_y) \in \mathbb{Z}^2$, sono una base per lo spazio delle funzioni L^2 sul toro, e risultano a media nulla se $\mathbf{k} \neq 0$. Le loro correlazioni tendono a zero se $\mathbf{k} \neq 0$: infatti usando il fatto che la matrice A è simmetrica e quindi che vale $\mathbf{k}_1 \cdot \hat{A}^n \mathbf{x} = \hat{A}^n \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}$, per le correlazioni otteniamo

$$\begin{aligned} \langle f_{\mathbf{k}_1}(\Phi^n \mathbf{x}) f_{\mathbf{k}_2}(x) \rangle &= \frac{1}{4\pi^2} \int \exp(2i\pi(\mathbf{k}_1 \cdot \hat{A}^n \mathbf{x} + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x})) \, d\mathbf{x} = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int \exp(2i\pi(\hat{A}^n \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 0, \end{aligned}$$

a partire da un certo n in poi. Infatti per $n \rightarrow \infty$, il vettore $\hat{A}^n \mathbf{k}_1$ tende all'infinito in modo esponenzialmente veloce lungo la direzione instabile di \hat{A} , per cui definitivamente $\hat{A}^n \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \neq 0$ e dunque l'integrale risulta nullo. Se invece $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = 0$, allora l'integrale è sempre pari ad 1, cioè al valore del prodotto delle medie.

Allora per linearità segue che si scorrelano anche i polinomi trigonometrici, e per densità si trova che si scorrelano tutte le funzioni L^2 , cioè il gatto di Arnold è mixing.

Infatti se $f, g \in L^2$, per ogni $\varepsilon > 0$ vi sono due polinomi trigonometrici p_n e q_n tali che $\|f - p_n\|_2, \|g - q_n\|_2 \leq \varepsilon$, e tali che valgano $\langle f \rangle = \langle p_n \rangle, \langle g \rangle = \langle q_n \rangle$. Basta ad esempio prendere le somme parziali della serie di Fourier di f e di g . Notiamo anche che vale

$$\begin{aligned} |\langle \hat{\mathcal{U}}^k f g - \hat{\mathcal{U}}^k p_n q_n \rangle| &\leq |(\langle \hat{\mathcal{U}}^k f - \hat{\mathcal{U}}^k p_n \rangle g)| + |\langle \hat{\mathcal{U}}^k p_n (g - q_n) \rangle| \leq \\ &\leq \|p_n - f\|_2 \|g\|_2 + \|g - q_n\|_2 \|p_n\|_2, \end{aligned}$$

dove nella seconda linea si è fatto uso della disuguaglianza di Schwartz e dell'unitarietà dell'operatore $\hat{\mathcal{U}}$. Si ha allora la stima seguente

$$\begin{aligned} |\langle \hat{\mathcal{U}}^k f g \rangle - \langle f \rangle \langle g \rangle| &\leq |\langle \hat{\mathcal{U}}^k f g - \hat{\mathcal{U}}^k p_n q_n \rangle| + |\langle \hat{\mathcal{U}}^k p_n q_n \rangle - \langle p_n \rangle \langle q_n \rangle| \leq \\ &\leq \varepsilon(\|p_n\|_2 + \|g\|_2) + |\langle \hat{\mathcal{U}}^k p_n q_n \rangle - \langle p_n \rangle \langle q_n \rangle|, \end{aligned}$$

e passando al limite per $k \rightarrow \infty$ si ottiene

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |\langle \hat{\mathcal{U}}^k f g \rangle - \langle f \rangle \langle g \rangle| \leq \varepsilon(\|f\|_2 + \|g\|_2),$$

poiché i polinomi trigonometrici si scorrelano. Essendo ε arbitrario abbiamo la tesi.

Nel prossimo paragrafo discuteremo il problema dell'irreversibilità da un punto di vista diverso da quello del mixing discusso sopra.

§11. L'irreversibilità macroscopica tramite la reversibilità microscopica.

L'irreversibilità fenomenologica è il cuore del secondo principio della termodinamica. Considerando ad esempio il caso di due corpi a temperatura diversa, l'irreversibilità macroscopica si manifesta nel fatto che il calore fluisce dal corpo

più caldo a quello più freddo. Vogliamo mostrare come è possibile descrivere questo fenomeno nell'ambito della teoria dei sistemi dinamici hamiltoniani, nonostante che essi siano microscopicamente reversibili, anzi addirittura proprio come conseguenza del fatto che essi siano microscopicamente reversibili.

Supponiamo quindi di avere due corpi, il corpo A_1 con hamiltoniana H_1 , definita sullo spazio delle fasi \mathcal{M}_1 (le cui coordinate denoteremo globalmente con x_1), ed il corpo A_2 , con hamiltoniana H_2 definita sullo spazio delle fasi \mathcal{M}_2 con coordinate x_2 . Il sistema composto $A_1 + A_2$ sarà allora descritto nello spazio delle fasi $\mathcal{M} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{M}_1 \times \mathcal{M}_2$ le cui coordinate denoteremo con $x = (x_1, x_2)$. Supponiamo inizialmente i due corpi isolati termicamente. Questo implica che le energie dei due corpi sono indipendenti e costanti nel tempo, per cui il sistema è definito dall'hamiltoniana

$$H(x) = H_1(x_1) + H_2(x_2), \quad x = (x_1, x_2)$$

Ora, se tra i corpi realizzo un contatto termico, ciò significa che le energie dei due corpi possono cambiare, e quindi vi deve essere una certa hamiltoniana di interazione H_{int} "piccola"²⁹ rispetto ad H_1 ed H_2 , in modo che l'hamiltoniana totale del sistema $A_1 + A_2$ diventa ora

$$H(x) = H_1(x_1) + H_2(x_2) + H_{int}(x), \quad x = (x_1, x_2)$$

Il termine $H_{int}(x)$ fa sì che le due hamiltoniane H_1 ed H_2 non siano più costanti del moto, e che quindi le energie dei due sistemi A_1 e A_2 possano variare, realizzando così lo scambio di calore tra i due sistemi.

In questo modo però, il secondo principio della termodinamica non può essere verificato strettamente se si ammette la reversibilità microscopica, che definiremo in un momento. Infatti supponiamo che, in corrispondenza di un certo dato iniziale $x \stackrel{\text{def}}{=} (x_1, x_2) \in \mathcal{M}$ e del suo evoluto $\Phi^t x$ al tempo t , lo scambio di energia (inteso come la variazione di energia del primo corpo) $\Delta E \stackrel{\text{def}}{=} H_1(\Phi^t x) - H_1(x)$ sia positivo. Ma allora esiste il movimento "inverso" in cui lo scambio di energia è esattamente uguale in modulo ed opposto di segno, sicché si conclude che per ogni dato iniziale che conduce in un fissato tempo ad un certo scambio di energia, ne esiste un altro che conduce nel medesimo tempo al medesimo scambio di energia, ma di segno opposto.

Ricordiamo che la proprietà di reversibilità viene formulata in termini della *trasformazione di parità*, $\mathcal{P} : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$, definita come quella che inverte il segno di tutti i

²⁹L'Hamiltoniana di interazione si suppone piccola perché normalmente l'interazione termica dei corpi avviene attraverso le loro superfici a contatto, mediante l'interazione a breve *range* delle particelle che costituiscono i corpi. Questo significa che se i due corpi sono formati ciascuno da N particelle, avrò $H_1 \sim N$ e $H_2 \sim N$, mentre $H_{int} \sim N^{2/3}$, cioè il contributo di H_{int} all'energia è trascurabile per i corpi macroscopici.

momenti:³⁰

$$\text{se } x = (q, p), \quad \mathcal{P}x \stackrel{\text{def}}{=} (q, -p).$$

Allora un sistema dinamico, con una corrispondente evoluzione temporale (o “flusso”) Φ^t , si dice reversibile se, per ogni dato iniziale x e per ogni tempo t , si ha

$$\Phi^t \mathcal{P} \Phi^t x = \mathcal{P} x, \quad \text{ovvero} \quad \Phi^t \mathcal{P} \Phi^t = \mathcal{P},$$

ovvero: si prende il punto “finale” (evoluto al tempo t del dato iniziale x) $\Phi^t x$ e si invertono le velocità; si fa ancora evolvere il sistema per il tempo t , e si ottiene un punto che coincide con quello iniziale x a meno dell’inversione delle velocità.

È ben noto, e si dimostra immediatamente, che nei sistemi hamiltoniani la dinamica è reversibile solo se le hamiltoniane sono pari nei momenti, cioè se vale

$$H(\mathcal{P}x) = H(x).$$

Dunque la reversibilità microscopica sembrerebbe costituire un ostacolo insormontabile se si vuol dedurre il secondo principio della termodinamica. È questo il cosiddetto *Paradosso di Loschmidt*, formulato verso la fine dell’800 (insieme con il *paradosso della ricorrenza di Zermelo*) come obiezione contro i procedimenti di Boltzmann. A obiezioni di questo tipo Boltzmann rispondeva con argomenti di tipo statistico. Riportiamo qui una argomentazione di tipo statistico moderna, formulata secondo la linea dei cosiddetti **Teoremi di fluttuazione-dissipazione**, che cominciarono ad essere usati poco dopo il 1950, a seguito degli studi di Kubo ed altri, per il calcolo dei coefficienti di trasporto. La versione che qui riportiamo in relazione al calore specifico potrebbe essere una variante di altre reperibili in letteratura, ma ai presenti autori non ne è nota nessuna che faccia uso così esplicito della proprietà di reversibilità microscopica.³¹

La soluzione al paradosso di Loschmidt mediante metodi statistici, si ottiene dunque quando si rinuncia all’idea di valutare lo scambio di energia relativo a ogni singolo dato iniziale, e ci si mette invece al livello in cui si intende per energia scambiata il valore medio degli scambi relativi ai singoli dati iniziali. Dunque il secondo principio risulta valido, ma solo in senso più debole, cioè in senso statistico. Si deve allora stabilire quale sia la corretta misura con cui pesare i dati iniziali (o meglio gli insiemi di dati iniziali, perché nel continuo ogni dato iniziale ha misura nulla).³² È ben naturale scegliere la misura richiedendo che, prima che i due corpi siano posti in contatto termico, i dati iniziali siano distribuiti secondo Gibbs, a temperatura $1/\beta$ per il corpo A_1 ed a temperatura $1/(\beta + \delta\beta)$ per

³⁰La trasformazione \mathcal{P} che cambia segno a tutti i momenti è una trasformazione canonica, avente come generatrice la funzione $S = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{Q}$ (si devono poi scambiare i nomi di q, p con Q, P). Evidentemente si ha $\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{P}$, ovvero $\mathcal{P}^2 = 1$, dove 1 denota la matrice identità.

³¹Si potrebbe dire che si ha qui in qualche modo un antiparadosso di Loschmidt, perché questo argomento sembrerebbe suggerire la congettura che sia addirittura impossibile dedurre il secondo principio (irreversibilità macroscopica) se non si ammettesse la reversibilità microscopica.

³²Resterebbe anche da stabilire se la misura dell’insieme dei dati iniziali che fa fluire il calore dal corpo più freddo al corpo più caldo sia del tutto trascurabile, come accade nel caso del paradosso della ricorrenza di Zermelo, oppure no. Di questo problema non ci occuperemo nel seguito.

il corpo A_2 . Dunque, denotando ancora $x = (x_1, x_2)$ dove $x_1 \in \mathcal{M}_1$ e $x_2 \in \mathcal{M}_2$, supponiamo che la distribuzione di probabilità dei dati iniziali sia data da

$$p(x) dx = \frac{\exp\left(-\beta H_1(x_1) - (\beta + \delta\beta) H_2(x_2)\right)}{Z_1(\beta) Z_2(\beta + \delta\beta)} dx_1 dx_2, \quad (21)$$

dove Z_i sono i noti fattori di normalizzazione (funzioni di partizione). Denoteremo con $\langle \cdot \rangle$ il valore medio rispetto alla distribuzione di probabilità (21) nello spazio delle fasi totale. In particolare denoteremo con δQ lo scambio medio di energia (media della variazione di energia del primo corpo),

$$\delta Q = \langle H_1(\Phi^t x) - H_1(x) \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int (H_1(\Phi^t x) - H_1(x)) p(x) dx. \quad (22)$$

Che questa quantità debba essere identificata con il calore scambiato sembra naturale, dato che si tratta di una variazione di energia senza che venga compiuto del lavoro. Si dimostra allora la seguente

Teorema 10 *Si considerino due sistemi inizialmente a temperatura inversa β e $\beta + d\beta$ rispettivamente, e si definisca il calore scambiato δQ come valore medio della variazione di energia del primo sistema, calcolato mediante la misura ottenuta come prodotto delle corrispondenti misure di Gibbs, ovvero mediante la (22). Allora si trova che lo scambio di calore δQ può anche essere espresso attraverso la formula*

$$\delta Q = -\frac{1}{2} \left\langle \left(H_1(\Phi^t x) - H_1(x) \right)^2 \right\rangle_{eq} \delta\beta + O(\delta\beta^2), \quad (23)$$

dove $\langle \cdot \rangle_{eq}$ denota la media fatta con la distribuzione di Gibbs all'equilibrio, cioè con i due corpi alla medesima temperatura (inversa) β .³³

Questa formula mostra che lo scambio di calore δQ ha un segno ben definito. In particolare il segno è tale che, se $\delta\beta$ è negativo, cioè se il corpo A_2 ha temperatura superiore a quella del corpo A_1 , allora l'energia di A_1 in media cresce, in accordo con il secondo principio della termodinamica. Si ha quindi una dimostrazione del secondo principio in una delle sue forme più classiche (il calore passa spontaneamente dai corpi caldi ai corpi freddi). Veniamo dunque alla

³³La media rispetto alla distribuzione di Gibbs comporterebbe di introdurre come hamiltoniana quella totale $H = H_1 + H_2 + H_{int}$. In realtà, in virtù di quanto detto più sopra riguardo l'hamiltoniana di interazione H_{int} , la media rispetto ai dati iniziali può, senza sensibili errori, essere calcolata usando la distribuzione canonica relativa all'hamiltoniana $H_1 + H_2$ in luogo dell'hamiltoniana totale. In altri termini, mentre l'introduzione di H_{int} è essenziale per la dinamica in quanto permette lo scambio di calore per i corpi, viceversa, per quanto riguarda le medie fatte rispetto ai dati iniziali, essa introduce solo piccole correzioni che, volendo, potrebbero comunque (in linea di principio) essere calcolate perturbativamente. È questo un tratto caratteristico di buona parte della meccanica statistica.

Dimostrazione. La dimostrazione viene ottenuta in due passi. Il primo consiste nel trovare per δQ una nuova espressione suggerita spontaneamente dalla proprietà di reversibilità, sicché sarà spontaneo poi considerare l'espressione che si ottiene come semisomma di quelle due. L'aspetto di tale formula suggerisce allora immediatamente di compiere uno sviluppo al primo ordine in $\delta\beta$, e questo conduce subito alla formula finale, che fa riferimento alla misura di Gibbs di equilibrio.

Primo passo. Avendo in mente la proprietà di reversibilità, consideriamo la trasformazione $z \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{P}\Phi^t x$ nello spazio delle fasi. Sappiamo che si tratta di una trasformazione canonica, come composizione di due trasformazioni canoniche, il flusso $\Phi^t x$, e la trasformazione di parità \mathcal{P} che cambia il segno di tutti i momenti. Anzi, consideriamo la trasformazione inversa $x \rightarrow z$, che si esprime come

$$x = \mathcal{P}\Phi^t z ,$$

proprio per il fatto che il moto è reversibile. Naturalmente questo vale, come già ribadito sopra, se le hamiltoniane sono tutte pari nei momenti, per cui si ha anche

$$H_1(\Phi^t x) = H_1(z) , \quad H_1(x) = H_1(\Phi^t z) . \quad (24)$$

Se effettuiamo il cambiamento di variabile $x = x(z)$ nell'integrale che appare nella (22), si ottiene

$$\langle H_1(\Phi^t x) - H_1(x) \rangle = \int \left(H_1(\Phi^t x(z)) - H_1(x(z)) \right) p(x(z)) dz ,$$

in quanto la trasformazione $x = x(z)$, essendo canonica, ha Jacobiano unitario. Usando l'invarianza di H_1 per inversione dei momenti, espressa nella forma (24), si ottiene allora

$$\langle H_1(\Phi^t x) - H_1(x) \rangle = \int \left(H_1(z) - H_1(\Phi^t z) \right) p(x(z)) dz .$$

Riscriviamo ora in una forma appropriata la densità di probabilità (21), facendo uso della conservazione dell'energia, nell'approssimazione in cui si trascura l'energia di interazione H_{int} , ovvero

$$H_1(x) + H_2(x) = H_1(z) + H_2(z) . \quad (25)$$

Usando la conservazione dell'energia una prima volta direttamente nella forma (25), e una seconda volta nella forma $H_2(x) = H_2(z) + (H_1(z) - H_1(x))$ (ovvero $H_2(x) = H_2(z) - \Delta E$), si ottiene allora per la distribuzione $p(x)$, come si vede subito, l'espressione

$$p(x) = p(z) \exp \left(-\delta\beta (H_1(z) - H_1(x)) \right) .$$

In definitiva per lo scambio medio di energia si ottiene

$$\langle H_1(\Phi^t x) - H_1(x) \rangle = \int (H_1(z) - H_1(\Phi^t z)) \exp\left(-\delta\beta(H_1(z) - H_1(\Phi^t z))\right) p(z) dz ,$$

ovvero, denotando la variabile muta di integrazione z con la lettera x (e operando un banale riaggiustamento)

$$\langle H_1(\Phi^t x) - H_1(x) \rangle = - \int (H_1(\Phi^t x) - H_1(x)) \exp\left(\delta\beta(H_1(\Phi^t x) - H_1(x))\right) p(x) dx , \quad (26)$$

Secondo passo. Abbiamo dunque due espressioni diverse, la (22) e la (26), per la medesima quantità δQ . Si può allora prenderne la semisomma, ottenendo per δQ l'interessante espressione

$$\delta Q \stackrel{\text{def}}{=} \langle H_1(\Phi^t x) - H_1(x) \rangle = \frac{1}{2} \int (H_1(\Phi^t x) - H_1(x)) \left[1 - \exp\left(\delta\beta(H_1(\Phi^t x) - H_1(x))\right) \right] p(x) dx . \quad (27)$$

Questa fornisce, mediante uno sviluppo in serie di $\delta\beta$ al primo ordine, la relazione (23) della Proposizione, che fa intervenire la media rispetto alla distribuzione di Gibbs di equilibrio, in cui è sparito il fattore $\delta\beta$. Ovviamente ciò è dovuto al fatto che, per determinare l'espressione dello sviluppo al primo ordine in $\delta\beta$, nel fattore $p(x)$ ci si dovrà arrestare all'ordine zero. **Q.E.D.**

Osservazione. Si noti che la (27) fornisce direttamente che il calore scambiato ha il segno opposto a quello di $\delta\beta$, senza bisogno di fare lo sviluppo per $\delta\beta$ piccoli. Definita infatti la funzione

$$y(x) \stackrel{\text{def}}{=} \delta\beta(H_1(\Phi^t x) - H_1(x)) ,$$

la (27) si riscrive come

$$\delta Q = \frac{1}{2\delta\beta} \int y(x) \left[1 - \exp(y(x)) \right] p(x) dx ,$$

e poiché la funzione integranda è negativa si trova appunto che il calore scambiato ha il segno di $-\delta\beta$, cioè il segno di δT .

Osserviamo ora che in effetti abbiamo determinato una espressione dinamica per il calore specifico, che tra l'altro risulta dipendere dal tempo. Che risulti

determinato il calore specifico è ovvio. Infatti, abbiamo interpretato la quantità $\delta Q = \langle H_1(\Phi^t x) - H_1(x) \rangle$ come calore scambiato (perché variazione (media) di energia di un sottosistema senza produzione di lavoro) ed è allora chiaro che il corrispondente calore specifico³⁴ C_V debba essere identificato con la quantità $\delta Q / \delta T$, ovvero (ricordando $\beta = 1/kT$ sicché $dT = -kT^2 d\beta$)

$$C_V(t) = \frac{\delta Q}{\delta T} = -\frac{1}{kT^2} \frac{\delta Q}{\delta \beta}.$$

Abbiamo dunque il

Corollario 1 (Time dependent specific heat) *Per il calore specifico si ha l'espressione dinamica*

$$C_V(t) = \frac{1}{2kT^2} \langle (H_1(\Phi^t x) - H_1(x))^2 \rangle_{eq}. \quad (28)$$

Si nota poi che questo calore specifico dipende dal tempo, e dovremmo dunque parlare di **calore specifico misurato in una esperienza che dura un tempo t** . Si vedano ad esempio i lavori di Birge e Nagel dal titolo “*Observation of time dependent specific heat*”.³⁵

Questo fatto dovrebbe essere ovvio per ogni persona familiare con la termodinamica (quando si opera una trasformazione, ad esempio variando il volume entro cui è racchiuso un gas, per applicare la termodinamica bisogna attendere che il corpo sia tornato all'equilibrio)³⁶, ma in effetti si tratta di un fatto molto spesso ignorato o comunque sottovalutato. Secondo i presenti autori, tale fatto potrebbe avere un ruolo rilevante dal punto di vista dei fondamenti. Su questo punto ritorneremo alla fine di questo paragrafo.

Relazione con il valore di equilibrio C_V^{eq} . Abbiamo dunque detto che il calore specifico deve dipendere dal tempo, perché la misurazione prende un tempo caratteristico della misura, e questo dovrebbe in principio essere determinato dalle proprietà dinamiche del sistema totale, ovvero sistema osservato e apparato di misura. Per tempi molto inferiori il calore specifico misurato sarà trascurabile, e infatti l'espressione sopra data di $C_V(t)$ mostra che essa tende a zero quando $t \rightarrow 0$. Più delicato è il problema dell'approccio all'equilibrio quando si compie la misurazione, come ora passiamo a discutere.

Ricordiamo che in termodinamica, quando è nota la funzione $U(T)$ che dà l'energia interna in funzione della temperatura, il calore specifico viene definito

³⁴Il calore specifico di un corpo è definito come il rapporto tra la quantità di calore assorbito e l'incremento di temperatura. L'indice V sta ad indicare che i parametri macroscopici del corpo (il volume per esempio) sono tenuti costanti durante la trasformazione.

³⁵N.O. Birge, Phys. Rev. B **34**, 1631 (1986); N.O. Birge, S.R. Nagel, Phys. Rev. Lett **25**, 2674 (1985). Si veda anche A. Carati, L. Galgani, Europhys. Lett. **74**, 528 (2006).

³⁶Questo fatto è particolarmente sottolineato da G. Wannier, *Statistical Physics*, Dover (New York, 1966).

come $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$. Ci si attenderebbe dunque che per tempi superiori al tempo caratteristico della misura (spesso si dice: per $t \rightarrow +\infty$) il calore specifico $C_V(t)$ definito dalla formula statistica data sopra converga al valore “di equilibrio” $\frac{\partial U}{\partial T}$. Qui si avrebbe un problema di principio alquanto delicato concernente l’energia interna, ma ora non vi entriamo, e compiamo la scelta – che sembrerebbe ovvia – assunta in ogni manuale, a partire dal classico fondamentale testo di Gibbs, secondo la quale si compie l’identificazione

$$U(T) \stackrel{\text{def}}{=} \langle H_1 \rangle_{eq}.$$

Fin dai tempi di Gibbs (1902) e del terzo lavoro di Einstein sui fondamenti della meccanica statistica, la corrispondente formula del calore specifico “canonico” C_V^{eq} all’equilibrio alla temperatura T è nota a tutti gli studenti, ed è data da

$$C_V^{eq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{kT^2} \sigma_U^2, \quad (29)$$

dove σ_U^2 è la varianza (scarto quadratico medio) dell’energia H_1 del primo sottosistema:³⁷

$$\sigma_U^2 = \langle (H_1 - U)^2 \rangle = \langle H_1^2 \rangle_{eq} - U^2, \quad \text{dove } U \stackrel{\text{def}}{=} \langle H_1 \rangle_{eq}.$$

La relazione tra il calore specifico dipendente dal tempo e quello di equilibrio è data in termini dell’autocorrelazione temporale (normalizzata) $\text{Cor}_{H_1}(t)$ definita da

$$\text{Cor}_{H_1}(t) = \frac{\langle H_1(\Phi^t x) H_1(x) \rangle_{eq} - \langle H_1 \rangle_{eq}^2}{\sigma_U^2}. \quad (30)$$

Il fattore di normalizzazione è stato aggiunto in maniera che l’autocorrelazione valga 1 al tempo iniziale. Si intuisce immediatamente che in un moto sufficientemente caotico l’autocorrelazione temporale di ogni variabile dinamica tende a zero. Ed in effetti, come abbiamo visto, i sistemi dinamici di tipo *mixing*

³⁷Infatti si ha

$$\begin{aligned} -kT^2 C_V^{eq} &= \frac{\partial}{\partial \beta} U = \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{\int H_1 \exp(-\beta H_1) dy}{Z(\beta)} \right) = \\ &= \left(\frac{\int H_1 \exp(-\beta H_1) dy}{Z(\beta)} \right)^2 - \frac{\int H_1^2 \exp(-\beta H_1) dy}{Z(\beta)} = -\sigma_U^2, \end{aligned}$$

dove nella seconda eguaglianza si è usata la relazione

$$\partial_\beta Z(\beta) = - \int H_1 \exp(-\beta H_1) dy.$$

vengono definiti proprio come quelli che hanno tale proprietà (le correlazioni temporali di ogni coppia di funzioni tende a zero per $t \rightarrow +\infty$). La relazione tra “time dependent specific heat” e calore specifico di equilibrio è data dal seguente corollario:

Corollario 2 (“time dependent specific heat” e calore specifico di equilibrio)
Si ha la relazione

$$C_V(t) = C_V^{eq} (1 - \text{Cor}_{H_1}(t)). \quad (31)$$

Infatti, basta prendere la formula (28) per $C_V(t)$ e sviluppare il quadrato. Poi si aggiunge e sottrae il prodotto

$$2 \langle H_1(\Phi^t x) \rangle_{eq} \langle H_1(x) \rangle_{eq},$$

osservando che si ha

$$\langle H_1(\Phi^t x) \rangle_{eq} = \langle H_1(x) \rangle_{eq},$$

in virtù dell’invarianza temporale della misura di Lebesgue.

Questa formula mostra che il calore specifico misurato (dipendente dal tempo) tende a quello di equilibrio se il sistema è abbastanza caotico da far sì che l’autocorrelazione temporale dell’energia del primo sottosistema si annulli per tempi sufficientemente lunghi. Il tempo dopo il quale la correlazione è praticamente nulla viene allora indentificato con il tempo di rilassamento, cioè il tempo caratteristico per il compiersi della misura. Naturalmente, diventa allora un problema matematico della teoria dei sistemi dinamici classici determinare se questo avvenga (e dopo quanto tempo) per un dato sistema. Notiamo infine che, dal punto di vista matematico, sono necessarie ipotesi più forti della sola ergodicità, affinché il calore specifico misurato converga al valore canonico.

Fino agli anni ’50 era dato per scontato che un approccio all’equilibrio abbastanza rapido si producesse per i sistemi macroscopici, ovvero nel cosiddetto **limite termodinamico**, in cui divergono sia il numero N dei gradi di libertà sia l’energia E , con energia specifica E/N finita, ovvero temperatura finita. Ma questa convinzione venne messa in dubbio dai risultati dell’ultimo lavoro di Fermi (il cosiddetto lavoro FPU, di Fermi, Pasta ed Ulam, del 1954). Si trova che per temperature abbastanza alte il tempo di rilassamento all’equilibrio è quello che tutti si aspetterebbero. Sembra però che per temperature abbastanza basse le cose non siano altrettanto chiare, perché le medie temporali di grandezze significative sembrano stabilizzarsi su valori ben diversi da quelli di equilibrio. Il “*fenomeno o paradosso di Fermi*” consiste proprio in questa scoperta, ed è un problema aperto della ricerca moderna stabilire se questo fenomeno persista al limite termodinamico.³⁸

³⁸Si veda la rassegna G. Benettin, A. Carati, L. Galgani, A. Giorgilli, *The Fermi-Pasta-Ulam problem and the metastability perspective*, in in *The Fermi-Pasta-Ulam Problem: A Status Report*, G. Gallavotti editor, Lecture Notes in Physics **728**, Springer Verlag (Berlin, 2007), ed il lavoro numerico A. Carati, L. Galgani, A. Giorgilli, S. Paleari, *FPU phenomenon for generic initial data*, Phys. Rev. E **76**, 022104 (2007).

Si potrebbe dire che gli studiosi si suddividano in due categorie: quelli che sperano che si possa dimostrare che il fenomeno scompare al limite termodinamico, e quelli (non molti) che sperano il contrario. Se si provasse che il fenomeno persiste, questo comporterebbe che la meccanica classica presenta un comportamento *similquantistico*, nel senso che il calore specifico predetto sarebbe qualitativamente in accordo con quello osservato, che tende a zero al diminuire della temperatura. Si avrebbe una situazione simile a quella dei vetri, in cui ci si viene a trovare in stati di metastabilità che persistono fuori dall'equilibrio su scale di tempo geologiche, con un eventuale approccio all'equilibrio solo su scale di tempo molto più lunghe.^{39, 40}

La tesi che il fenomeno FPU possa permanere al limite termodinamico è stata recentemente avvalorata dalla dimostrazione che la teoria perturbativa, la quale assicura che i sistemi molto ordinati continuano a restare tali anche sotto perturbazione, è applicabile anche nel limite termodinamico.⁴¹

Abbiamo visto che se l'autocorrelazione temporale dell'energia del primo sottosistema non tende a zero, ma rilassa a un altro valore, allora il calore specifico misurato risulta diverso da quello di equilibrio. Si ha allora il problema se esista un metodo generale per definire la termodinamica statistica facendo uso delle medie temporali, senza fare riferimento alle medie in fase alla Gibbs. Questo problema è stato affrontato nel lavoro A. Carati, *Thermodynamics and time averages*, Physica A **348**, 110 (2005).

³⁹Il problema dei tempi di misurazione dei calori specifici ha una curiosa storia. Quando Nernst nel 1911 cominciò uno studio sistematico del calore specifico dei solidi a bassa temperatura (perché secondo la sua terza legge si aspettava che i calori specifici dovessero tendere a zero per basse temperature per ogni sistema), egli si imbatté nella difficoltà sperimentale che, quando i valori osservati cominciavano a diminuire rispetto a quelli "classici", il tempo richiesto per compiere la misurazione (il tempo perché i dati si stabilizzassero) diventava così lungo da fargli temere che *il calore specifico non fosse neppure misurabile* (citiamo le sue parole a memoria). Poi, abbassando ancora la temperatura, avvenne il fatto inatteso che invece i tempi richiesti per la misura diminuivano, e si poteva dunque compiere la misura.

⁴⁰NOTA PER GLI AUTORI. Citare i risultati sperimentali sull'acqua a bassa temperatura, dal libro

⁴¹A. Carati, *An averaging theorem for Hamiltonian dynamical systems in the thermodynamic limit*, J. Stat. Phys. **128**, 1057 (2007); A. Carati, A. Maiocchi, *Exponentially long stability times for a nonlinear lattice in the thermodynamical limit*, Comm. Math. Phys. **314**, 129-161 (2012) (2011).

PARTE II: SISTEMI CON MOLTI GRADI DI LIBERTA'

§12. La Termodinamica come teoria delle grandi deviazioni. Finora si sono studiate le proprietà statistiche del moto di un sistema hamiltoniano, senza avere mai usato la proprietà che i sistemi di interesse sono “macroscopici”, cioè con un grandissimo numero di gradi di libertà. Quali sono le implicazioni di questo fatto? Il primo che coerentemente si pose questa domanda fu il Khinchin, nel suo bel libro *Mathematical Foundations of Statistical Mechanics* (Dover, New York 1949), suggerendo che i teoremi limite della statistica debbano avere un'importanza fondamentale.

In effetti, pensando in termini puramente probabilistici, la situazione della termodinamica è paradossale. Infatti, consideriamo una data misura μ sullo spazio delle fasi, ad esempio quella di Lebesgue, e sia $\langle E \rangle$ l'energia media, N il numero dei gradi di libertà del sistema di modo che

$$\langle E \rangle = N\bar{\varepsilon} ,$$

dove con ε si è indicata l'energia specifica. Inoltre abbiamo visto che il calore specifico C_V è lo scarto σ_E^2 dell'energia, e che il calore specifico è ordinariamente una quantità estensiva, cioè

$$C_V = Nc_V$$

Se mi chiedo qual'è la probabilità che l'energia specifica abbia un valore ε diverso dalla media, applicando il teorema di Chebyshev otterrò la stima seguente

$$P(|\varepsilon - \bar{\varepsilon}| > a) = P(|E - \langle E \rangle| > Na) \leq \frac{\sigma_E^2}{N^2 a^2} = \frac{1}{N} \frac{c_V}{a^2} \simeq 0 , \quad (32)$$

per N grandi. In altre parole l'energia specifica (cioè sostanzialmente la temperatura) è fissata e non posso usarla come variabile indipendente.

Naturalmente sappiamo che l'energia di un sistema può essere variata in modo arbitrario, e dunque vi sono due alternative. Si possono considerare misure diverse μ_U al variare dell'energia media U . Questo è la via usata nell'approccio microcanonico, in cui si usa una misura concentrata sulla superficie $H = U$ ad energia costante.

Questo modo non risulta però naturale all'interno della teoria della probabilità, in cui si introduce invece la nozione di probabilità condizionata: data una probabilità iniziale o “a priori”, l'accadere con certezza di un evento A (in questo caso che l'energia media sia U) determina la probabilità condizionata μ_A o “a posteriori”. In questo secondo schema interpretativo, il problema è dunque ricondotto a determinare la probabilità condizionata una volta data la probabilità a priori. Il tratto caratteristico della termodinamica consiste nel fatto che gli eventi su cui si deve condizionare stanno nella coda della distribuzione, come mostra la (32), sono cioè *eventi rari*. La parte della teoria della probabilità che tratta di eventi che si discostano dalla media di quantità molto maggiori dello

scarto, viene detta teoria delle grandi deviazioni (deviazioni grandi rispetto allo scarto). In questo senso la Termodinamica è una teoria delle grandi deviazioni.

Nei paragrafi seguenti studieremo alcuni teoremi limite della teoria delle grandi deviazioni e li applicheremo al caso di sistemi termodinamici. La conclusione sarà che genericamente la misura a posteriori coincide con la distribuzione di Gibbs, se quella a priori e la misura di Lebesgue sullo spazio delle fasi.

§13. Il teorema di Cramér-Gartner. Il primo teorema di grandi deviazioni è dovuto a Cramér nel 1938, generalizzato poi da Gartner nel 1977.⁴² Di tale teorema noi daremo una versione adattata all'ambito che vogliamo trattare. Il teorema fornisce una stima della probabilità che una variabile casuale X appartenga ad un intervallo $[a, b]$ in termini dell'estremo superiore, su tale intervallo, di una opportuna funzione. In tutto il seguito intenderemo sempre che la variabile casuale X sia l'energia E del sistema in esame, e che la probabilità di $[a, b]$ non sia altro che la misura dello regione (dello spazio delle fasi) per cui il valore dell'energia sia compreso tra a e b .

La differenza fondamentale con le stime di tipo Chebishev, sta nel fatto che le stime sono "esatte" in un opportuno limite (essenzialmente il limite termodinamico), cioè si ha asintoticamente

$$\log \mu([a, b]) \sim \sup_{x \in [a, b]} \Lambda(x).$$

La definizione della funzione Λ in termini della misura μ è un pochino involuta dal punto di vista matematico, ma ha un chiaro significato dal punto di vista fisico: coincide infatti con l'entropia termodinamica, come vedremo in seguito.

Per definire $\Lambda(x)$, si incomincia con il definire la funzione generatrice dei momenti (o funzione di partizione con la terminologia della meccanica statistica)

$$Z(z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{+\infty} e^{-zx} d\mu,$$

cioè la trasformata di Laplace della misura, e si considera il logaritmo $\chi(z)$ di questa, cioè si pone

$$\chi(z) \stackrel{\text{def}}{=} \log \int_0^{+\infty} e^{-zx} d\mu. \quad (33)$$

La funzione $\Lambda(x)$ risulta allora essere la trasformata di Legendre di questa, si ha cioè

$$\Lambda(x) = \inf_{z \geq 0} (zx + \chi(z)). \quad (34)$$

⁴²Vedi: H. Cramér, *Sur un nouveau théorème-limite de la théorie des probabilité*, in *Actualité Scientifique et Industrielles*, **736**, Herman, Paris, 1938, pp. 5-23; J. Gartner, *On large deviations from the invariant measure*, *Th. Prob. Appl.* **22** (1977), pp. 24-39.

In un certo senso, la formula di grande deviazione, mi dice che la trasformata di Legendre effettua l'inversione della (33), cioè dalla conoscenza della trasformata di Laplace riesco a risalire alla misura.

Nei problemi di grande deviazione viene spontaneo associare alla misura μ , un'altra distribuzione di probabilità ν_z , definita da

$$d\nu_z = \frac{e^{-xz}}{Z(z)} d\mu,$$

detta trasformata di Cramér della misura μ . Se la variabile casuale X è l'energia di un sistema hamiltoniano, e μ è la misura di Lebesgue sullo spazio delle fasi di questo, la trasformata di Cramér coincide ovviamente con la distribuzione di Gibbs. La funzione $\chi(z)$ è uno strumento molto utile, in quanto permette di calcolare i momenti della distribuzione ν_z semplicemente prendendone le derivate. In particolare è facile verificare che

$$\begin{aligned} -\chi'(z) &= \langle x \rangle_z = \frac{1}{Z(z)} \int_0^{+\infty} x e^{-xz} d\mu \\ \chi''(z) &= \sigma_z^2 = \frac{1}{Z(z)} \int_0^{+\infty} (x - \langle x \rangle_z)^2 e^{-xz} d\mu, \end{aligned}$$

cioè la derivata prima di $\chi(z)$ (cambiata di segno) coincide con la media, la derivata seconda lo scarto.

L'enunciato del teorema (adattato alle nostre esigenze) è il seguente

Teorema 11 (di Grande Deviazione) *Sia X una variabile casuale positiva, e sia μ la relativa distribuzione di probabilità. Definiamo le funzioni $\chi(z)$ e $\Lambda(x)$ mediante la (33) e la (34) rispettivamente e assumiamo che siano sufficientemente regolari. Siano le costanti \bar{z} e σ soluzione dell'equazioni*

$$\chi'(\bar{z}) = b - 2\sigma, \quad \sigma^2 = \chi''(\bar{z}).$$

Valgono allora le stime seguenti

$$\Lambda(b) - R_m \leq \log \mu([a, b]) \leq \Lambda(b), \quad (35)$$

dove R_m è definito da

$$R_m \stackrel{\text{def}}{=} 4\bar{z}\sigma + 1. \quad (36)$$

Osservazione. Essendo $\chi(z)$ una funzione regolare, allora il minimo dell'espressione $xz + \chi(z)$ viene raggiunta nel punto \bar{z} tale che $x = -\chi'(\bar{z})$. Vale allora

$$\Lambda(x) = x\bar{z} + \chi(\bar{z}), \quad \bar{z} = \bar{z}(x).$$

Osservazione. La funzione $\Lambda(x)$ è monotona crescente, di modo che $\Lambda(b) = \sup \Lambda(x)$ per $x \in [a, b]$. In effetti nel caso generale le (35) si dovrebbe scrivere come

$$\sup_{x \in (a, b)} \Lambda(x) + O(\sigma) \leq \mu(a, b), \quad \log \mu[a, b] \leq \sup_{x \in [a, b]} \Lambda(x).$$

Nell'ipotesi di regolarità naturalmente l'estremo superiore su un aperto o sulla sua chiusura coincidono, ma nel caso generale possono differire. La dimostrazione che $\Lambda(x)$ sia crescente lo si ottiene nel seguente modo: se $b > b'$, allora

$$\begin{aligned} \Lambda(b) &= \inf_{z \geq 0} (zb + \chi(z)) = \inf_{z \geq 0} ((zb/b')b' + \chi(z)) = \\ &= \inf_{z' \geq 0} (z'b' + \chi(z'b'/b)) \geq \inf_{z' \geq 0} (z'b' + \chi(z')) = \Lambda(b') \end{aligned}$$

dove si è posto $z' = zb/b'$ e si è usato il fatto che $\chi(z)$ è monotona decrescente.

Osservazione. Se la variabile casuale è l'energia e la misura μ quella di Lebesgue nello spazio delle fasi, allora χ è il logaritmo della funzione di partizione, mentre, come tra poco proveremo, la funzione Λ coincide con l'entropia termodinamica S .⁴³ Allora prendendo $a = 0$ si ottiene

$$\log \mu[0, b] = S,$$

cioè l'entropia coincide con il logaritmo della probabilità secondo il celebre postulato di Boltzmann. Per mostrare che Λ coincide con S incominciamo notando che nell'insieme canonico, detta U l'energia interna, p la pressione e V il volume valgono le relazioni⁴⁴

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z, \quad p = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \log Z,$$

per cui si ottiene

$$d(\log Z) = -U d\beta + \beta p dV = -d(\beta U) + \beta(dU + p dV).$$

Poichè $dU + p dV = \delta Q$ coincide con il calore scambiato, dal secondo principio della termodinamica $\delta Q = \beta dS$, dove S è l'entropia del sistema, troviamo la relazione seguente

$$S = \beta U + \log Z, \quad \text{con} \quad U = -\partial_{\beta} \log Z.$$

⁴³Ammettiamo qui che le medie temporali si possano calcolare con le medie di Gibbs, ammettiamo cioè che la dinamica del sistema sia sufficientemente caotica. In realtà dovrebbe essere vero in generale. PROVA A DIMOSTRARLO!!

⁴⁴La prima non è altro che la (33) scritta per l'energia. Per quanto riguarda la seconda, ricordiamo che, come abbiamo più volte detto nei primi paragrafi, la pressione non è altro che la media della forza esterna agente sul sistema, cioè la media della funzione $\partial_V H$, essendo H l'hamiltoniana del sistema. Tale media è appunto fornito dalla seconda delle espressioni seguenti.

Ma allora

$$S = \inf_{\beta \geq 0} (\beta U + \log Z),$$

che coincide con la definizione (34) di $\Lambda(x)$.

Dimostrazione del Teorema. La maggiorazione nella (35) si ottiene semplicemente, operando in modo analogo a quanto fatto nel caso del teorema di Chebyshev. Si ha infatti

$$\begin{aligned} e^{-bz} \mu([a, b]) &\leq \int_{[a, b]} e^{-xz} d\mu \leq \mu([a, b])^{1/2} \left(\int_{[a, b]} e^{-2xz} d\mu \right)^{1/2} \leq \\ &\leq \mu([a, b])^{1/2} \left(\int_0^{+\infty} e^{-2xz} d\mu \right)^{1/2}, \end{aligned}$$

da cui si ottiene

$$\log \mu([a, b]) \leq 2bz + \chi(2z).$$

Passando al inf su z si ottiene la seconda di (35).

Per ottenere la minorazione utilizziamo il teorema di Chebyshev sulla trasformata di Cramér della misura μ in questo modo. Come abbiamo detto nel paragrafo precedente siamo interessati a situazioni in cui lo scarto (cioè il calore specifico) diverge (essendo una quantità estensiva). Se fissiamo prima \bar{z} in modo che $\chi'(\bar{z}) = b - 2\sigma$, allora la media della distribuzione ottenuta mediante la trasformata di Cramér vale proprio $b - 2\sigma$. Il teorema di Chebyshev mi assicura allora che essa è sostanzialmente concentrata in un intervallo di ampiezza 2σ attorno a tale valore. In altri termini dal teorema di Chebyshev ottengo che

$$\nu_{\bar{z}}\{x : |x - b + 2\sigma| > 2\sigma\} < \frac{1}{4},$$

cioè

$$\nu_{\bar{z}}[b - 4\sigma, b] > \frac{3}{4}.$$

Si può ora trovare una minorazione per la misura $\mu[a, b]$ dell'intervallo $[a, b]$ in termini della trasformata di Cramér nel seguente modo. Si ha

$$\begin{aligned} \mu[a, b] &= \int_{[a, b]} d\mu = e^{\chi(\bar{z})} \int_{[a, b]} e^{\bar{z}x} d\nu_{\bar{z}} \geq e^{\chi(\bar{z})} \int_{[b-4\sigma, b]} e^{\bar{z}x} d\nu_{\bar{z}} \geq \\ &\geq \exp(\chi(\bar{z}) + (b - 4\sigma)\bar{z}) \nu_{\bar{z}}[b - 4\sigma, b] \geq \\ &\geq \exp(\chi(\bar{z}) + (b - 4\sigma)\bar{z} - 1). \end{aligned}$$

Osserviamo ora che per la definizione di \bar{z} vale (dalla definizione di trasformata di Legendre)

$$\chi(\bar{z}) + (b - 2\sigma)\bar{z} = \Lambda(b - 2\sigma),$$

per cui si ha infine la minorazione

$$\mu[a, b] \geq \exp(\Lambda(b - 2\sigma) - 2\sigma\bar{z} - 1),$$

che è essenzialmente la tesi del teorema. La tesi del teorema si ottiene infine sviluppando al primo ordine la funzione $\Lambda(b - 2\sigma)$ e stimando il resto. Vale infatti

$$\Lambda(b - 2\sigma) = \Lambda(b) - 2\sigma\Lambda'(b^*),$$

con un opportuno $b - 2\sigma < b^* < b$. Poichè $\Lambda(x)$ è una funzione convessa (essendo la trasformata di Legendre di una funzione convessa), ha derivata decrescente, vale cioè

$$\Lambda'(b^*) < \Lambda'(b - 2\sigma);$$

inoltre la dualità di Legendre implica che

$$-\chi'(\bar{z}) = b - 2\sigma \leftrightarrow \bar{z} = \Lambda'(b - 2\sigma),$$

per cui in definitiva si ha, sostituendo

$$\mu[a, b] \geq \exp(\Lambda(b) - 4\sigma\bar{z} - 1),$$

cioè la tesi.

Q.E.D.

§14. Applicazione: la distribuzione di Maxwell-Boltzmann delle velocità. Proponiamoci, come applicazione del teorema precedente, di trovare la distribuzione di velocità di una generica molecola di in un gas. Abbiamo visto nei primi due paragrafi che l'energia cinetica media delle molecole coincide essenzialmente con la temperatura, cioè si deve aver

$$\bar{K} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i^2 = \frac{3}{2} NkT.$$

Siamo allora in un regime di grande deviazione, in quanto si ha $\langle \sum m_i \mathbf{v}_i^2 \rangle = +\infty$ dovuto al fatto che usando la distribuzione di Lebesgue $\langle \mathbf{v}_i \rangle = +\infty$.⁴⁵ Quindi, mentre a priori ci aspettiamo un valore infinito dell'energia cinetica media, a posteriori troviamo un valore finito. Questo condizionamento è così forte da cambiare totalmente la distribuzione della velocità di una particella, che invece di essere uniformemente distribuita su \mathbb{R}^3 , diventa la celebre distribuzione di Maxwell-Boltzmann

$$P(\mathbf{v}^2 < x | \bar{K} = \frac{3}{2} Nk_B T) \sim \int_{\mathbf{v}^2 < x} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m_i \mathbf{v}^2}{2k_B T}\right) dv_x dv_y dv_z.$$

Per dimostrare ciò si usa l'indipendenza delle velocità delle singole particelle, assieme alla stime (35) di grande deviazione. Per l'indipendenza si ha che la probabilità condizionata si può scrivere come

$$P\left(m\mathbf{v}^2 < x \mid 2\bar{K} - \delta K \leq \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i^2 \leq 2\bar{K}\right) = \int_{\mathbf{v}^2 < x} dv_x dv_y dv_z \tag{37}$$

$$P\left(2\bar{K} - \delta K - m\mathbf{v}^2 \leq \sum_{i=2}^N m_i \mathbf{v}_i^2 \leq 2\bar{K} - m\mathbf{v}^2\right),$$

⁴⁵Naturalmente le velocità delle particelle sono distribuite in modo indipendente se usiamo Lebesgue, per cui la media della somma risulta essere la somma delle medie.

dove la sommatoria nell'integrale a secondo membro si estende alle $N - 1$ particelle rimanenti. Per il Teorema 11 di grande deviazione si ha

$$P\left(2\bar{K} - \delta U - m\mathbf{v}^2 \leq \sum_{i=2}^N v_i^2 \leq 2\bar{K} - m\mathbf{v}^2\right) \sim \exp(\Lambda(2\bar{K} - m\mathbf{v}^2)),$$

Ora il termine $m\mathbf{v}^2$ è una piccola perturbazione di $2\bar{K}$, per cui espandendo al primo ordine Λ e definito $\beta = \Lambda'(K)$ la (37) diventa

$$P(\mathbf{v}^2 < x | \bar{K} = \frac{3}{2}Nk_B T) \sim C \int_{\mathbf{v}^2 < x} dv_x dv_y dv_z \exp(-\beta m\mathbf{v}^2).$$

dove $C \stackrel{\text{def}}{=} \exp(\Lambda(2\bar{K}))$ è il fattore di normalizzazione. Questa è evidentemente la distribuzione di Maxwell-Boltzmann purchè valga $\beta = 1/2k_B T$.

Ciò si verifica semplicemente ricordando che, da una parte, per la dualità di Legendre, vale $-\chi'(\beta) = 2\bar{K} = 3Nk_B T$, e dall'altra il calcolo esplicito mostra che

$$\chi(z) = \log \int_{\mathbb{R}^{3N}} e^{-z \sum v_i^2} d\mu = 3N \log \int_{\mathbb{R}} e^{-z v^2} dv = -\frac{3N}{2} \log(z/\pi),$$

da cui si ottiene

$$-\chi'(z) = \frac{3N}{2z}.$$

Quanto esposto in questo e nel paragrafo precedente, è sostanzialmente quanto fatto per la prima volta da Khinchine nel suo già citato libro, in cui per la prima volta viene mostrato che la distribuzione dell'energia E_1 di un sottosistema, molto più piccolo del sistema totale, è canonica. Lasciamo questo esercizio, che non si discosta molto da quello fatto nel testo per la sola energia cinetica, al lettore volenteroso.

§15. Il lemma di Varadhan.

Un secondo teorema importante della teoria delle grandi deviazioni è il cosiddetto Lemma di Varadhan, che permette di dare stime asintotiche ad integrali del tipo

$$\log \int_{[a,b]} \exp(F(x)) d\mu \sim \sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x)), \quad (38)$$

in termine del sup della funzione $F(x) + \Lambda(x)$ sull'intervallo $[a, b]$. Vale infatti

Teorema 12 (Lemma di Varadhan) *Sia X una variabile positiva, μ la relativa misura di probabilità, e $\chi(z)$ e $\Lambda(x)$ siano date rispettivamente dalla (33) e dalla (34) del paragrafo 13. Se $\Lambda(x)$ è regolare ed $F(x)$ continua allora vale*

$$\begin{aligned} \sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x)) - R_m &\leq \\ \log \int_{[a,b]} \exp(F(x)) d\mu &\leq \sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x)) + R_M, \end{aligned} \quad (39)$$

dove R_m è dato dalla (36) del teorema 11, mentre R_M è definito da

$$R_M \stackrel{\text{def}}{=} 1 + \log(M - m + 2)$$

dove

$$M = \sup_{x \in [a,b]} F(x), \quad m = \sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x)). \quad (40)$$

Osservazione. Se F ed Λ sono proporzionali al numero di gradi di libertà del sistema, come capita usualmente in meccanica statistica o nei comuni problemi di teoria delle probabilità, i termini R_M ed R_m nelle stime (39) sono trascurabili. In questo modo si ottiene che il valore dell'integrale è dato dalla (38).

Dalla formula (38) si ottiene direttamente che il calcolo dell'integrale si può fare genericamente tramite la trasformata di Cramér della misura μ , cioè tramite la distribuzione canonica, se μ è la misura di Lebesgue nello spazio delle fasi. Infatti l'estremo superiore di $F(x) + \Lambda(x)$ sull'intervallo $[a, b]$ verrà (genericamente) raggiunto sui bordi dell'intervallo: si tratta dunque di trovare un estremo vincolato all'insieme $x = a$ oppure $x = b$. Se si utilizza il metodo dei moltiplicatori di Lagrange, si tratta dunque di trovare l'estremo libero di $F(x) + \Lambda(x) - \beta x$, dove β deve essere scelto in modo che il massimo cada in $x = a$ oppure $x = b$. Si può anche scrivere dunque

$$\log \int_{[a,b]} \exp(F(x)) d\mu \sim \sup_{x \geq 0} (F(x) + \Lambda(x) - \beta x),$$

pur di prendere per β un valore opportuno. Ora l'osservazione fondamentale è la seguente: la funzione

$$\Lambda^*(x) \stackrel{\text{def}}{=} \Lambda(x) - \beta x,$$

è la trasformata di Legendre della funzione

$$\chi^*(z) \stackrel{\text{def}}{=} \chi(z + \beta),$$

che non è altro che il logaritmo della funzione caratteristica della misura⁴⁶

$$d\nu = e^{-\beta x} d\mu.$$

⁴⁶Vale infatti ovviamente:

$$\log \int_{\mathbb{R}} e^{-zx} d\nu = \log \int_0^{+\infty} e^{-(z+\beta)x} d\mu = \chi(z + \beta).$$

Si ha dunque il seguente corollario

Corollario 3 *Se la funzione $F(x) + \Lambda(x)$ non ha punti critici all'interno dell'intervallo $[a, b]$, allora vale*

$$\log \int_{[a,b]} \exp(F(x)) d\mu \sim \log \int_0^{+\infty} \exp(F(x)) e^{-\beta x} d\mu, \quad (41)$$

con un opportuno β .

Osservazione. Come detto ripetutamente il simbolo \sim di asintotico si deve intendere nel limite in cui si possano trascurare i termini R_m ed R_M nella formula (39).

Sulla base di questo Corollario, nel paragrafo seguente mostreremo come il calcolo delle medie condizionate si riduca all'usuale calcolo delle medie con la distribuzione di Gibbs. Diamo ora di seguito la dimostrazione del Lemma di Varadhan.

Dimostrazione del Lemma di Varadhan. Cominciamo col mostrare la minorazione, mostriamo cioè che vale

$$\log \int_{[a,b]} e^{F(x)} d\mu \geq \sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x)) - R_m.$$

Considero l'insieme (aperto) $O_{x,\varepsilon}$ definito da

$$O_{x,\varepsilon} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ y \in [a, b] : F(y) > F(x) - \varepsilon \right\};$$

ora $O_{x,\varepsilon}$ è un aperto non vuoto (perchè $x \in O_{x,\varepsilon}$) e si ha dunque

$$\int_{[a,b]} e^{F(y)} d\mu \geq \int_{O_{x,\varepsilon}} e^{F(y)} d\mu > e^{F(x)-\varepsilon} \mu(O_{x,\varepsilon}),$$

per cui passando ai logaritmi si trova

$$\log \int_{[a,b]} e^{F(x)} d\mu > F(x) + \varepsilon \sup_{y \in O_{x,\varepsilon}} \Lambda(y) - R_m.$$

dove ho minorato la misura di $O_{x,\varepsilon}$ usando la stima (35) data dal teorema di grande deviazione. Poichè vale sicuramente $\sup \Lambda(y) \geq \Lambda(x)$ trovo alla fine

$$\log \int_{[a,b]} e^{F(x)} d\mu > F(x) + \Lambda(x) - R_m - \varepsilon,$$

e passando al sup su x , prendendo poi il limite $\varepsilon \rightarrow 0$ ritrovo la prima di (39).

Per trovare la maggiorazione bisogna invece operare nel seguente modo. Dividiamo l'intervallo $[a, b]$ in due parti ne modo seguente: definiti M ed m come nella (40) dell'enunciato del Lemma, sia $I \stackrel{\text{def}}{=} [a, b] \cap F^{-1}([m, M])$ ed I^c il suo complementare (in $[a, b]$ ovviamente). Si ottiene allora la prima facile maggiorazione

$$\int_{I^c} e^{F(x)} d\mu \leq e^m \mu(I^c) \leq \exp\left(\sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x))\right),$$

dove l'ultima maggiorazione segue dalla definizione di m e dal fatto che $\mu(I^c) \leq 1$. La maggiorazione dell'integrale sull'altro intervallo richiede un po' di lavoro. Cominciamo col dividere l'intervallo $[m, M]$ in un numero n , per ora arbitrario, di sottointervalli $I_j \stackrel{\text{def}}{=} [m_j, m_{j+1}]$, $j = 0, \dots, n-1$, con

$$m_j = m + \frac{M-m}{n} j .$$

Allora si ha evidentemente

$$\int_I e^{F(x)} d\mu = \sum_{j=0}^{n-1} \int_{I_j} e^{F(x)} d\mu \leq \sum_{j=0}^{n-1} e^{m_{j+1}} \mu(I_j) \leq \sum_{j=0}^{n-1} \exp\left(m_{j+1} + \sup_{x \in I_j} \Lambda(x)\right), \quad (42)$$

dove nell'ultima linea si è usata la maggiorazione (35) del teorema di grande deviazione. Ora si osserva che

$$m_{j+1} = m_j + \frac{M-m}{n} = \inf_{x \in I_j} F(x) + \frac{M-m}{n},$$

per cui

$$\begin{aligned} m_j + \sup_{x \in I_j} \Lambda(x) &= \inf_{x \in I_j} F(x) + \sup_{x \in I_j} \Lambda(x) + \frac{M-m}{n} \leq \\ &\leq \sup_{x \in I_j} (F(x) + \Lambda(x)) + \frac{M-m}{n} \leq \sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x)) + \frac{M-m}{n}. \end{aligned}$$

Usando questa maggiorazione nella sommatoria a secondo membro di (42) trovo dunque

$$\int_I e^{F(x)} d\mu \leq n \exp\left(\sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x)) + \frac{M-m}{n}\right),$$

che assieme alla maggiorazione dell'integrale sull'intervallo I^c già trovata fornisce

$$\log \int_{x \in [a,b]} e^{F(x)} d\mu \leq \sup_{x \in [a,b]} (F(x) + \Lambda(x)) + \log(n+1) + \frac{M-m}{n} .$$

Prendendo ora il valore di n che rende minimo il membro di destra troviamo la maggiorazione fornita dalla (39). **Q.E.D.**

§16. Probabilità condizionata e distribuzione canonica. Siamo ora giunti al punto in cui è possibile risolvere il problema del calcolo della probabilità condizionata. Nell'esempio specifico della termodinamica sappiamo solo che l'energia del sistema vale $U \pm \delta U$, dove δU è l'incertezza con cui si conosce l'energia. Naturalmente si suppone che l'errore relativo $\delta U/U$ sia trascurabile. In alcuni testi di Meccanica Statistica si suppone addirittura che l'errore relativo sia dell'ordine di $1/\sqrt{N}$, dove N è il numero dei gradi di libertà del sistema, cioè sia essenzialmente nullo. Dal punto di vista fisico ciò è inaccettabile, perchè ogni misura ha una precisione finita. Si può quindi ritenere che i dati iniziali per il

sistema siano distribuiti in modo uniforme (con la misura di Lebesgue cioè) nell'insieme corrispondente alle energie appartenenti ad $[U - \delta U, U + \delta U] \stackrel{\text{def}}{=} \Delta$. Allora la media condizionata di una generica variabile aleatoria $F(x)$ si calcolerà nel modo seguente

$$\langle F \rangle_U = \frac{\int_{\Delta} F(x) d\mu}{\int_{\Delta} d\mu} = \partial_{\varepsilon} \log \int_{\Delta} \exp(\varepsilon F(x)) d\mu \Big|_{\varepsilon=0} .$$

Ora utilizzando il Corollario 3 al Lemma di Varadhan, si può anche scrivere

$$\langle F \rangle_U = \partial_{\varepsilon} \log \int_0^{+\infty} \exp(\varepsilon F(x)) e^{-\beta H} d\mu \Big|_{\varepsilon=0} = \frac{\int_0^{+\infty} F(x) e^{-\beta H} d\mu}{Z(\beta)} ,$$

cioè la media condizionata coincide con la media canonica, pur di prendere un valore di β opportuno. Nel paragrafo precedente si è visto che β deve essere scelto in modo che i punti critici della funzione $\varepsilon F(x) + \Lambda(x) - \beta x$ cadano sul bordo Δ . Devo dunque scegliere β in modo che le soluzioni di

$$\nabla F + (\Lambda' - \beta) \nabla x = 0$$

cadano sul bordo di Δ ; ma tali soluzioni, nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$ diventano soluzione di $\Lambda'(x) - \beta = 0$ con $x = U \pm \delta U$. Se si trascura l'errore, trovo che β vale

$$\beta = \Lambda'(U) .$$

Questo risultato si riformula nel modo standard, ricordando che, per la dualità di Legendre, questa relazione è equivalente a

$$-\chi'(\beta) = U .$$

Come detto precedentemente $-\chi'(z)$ coincide con la media canonica dell'energia, cioè β deve essere scelto in modo che la media canonica dell'energia sia U . Questa è la prescrizione usuale della Meccanica Statistica a partire da Boltzmann.

Appendici

A.1 Il teorema di Krylov–Bogoliubov

Nella nostra esposizione siamo partiti dai sistemi Hamiltoniani, in cui si conosce almeno una misura invariante (quella di Lebesgue), ed in cui si riesce a caratterizzare completamente le misure invarianti assolutamente continue rispetto a quella di Lebesgue. Krylov e Bogoliubov sono stati i primi che negli anni trenta del secolo scorso hanno cercato di estendere i metodi della teoria ergodica anche ai sistemi dissipativi non hamiltoniani. Il primo problema da superare é che in tal caso non esiste una misura invariante “naturale” (come quella di Lebesgue per il caso Hamiltoniano). Il primo sforzo dei due autori fu dunque indirizzato a determinare una misura invariante per questi sistemi, enunciando e provando il seguente⁴⁷

Teorema 13 (Krylov–Bogoliubov) *Se Φ é un diffeomorfismo di una varietà compatta \mathcal{M} , allora esiste sempre una misura ν invariante per Φ .*

L’idea, semplice e geniale allo stesso tempo, consiste nel cercare di determinarla a partire da un’altra μ (ad esempio quella di Lebesgue), facendone la media temporale, cioè nel definire inizialmente ν_n mediante la

$$\nu_n(A) = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \mu(\Phi^{-k}A).$$

e di studiarne poi il limite. Se la misura limite per $n \rightarrow \infty$ esistesse, allora tale misura sarebbe ovviamente Φ invariante. Quello che gli autori mostrarono fu che esiste almeno una sottosuccessione convergente (in un senso opportuno) ad una misura invariante. Noi non daremo la dimostrazione seguendo questa linea, perché pur permettendo di approfondire in modo notevole la struttura delle misure invarianti, richiede delle nozioni abbastanza approfondite di teoria della misura e di analisi funzionale. La dimostrazione che daremo si basa sulla caratterizzazione delle misure, data dal teorema di Riesz–Radon, come funzionali lineari

⁴⁷Gli autori citati (vedere N. Krylov, N. Bogoliuboff *Annals of Math.*, **38**, 65–113 (1937)) in effetti dimostrarono il teorema in ipotesi piú forti, cioè per i semigrupperi ad un parametro di omomorfismi di uno spazio topologico compatto separabile, e non solo per i gruppi discreti di diffeomorfismi di una varietà differenziabile.

limitati sullo spazio delle funzioni continue a supporto compatto (con la norma dell'estremo superiore). Per spiegare il significato di questa frase, cominciamo a considerare \mathcal{M} un insieme compatto, e lo spazio vettoriale $C(\mathcal{M})$ delle funzioni continue (a valori reali) su \mathcal{M} . Definiamo la norma mediante

$$\|f\| = \sup_{x \in \mathcal{M}} |f(x)|,$$

allora $C(\mathcal{M})$ risulta essere uno spazio di Banach. Notiamo che per ogni misura μ , posso definire un funzionale lineare φ_μ limitato in tale spazio ponendo

$$\langle \varphi_\mu | f \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{M}} f(x) d\mu.$$

La linearità risulta evidente, e la limitatezza segue da

$$|\langle \varphi_\mu | f \rangle| \leq \int_{\mathcal{M}} |f(x)| d\mu \leq \mu(\mathcal{M}) \|f\|.$$

Il teorema di Riesz–Radon afferma che vale anche l'inverso, cioè che un funzionale limitato su $C(\mathcal{M})$, mi determina univocamente una misura (finita e borelliana) su \mathcal{M} .

Se la misura μ è invariante per Φ , allora il funzionale φ_μ è invariante, nel senso che

$$\langle \varphi_\mu | f \rangle = \langle \varphi_\mu | f \circ \Phi \rangle;$$

viceversa un funzionale invariante per Φ , determinerà una misura parimenti invariante.

Dimostrazione. Il candidato più naturale per tale funzionale, consiste nella media temporale di $f(x)$ lungo un'orbita $\Phi^n x_0$ (essendo x_0 un punto fissato una volta per tutte), cioè definire φ mediante la

$$\langle \varphi | f \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n f(\Phi^j x_0).$$

Sicuramente tale funzionale è lineare, limitato⁴⁸ ed invariante: l'unico problema è che non è detto che tale limite esista per ogni funzione continua f . Mostreremo che esiste almeno una successione di interi $\{m_n\}$ con $m_n \rightarrow \infty$, tale per cui, per ogni $f(x)$ la media temporale esiste, cioè si può definire un funzionale lineare limitato ed invariante mediante la

$$\langle \varphi | f \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{m_n} \sum_{j=0}^{m_n} f(\Phi^j x_0).$$

⁴⁸La limitatezza segue dalle disuguaglianze

$$\left| \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n f(\Phi^j x_0) \right| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n |f(\Phi^j x_0)| \leq \|f\| \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n 1 = \|f\|.$$

Per determinare $\{m_n\}$, cominciamo col notare che lo spazio $C(\mathcal{M})$ è separabile, cioè esiste un insieme numerabile $\{f_n(x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ di funzioni tali che le loro combinazioni lineari sono dense.⁴⁹ La strategia consiste nel definire inizialmente il funzionale per le funzioni $f_n(x)$, estenderlo per linearità alle combinazioni lineari di tali funzioni, e poi per continuità a tutto le funzioni di $C(\mathcal{M})$.

Cominciamo allora a considerare le medie temporali delle sole funzioni $f_k(x)$, cioè consideriamo le successioni $\{s_n^{(k)}\}$ definite da

$$s_n^{(k)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n f_k(\Phi^j x_0).$$

Mostriamo, tramite il procedimento diagonale, che esiste una sequenza di interi m_n tale per cui $\{s_{m_n}^{(k)}\}$ converge per ogni k .

Cominciamo col notare che $\{s_n^{(1)}\}$ è una successione limitata (dalla norma $\|f_1\|$ di $f_1(x)$), per cui se non converge, tuttavia ammette sicuramente un punto limite, cioè esiste una sottosuccessione $\{s_{n_1}^{(1)}\}$ convergente (ad un dato valore).

Consideriamo ora la successione $\{s_{n_1}^{(2)}\}$: è anch'essa limitata (dalla norma $\|f_2\|$), per cui esiste una sottosuccessione $\{s_{n_2}^{(2)}\}$ convergente. Notiamo ora che la successione di interi $\{n_2\}$ è una sottosuccessione della successione $\{n_1\}$, per cui anche $\{s_{n_2}^{(1)}\}$ converge al medesimo limite cui converge $\{s_{n_1}^{(1)}\}$.⁵⁰ Procedendo per induzione, per un k arbitrario, possiamo trovare successioni di interi $\{n_k\}$, sottosuccessioni di $\{n_j\}$ per ogni $j < k$, tale per cui $\{s_{n_k}^{(k)}\}$ converge, e parimenti $\{s_{n_k}^{(j)}\}$ converge per $j < k$.

Ora applichiamo il procedimento diagonale di Cantor alle successioni $\{n_k\}$ viste come una tabella infinita, cioè con la k -esima riga formata dalla successione $\{n_k\}$. Considero la successione $\{m_n\}$ degli elementi sulla diagonale della tabella, cioè l'elemento m_n è n -esimo elemento della riga n -esima. Questa è la successione di interi cercata, cioè quella per cui $\{s_{m_n}^{(k)}\}$ converge per ogni k , in quanto, per ogni k , la successione $\{m_n\}$ per $n > k$ è sottosuccessione di ogni $\{n_j\}$ con $j \leq k$.

Ora è semplice mostrare, per continuità, che le successioni

$$\alpha_{m_n} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{m_n} \sum_{j=0}^{m_n} f(\Phi^j x_0),$$

sono convergenti per una funzione $f(x)$ qualunque. Infatti, per ogni $\varepsilon > 0$, esiste una combinazione lineare (finita) $\sum_k c_k f_k(x)$ che dista in norma da f meno di ε , e questo quindi implica che

$$|\alpha_{m_n} - \sum_k c_k s_{m_n}^{(k)}| \leq \varepsilon \quad \forall m_n > 0.$$

⁴⁹Costituiscono cioè l'analogo di un sistema ortonormale completo per uno spazio di Hilbert.

⁵⁰Ogni sottosuccessione di una successione convergente, converge allo stesso limite.

Allora si avrà

$$|\alpha_{m_{n_1}} - \alpha_{m_{n_2}}| \leq 2\varepsilon + \sum_k c_k |s_{m_{n_1}}^{(k)} - s_{m_{n_2}}^{(k)}|,$$

e passando al limite per $n_1, n_2 \rightarrow \infty$ si trova

$$\limsup_{n_1, n_2 \rightarrow \infty} |\alpha_{m_{n_1}} - \alpha_{m_{n_2}}| \leq 2\varepsilon \quad \forall \varepsilon > 0.$$

La successione α_{m_n} è dunque di Cauchy, cioè convergente.

Q.E.D.

Dalla dimostrazione si può intuire che la misura si concentra sugli attrattori del sistema (punti fissi, cicli limite, od attrattori strani) se ve ne sono. Nel caso non hamiltoniano risulta quindi che la misura non è assolutamente continua rispetto a quella di Lebesgue.

L'altro fatto che emerge è la grande arbitrarietà che emerge nella costruzione della misura invariante. Vi giocano sia la scelta del punto iniziale x_0 , sia l'insieme delle funzioni $f_n(x)$ di base scelte che il loro ordine. Dunque vi possono essere molte misure invarianti per un dato sistema dinamico. A questo proposito, nei due esempi seguenti mostreremo le misure che si ottengono in due semplici casi in cui il procedimento astratto di costruzione delineato nella dimostrazione del teorema, può essere esplicitamente compiuto.

Il primo caso è la rotazione del cerchio di un angolo irrazionale che abbiamo trattata nel Capitolo 1 e poi nel paragrafo 10 di questo capitolo. In particolare, nel paragrafo 10, abbiamo mostrato che per ogni x sul cerchio, la media temporale della funzione $f_k(x) = \exp(2i\pi kx)$ converge alla media in fase con la misura di Lebesgue. Allora per ogni x_0 il funzionale φ (introdotto nella dimostrazione) è definito da

$$\langle \varphi | f_k \rangle = \int_0^{2\pi} f_k(x) dx \quad \forall k,$$

e dunque è evidente che la misura che φ definisce, è la misura di Lebesgue. Un attimo di riflessione, permette di convincersi che la misura di Lebesgue è l'**unica misura invariante** per la rotazione irrazionale. Si tratta quindi di un esempio di sistema dinamico unicamente ergodico secondo la definizione seguente

Definizione 4 *Un sistema dinamico si dice unicamente ergodico, se esiste un'unica misura invariante per il sistema.*

Osservazione. Notiamo che se la misura invariante è unica, allora questa è necessariamente ergodica. Infatti la media temporale di una qualunque funzione determina, usando il teorema di Birkhoff, una funzione invariante. Se quest'ultima non fosse una funzione costante q.o. (come accade se il sistema è ergodico), usandola come densità si potrebbe costruire una misura invariante diversa da quelle di partenza.

Potrebbe sembrare che per sistemi molto "caotici", debba esistere un'unica misura ergodica. Viceversa sull'esempio del gatto di Arnold mostreremo che esistono infinite misure ergodiche. A questo premettiamo il teorema

Teorema 14 *Se un sistema dinamico ammette due distinte misure di probabilità μ_1 e μ_2 ergodiche, allora le due misure sono singolari una rispetto all'altra. Esiste cioè un insieme A_1 tale che $\mu_1(A_1) = 0$ ma $\mu_2(A_1) > 0$, e viceversa, esiste un insieme A_2 tale che $\mu_1(A_2) > 0$ ma $\mu_2(A_2) = 0$.*

Dimostrazione. La dimostrazione si fa per assurdo. Se infatti supponiamo che μ_2 sia assolutamente continua rispetto a μ_1 , cioè che valga

$$\mu_2(A) = \int_A f_2(x) d\mu_1.$$

Allora la densità $f_2(x)$ deve essere una funzione invariante per il flusso. Essendo il flusso ergodico, risulta allora che la densità f_2 è costante, e la condizione di normalizzazione delle misure fornisce l'assurdo $\mu_1 = \mu_2$. Q.E.D.

Consideriamo ora il gatto di Arnold, definito dalla mappa sul toro bidimensionale

$$\mathbf{x}' = \hat{A}\mathbf{x} \quad \mathbf{x} \in [0, 1] \times [0, 1]$$

dove la matrice \hat{A} è data da

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Sappiamo che questo sistema dinamico ammette una varietà stabile W^+ ed una varietà instabile W^- dense sul toro. Cominciamo con il considerare un punto $\mathbf{x}_0 \in W^+$ sulla varietà stabile. Allora l'orbita corrispondente $\Phi^j \mathbf{x}_0$ convergerà sull'origine per $j \rightarrow \infty$. Consideriamo adesso le funzioni

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \exp(2i\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2;$$

essendo funzioni continue allora $f_{\mathbf{k}}(\Phi^j \mathbf{x}_0) \rightarrow f_{\mathbf{k}}(0)$ per ogni \mathbf{k} . Ora vale la proprietà che la media temporale di una quantità convergente ad un certo valore, converge al medesimo valore, cioè vale

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n f_{\mathbf{k}}(\Phi^j \mathbf{x}_0) = f_{\mathbf{k}}(0) \quad \forall \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2.$$

Allora il funzionale φ , è definito come

$$\langle \varphi | f_{\mathbf{k}} \rangle = f_{\mathbf{k}}(0) \quad \forall \mathbf{k},$$

cioè φ definisce la funzione δ di Dirac, cioè una misura concentrata sull'origine. Questa misura è invariante ed ovviamente ergodica, ed, in accordo con il teorema precedente, singolare rispetto alla misura di Lebesgue.

Se invece consideriamo il punto iniziale $\mathbf{x}_0 \in W^-$ sulla varietà instabile otterrò in generale la misura di Lebesgue. La dimostrazione è la seguente. Considerando sempre le funzioni $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$, poichè \mathbf{x}_0 appartiene alla varietà instabile ottengo

$$f_{\mathbf{k}}(\Phi^j \mathbf{x}_0) = \exp(2i\pi \lambda_+^j \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_0)$$

dove $\lambda_+ = 3 + \sqrt{5}/2$ è l'autovalore di \hat{A} maggiore di 1. Quindi per calcolare la media temporale devo essere in grado di calcolare il limite dell'espressione

$$S_n(\alpha) = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n e^{2i\pi\alpha\lambda_+^j},$$

dove si è posto $\alpha = \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_0$. Questo non è affatto facile, mentre è possibile dare la minorazione seguente

$$\int_{\alpha'}^{\alpha''} |S_n(\alpha)|^2 d\alpha \leq \frac{1}{n} \left(1 + \frac{2\lambda_+}{(\lambda_+ - 1)^2} \right),$$

se $\alpha'' - \alpha' < 1$. Allora la successione $\{S_n(\alpha)\}$ converge a zero in norma L^2 , cioè converge quasi ovunque al valore nullo. Allora, tranne che per un insieme di valori \mathbf{x}_0 di misura nulla, la media temporale di $f_{\mathbf{k}}$ è nulla, e quindi il funzione φ assume i valori

$$\langle \varphi | f_{\mathbf{k}} \rangle = 0 = \int_{[0,1] \times [0,1]} \exp(2i\pi\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) dx dy,$$

che mostra appunto come φ definisca proprio la misura di Lebesgue. Per mostrare che vale la minorazione data più sopra si osservi che

$$\begin{aligned} \int_{\alpha'}^{\alpha''} |S_n(\alpha)|^2 d\alpha &= \frac{1}{n^2} \sum_{j_1, j_2} \int_{\alpha'}^{\alpha''} e^{2i\pi\alpha(\lambda_+^{j_1} - \lambda_+^{j_2})} d\alpha \leq \\ &\leq \frac{\alpha'' - \alpha'}{n} + \frac{1}{n^2} \sum_{j_2, j_1 > j_2} \frac{2}{\lambda_+^{j_1} - \lambda_+^{j_2}} \end{aligned}$$

e che le somme a j_2 fissato sono maggiorabili da

$$\sum_{j_1 > j_2} \frac{1}{\lambda_+^{j_1} - \lambda_+^{j_2}} < \frac{\lambda_+}{\lambda_+ - 1} \sum_{j_1 \geq 0} \frac{1}{\lambda_+^{j_1}} < \frac{\lambda_+}{(\lambda_+ - 1)^2}.$$

Un altro tipo di misure invarianti (e discrete) si ottengono se si considerano le orbite periodiche. Vi sono un numero infinito di orbite periodiche di periodo n arbitrario, che si ottengono risolvendo l'equazione

$$A^n \mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{b}$$

dove \mathbf{b} è un vettore a coefficienti interi, di modo che \mathbf{x} ed $\hat{A}^n \mathbf{x}$ rappresentino il medesimo punto sul toro. Poichè gli autovettori di A^n sono diversi da 1,⁵¹ allora la soluzione è data da

$$\mathbf{x} = (A^n - \mathbf{1})^{-1} \mathbf{b}.$$

⁵¹Gli autovettori di \hat{A}^n , sono ovviamente λ_+^n ed λ_-^n , con $\lambda_{\pm} = 3 \pm \sqrt{5}/2$ gli autovalori di \hat{A} .

La misura invariante si ottiene dando un peso $1/n$ eguale ad ogni punto dell'orbita, o più formalmente ponendo $\mu = 1/n \sum \delta(\mathbf{x} - \Phi^j \mathbf{x}_0)$, dove $\delta(\mathbf{x})$ è la funzione delta di Dirac.

Come si vede esistono infinite misure invarianti. Per poter privilegiare una misura rispetto ad un'altra occorre un criterio che sia esterno alla presente teoria.

A.2 Dimostrazione del teorema di Kac.

Introduciamo gli insiemi A_k dei punti dell'insieme A , che ritornano in A esattamente dopo k iterazioni

$$A_k = \{x \in A : \Phi^k x \in A, \Phi^j x \in A^c \ 1 \leq j < k\},$$

essendo A^c il complementare di A , allora evidentemente vale

$$\int_A n(x) d\mu = \sum_{k=0}^{+\infty} k \mu(A_k). \quad (43)$$

Gli insiemi A_k vengono ben caratterizzati introducendo gli insiemi C_k definiti da

$$C_k = \Phi^{-1}A^c \cap \dots \cap \Phi^{-k}A^c, \quad C_0 \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{M}.$$

Allora segue

$$A_k = A \cap C_{k-1} \cap \Phi^{-k}A,$$

in quanto, se $x \in A \cap C_k \cap \Phi^k A$, allora innanzitutto $x \in A$, e poi, per ogni $1 \leq j < k$ esistono $x_j \in A^c$ tali che $x = \Phi^{-j}x_j$; cioè $\Phi^j x \in A^c$, mentre $x = \Phi^{-k}x_k$ con $x_k \in A$, cioè $\Phi^k x \in A$. Dunque l'orbita x_j di x , rimane in A^c fino alla $k-1$ -esima iterazione e poi torna in A . Ci si convince facilmente che come gli A_k sono i punti che ritornano in A , C_k rappresentano le orbite che partendo fuori da A (nel suo complementare), rimangono nel complementare per $k-1$ iterazioni.

Un semplice ragionamento probabilistico mostra che la misura di A_k si può esprimere mediante la misura degli insiemi C_k , vale cioè

$$\mu(A_k) = \mu(C_{k+1}) - 2\mu(C_k) + \mu(C_{k-1}). \quad (44)$$

Il vantaggio di tale espressione consiste nel fatto che le somme parziali n -esime della serie che compare a secondo membro della (43) si calcolano esplicitamente. Posponiamo la dimostrazione della (44), e calcoliamo le somme parziali. Si ottiene

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n k \mu(A_k) &= \sum_{k=0}^n k \left(\mu(C_{k+1}) - 2\mu(C_k) + \mu(C_{k-1}) \right) \\ &= 1 - n \left(\mu(C_n) - \mu(C_{n+1}) \right) - \mu(C_n), \end{aligned}$$

che si ottiene ricordando che $\mu(C_0) = 1$, e notando che se nel secondo membro si pone l'indice $k' = k + 1$ nella prima sommatoria e $k'' = k - 1$ nella terza i termini si annullano (esclusi quelli al bordo).

Per prima cosa notiamo che le somme parziali $\sum_{k=0}^n k \mu(A_k)$ formano una sequenza nondecrescente, dunque la successione $n(\mu(C_n) - \mu(C_{n+1})) + \mu(C_n)$ forma una successione non crescente che ammette quindi limite. Ora, gli insiemi C_k formano una successione discendente (cioè $C_k \subset C_{k-1}$) per cui $\mu(C_n)$ forma una successione positiva monotona decrescente, quindi convergente. Allora anche $n(\mu(C_n) - \mu(C_{n+1}))$ ammette limite, e questo limite deve essere nullo. Se per assurdo non fosse nullo, la serie $\sum \mu(C_n) - \mu(C_{n+1})$ non convergerebbe (essendo asintotica ad una serie armonica), mentre le sue somme parziali sono eguali ad $1 - \mu(C_n)$ e dunque convergenti.

Si ottiene allora

$$\sum_{k=0}^{+\infty} k \mu(A_k) = 1 - \lim_{n \rightarrow \infty} \mu(C_n),$$

che immostra innanzitutto che il tempo medio di ritorno è finito. Inoltre, poiché, come mostreremo più sotto, se Φ è metricamente indecomponibile vale $\mu(C_n) \rightarrow 0$, in definitiva otteniamo

$$\sum_{k=0}^{+\infty} k \mu(A_k) = 1,$$

cioè la tesi.

Per mostrare dunque che $\mu(C_n) \rightarrow 0$, cominciamo col considerare l'insieme

$$C = \bigcap_{k=0}^{+\infty} \Phi^{-k} A^c;$$

evidentemente vale $\mu(C_n) \rightarrow \mu C$. Notiamo che si ha

$$\Phi^n C = \bigcap_{k=n}^{+\infty} \Phi^{-k} A^c,$$

per cui segue che $\Phi^{n-1} C \subset \Phi^n C$, cioè $\Phi^n C$ è una sequenza crescente di insiemi, tutti della stessa misura (perchè μ è invariante per Φ). Se \tilde{C} è il limite di tale sequenza di insiemi⁵² allora evidentemente $\Phi \tilde{C} = \tilde{C}$ ed inoltre $\mu(C) = \mu(\tilde{C})$.

⁵²Se B_n è una successione crescente di insiemi, tali cioè per cui $B_n \subset B_{n+1}$, allora si definisce l'insieme limite come l'insieme

$$B = \bigcup_{n=n_0}^{+\infty} B_n.$$

Notiamo che il valore dell'indice inferiore da cui parte l'unione infinita non ha importanza, perchè i prime n_0 insiemi sono comunque contenuti nell'insieme B_{n_0} . Nel nostro caso questo si traduce appunto nell'invarianza di \tilde{C} .

Ora per un flusso metricamente indecomponibile, la misura di un insieme invariante è sempre nulla oppure piena, per cui ne deriva pure che è $\mu(C) = 0$, oppure $\mu(C) = 1$. Il caso $\mu(C) = 1$ è escluso perchè essendo $C \subset A^c$ risulterebbe $\mu(A^c) = 1$, contro l'ipotesi che A sia di misura non nulla. Resta dunque dimostrato che $\mu(C_n) \rightarrow 0$.

Per completare la dimostrazione del teorema non resta che dimostrare la (44). A tal fine si può operare nel modo seguente. Notiamo che vale

$$A \cap C_{k-1} = A \cap C_{k-1} \cap (\Phi^{-k}A \cup \Phi^{-k}A^c) = A_k \cup (A \cap C_k),$$

in quanto nella seconda si può far uso di $\Phi^{-k}A \cup \Phi^{-k}A^c = \mathcal{M}$ e nella terza della proprietà distributiva dell'unione rispetto all'intersezione. Allora per le proprietà della misura otteniamo

$$\mu(A_k) = \mu(A \cap C_{k-1}) - \mu(A \cap C_k), \quad (45)$$

in quanto gli insiemi A_k $A \cap C_k$ sono disgiunti. Ora, valgono le due relazioni

$$\mu(A \cap C_{k-1}) = \mu(C_k) - \mu(C_{k-1}), \quad \mu(A \cap C_k) = \mu(C_{k+1}) - \mu(C_k), \quad (46)$$

che sostituite nella (45), forniscono appunto la (44).

Mostriamo ad esempio la seconda, la prima si dimostra in modo analogo. Vale

$$C_k = (A \cup A^c) \cap C_k = (A \cap C_k) \cup (A^c \cap C_k),$$

perciò la misura di C_k è data da

$$\mu(C_k) = \mu(A \cap C_k) + \mu(A^c \cap C_k).$$

A questo punto, notando che $\varphi^{-1}(A^c \cap C_k) = C_{k+1}$, e che la misura è invariante, trovo

$$\mu(C_k) = \mu(A \cap C_k) + \mu(C_{k+1}),$$

che è la seconda di (45). Con questo la dimostrazione è conclusa.

