

Complementi ed esercizi per il corso di Modelli matematici dei Sistemi Macroscopici

Anna De Masi
a.a. 2009- 2010

Libro di testo:

[P] E. Presutti *Lezioni di Meccanica Statistica* Aracne

Libri di Termodinamica:

[F] E. Fermi *Termodinamica* Boringhieri 1972

[H] K. Huang *Statistical Mechanics* John Wiley 1963

Altri libri:

[G] G. Gallavotti *Statistical Mechanics: a short treatise* Text and monographs in physics, Springer- Verlag 1999

[HG] H. Georgii *Gibbs measures and phase transition* de Gruyter Studies in Mathematics, 9, 1988

[P2] E. Presutti *Scaling Limits in Statistical Mechanics and Microstructures in Continuum Mechanics* Text and monographs in physics, Springer-Verlag 2009, XVI.

Programma del corso

-Settimana 1: Il Gas di Lorentz sul reticolo, distribuzione degli ostacoli, il moto in presenza di ostacoli.

Bibliografia: Capitolo 1 del libro [P] e capitolo 1 di queste note.

-Settimana 2: Limite macroscopico con dati iniziali fissati. Dati iniziali aleatori. Limite macroscopico con dati iniziali aleatori. Identificazione del limite.

Bibliografia: Capitolo 3 del libro [P] e capitolo 1 di queste note.

-Settimana 3: Convergenza alla densità di probabilità macroscopica. Esercizi sull'equazione di Boltzmann lineare. Entropia. Reversibilità -irreversibilità. Soluzioni stazionarie.

Bibliografia: Capitolo 4 ed inizio paragrafo B4 dell'Appendice B del libro [P] e capitolo 1 di queste note.

-Settimana 4: Caso con due tipi di ostacoli: enunciato del teorema di convergenza all'equazione macroscopica. Entropia e soluzioni stazionarie. Massimo dell'entropia nello spazio delle densità in un dominio limitato e a numero di particelle fissato. Conservazione dell'entropia a livello microscopico. Esercizi.

Cenni al modello di Broadwell. Sfere dure ed urti elastici (cenni). Termine di collisione e sue proprietà (senza dimostrazione). Equazione di Boltzmann in un dominio limitato con condizioni elastiche al bordo. Invarianza dello

spazio delle funzioni a numero di particelle ed energia fissata. Teorema H. Soluzioni stazionarie.

Bibliografia: Paragrafo B1 ed inizio paragrafo B4 dell'Appendice B, Appendice C, parte del Capitolo 5 e del Capitolo 6 del libro [P] e capitolo 1 di queste note.

-Settimana 5: Distribuzioni di Maxwell. Massimo dell'entropia sullo spazio delle densità con numero di particelle ed energia fissati.

Termodinamica: lo stato di un sistema termodinamico e le sue trasformazioni. Gas perfetti. Lavoro e quantità di calore. Il primo principio della Termodinamica. Energia interna per un gas perfetto. Secondo principio della termodinamica: enunciati di Kelvin e Clausius. Il ciclo di Carnot. Entropia.

L'equazione di stato per il gas di Boltzmann.

Bibliografia: Paragrafi 6.2 e 7.1 del libro [P]. Per la parte di termodinamica vedasi ad esempio [F], [H].

-Settimana 6: Pressione Cinetica e Pressione Termodinamica. Potenziali termodinamici: energia libera, potenziale di Gibbs e potenziale Ω . Variabili indipendenti per i potenziali termodinamici, trasformata di Legendre (cenni). Variabili intensive ed estensive. Calcolo dei minimi dei potenziali termodinamici nel caso del gas di Boltzmann. Reservoir termico.

Bibliografia: Paragrafi 7.2, 7.3 e 7.4 del libro [P]. Per la parte di termodinamica vedasi ad esempio Capitolo 5 di [F], paragrafo 1.6 di [H]. Esercizi da svolgere (capitolo 2 di queste note) Complementi ed esercizi (appendice A di queste note).

-Settimana 7: Modello d'Ising. Spazio delle fasi ed energia nel modello di Ising. Gas sul reticolo e sua trasformazione in un modello d'Ising. Funzionale di pressione e suo minimo. Misure di Gibbs e configurazioni più probabili. Convessità della pressione. Limite termodinamico per una successione di cubi.

Bibliografia: Paragrafi 8.1, 8.2 e paragrafi D.1 e D.2 nell'Appendice D del libro [P].

-Settimana 8: Successioni di van Hove. limite termodinamico per una successione di van Hove.

Bibliografia: Paragrafo 8.4 del libro [P].

-Settimana 9: Energia libera nel modello d'Ising. Ensembles statistici: misure di Gibbs canonica e microcanonica per il modello d'Ising. Modello di campo medio. Cenni al problema dell'equivalenza degli ensembles

Bibliografia: capitolo 3 di queste note

-Settimana 10: Numero di stati ad energia vicina ad un valore fissato. limite termodinamico dell'entropia. Dimostrazione della validità della relazione termodinamica tra entropia e pressione nel caso di variabili aleatorie indipendenti. Esercizi.

Bibliografia: capitolo 3 di queste note.

–**Settimana 11:** Transizione di fase. Equazione di stato di van der Waals, regola delle aeree di Maxwell. Termodinamica del campo medio.

Bibliografia: capitolo 3 di queste note.

–**Settimana 12:** Modello d’Ising di primo vicino. Dipendenza dalle condizioni al contorno. Caso di una dimensione. Argomento di Peierls in due dimensioni.

Bibliografia: capitolo 3 di queste note.

–**Settimana 13:** Misure di Gibbs per sistemi di particelle. Misura di Gibbs Gran-canonica. Stabilità della materia. Misura di Gibbs canonica, principio variazionale per l’energia libera. sistemi isolati e misura di Gibbs microcanonica.

Bibliografia: Paragrafo 9.1 e 9.2 del libro [P].

–**Settimana 14:** Definizione della misura di Gibbs microcanonica ed invarianza temporale. Flusso Hamiltoniano e proprietà dell’insieme delle misure invarianti. Misure estremali e misure ergodiche. Definizioni equivalenti di ergodicità. Ipotesi ergodica.

Bibliografia: Paragrafo E.1 ed enunciato Teorema E.2.1 dell’Appendice E del libro [P]. Paragrafo 10.1 (prima parte) del libro [P].

–**Settimana 15:** Teorema di Birkhoff continuo e discreto. Esempio semplice di sistema non ergodico. Cenni al biliardo di Sinai.

Bibliografia: Paragrafo 10.1 (prima parte) e Paragrafo 10.2 del libro [P]. Capitolo 4 di queste note.

Indice

1	Modello di Lorentz	5
1.1	Esercizi sul Gas di Lorentz	5
1.2	Esercizi sull'equazione lineare di Boltzmann	9
1.3	Entropia	12
2	Modello di Boltzman	17
2.1	Esercizi sull'equazione di Boltzmann	17
3	Modello di Ising	20
3.1	Introduzione	20
3.2	Energia Libera	22
3.3	Modello di Campo Medio	25
3.4	Ensemble micro-canonico	29
3.5	Esercizi	34
3.6	Transizione di fase	36
3.7	Termodinamica del campo medio	39
3.8	Modello d'Ising con interazione di primi vicini.	42
4	Ipotesi Ergodica	49
4.1	Il Teorema di Birkhoff	49
4.2	Sistemi Ergodici	53
A	Potenziali Termodinamici	54

Capitolo 1

Modello di Lorentz

1.1 Esercizi sul Gas di Lorentz

In accordo con il Capitolo 1 del libro di testo, Λ_ϵ è un quadrato in \mathbb{Z}^2 di lato proporzionale a ϵ^{-2} . Gli elementi dello spazio campione, cioè le configurazioni di ostacoli, sono indicati con $\underline{b} = \{b(q), q \in \Lambda_\epsilon\}$. La distribuzione di probabilità degli ostacoli (indicata con P^ϵ) e' la misura prodotto su $\{0, 1, 2\}^{\Lambda_\epsilon}$, $P^\epsilon(\underline{b}) = \prod_{q \in \Lambda_\epsilon} \pi_\epsilon(b(q))$ con $\pi_\epsilon(0) = 1 - \rho\epsilon$ ($\rho\epsilon \in (0, 1)$) mentre la probabilità che in un sito vi sia un ostacolo di tipo 1 è $\pi_\epsilon(1) = p\rho\epsilon$, $p \in [0, 1]$. Quindi $\pi_\epsilon(2) = (1 - p)\rho\epsilon$.

Esercizio 1.1.1 *Calcolare la densita' media di ostacoli in una regione $\Delta \subset \Lambda_\epsilon$ che contiene N siti.*

Soluzione. Sia $\Delta = \{q_1, \dots, q_N\}$. Per $i = 1, \dots, N$ sia σ_i la v.a. che vale 0 se in q_i non ci sono ostacoli, cioè se $b(q_i) = 0$ altrimenti $\sigma_i = 1$. Per definizione di P^ϵ , le v.a. $\{\sigma_i, i = 1, \dots, N\}$ sono i.i.d. di Bernoulli con parametro $\rho\epsilon$. Indichiamo con $n_\Delta(\underline{b})$ il numero di ostacoli in Δ quando la configurazione è \underline{b} , quindi

$$n_\Delta(\underline{b}) = \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

e la densita' di ostacoli in Δ quando la configurazione è \underline{b} è $n_\Delta(\underline{b})/N$. Poiché

$$E^\epsilon(n_\Delta) = N\rho\epsilon$$

la densita' media di ostacoli in Δ è $\rho\epsilon$.

Esercizio 1.1.2 *Si consideri una partizione di \mathbb{Z}^2 fatta di quadrati $\Delta(\epsilon)$ di lato $L(\epsilon)$. Come deve dipendere $L(\epsilon)$ da ϵ affinché in ciascun quadrato il numero medio di ostacoli converga a 1 quando $\epsilon \rightarrow 0$?*

Soluzione. Sia $\Delta(\epsilon)$ un quadrato di lato $L(\epsilon)$ in Λ_ϵ e $n_\epsilon(\underline{b})$ il numero di ostacoli in $\Delta(\epsilon)$ quando la configurazione di ostacoli è \underline{b} . In base a quanto visto nell'esercizio 1.1.1

$$E^\epsilon(n_\epsilon) = L(\epsilon)^2 \rho \epsilon$$

Se $L(\epsilon)$ è proporzionale a $\epsilon^{-1/2}$ allora il numero medio di ostacoli rimane finito nel limite $\epsilon \rightarrow 0$. In particolare per avere nel limite in media un ostacolo per quadrato basta scegliere

$$L(\epsilon) = \text{parte intera di } \frac{1}{\sqrt{\rho \epsilon}}$$

In d dimensioni

$$L(\epsilon) = \text{parte intera di } (\rho \epsilon)^{-1/d}$$

Esercizio 1.1.3 Sia X la coordinata x del sito dove avviene il primo urto di una particella che al tempo 0 è nello stato $(0, e_1)$. Calcolare la legge di X ed il suo valor medio $\ell(\epsilon) := E^\epsilon(X)$. Si determini infine il limite di $\epsilon \ell(\epsilon)$.

Soluzione. La v.a. X ha distribuzione geometrica di parametro $p_\epsilon := \rho \epsilon$, infatti

$$P^\epsilon(X = n) = (1 - p_\epsilon)^{n-1} p_\epsilon$$

Quindi

$$E^\epsilon(X) = (1 - p_\epsilon)/p_\epsilon = \epsilon^{-1} \frac{(1 - \rho \epsilon)}{\rho}$$

e

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon E^\epsilon(X) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon(1 - \rho \epsilon)}{\rho \epsilon} = \frac{1}{\rho}$$

Osservazioni. La quantità $L(\epsilon)$ di cui all'esercizio 1.1.2 è una misura della distanza media tra ostacoli, nel senso che se usiamo $L(\epsilon)$ come nuova unità di lunghezza, allora la densità di ostacoli diventa uguale a 1.

La quantità $\ell(\epsilon)$, definita nell'esercizio 1.1.3, ha invece il significato di cammino libero medio definito come la media della distanza percorsa fino al primo urto.

Sia $L(\epsilon)$ che $\ell(\epsilon)$ sono scelti in modo che il volume delle regioni usate nel definirli, sia l'inverso della densità. Causa la diversità delle forme di queste regioni, i valori di $L(\epsilon)$ e $\ell(\epsilon)$ sono molto diversi, infatti $L(\epsilon) \approx [\rho \epsilon]^{-1/d}$ mentre $\ell(\epsilon) \approx [\rho \epsilon]^{-1}$.

Esercizio 1.1.4 Si consideri una particella del gas di Lorentz che si muove in presenza di ostacoli solo di tipo 1. Sapendo che al tempo t la particella è in q , specificare la minima regione di \mathbb{Z}^2 dove si trovano gli ostacoli che possono influenzare il moto ai tempi $s \geq t$.

Soluzione. Poiché le traiettorie sono fatte di segmenti orizzontali e verticali percorsi rispettivamente nelle direzioni e_1 ed e_2 , la traiettoria dopo t apparterrà al quadrante $K_q^+ = \{q' = (q'_x, q'_y) \in \mathbb{Z}^2 : q'_x \geq q_x, q'_y \geq q_y\}$, $q = (q_x, q_y)$. Come visto nella dimostrazione del Teorema 1.3.1, una traiettoria $(q_s, v_s)_{s \geq t}$ dipende solo dai valori $\{b(q_s)\}_{s \geq t}$. La presenza o meno di ostacoli al di fuori di K_q^+ è dunque irrilevante, per il moto dopo t . Inoltre, dato un qualunque punto di K_q^+ , esiste una traiettoria $(q_s, v_s)_{s \geq t}$ che passa per quel punto, quindi K_q^+ è la minima regione in cui occorre conoscere gli ostacoli per determinare il moto dopo t .

Esercizio 1.1.5 Si indichi con $P^\epsilon(v([\epsilon^{-1}\tau]) = v)$, $\tau > 0$, la probabilità che al tempo $[\epsilon^{-1}\tau]$ la velocità sia v . Utilizzando il Teorema 1.3.1 del libro di testo con una opportuna scelta della funzione ϕ , si dimostri che $P^\epsilon(v([\epsilon^{-1}\tau]) = v)$ ha un limite, $P(v, \tau)$, per $\epsilon \rightarrow 0$. Per quale valore di v , $P(v, \tau)$ è massimo? Calcolare il limite di $P(v, \tau)$ per $\tau \rightarrow \infty$.

Soluzione. L'esistenza del limite segue dal risultato generale di convergenza dimostrato per funzioni $\phi(r, v)$ regolari e limitate scegliendo per $\phi(r, v)$ la funzione caratteristica che $v = e_i$ (indipendente da r). Si ha allora

$$P(e_1, \tau) = e^{-\rho\tau} \sum_{n \text{ pari}} \rho^n \int_0^\tau d\tau_n \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 = \Gamma(\mathbf{1}_{v=e_1}, \tau)$$

Quindi

$$P(e_1, \tau) = e^{-\rho\tau} \cosh(\rho\tau), \quad P(e_2, \tau) = e^{-\rho\tau} \sinh(\rho\tau)$$

e $P(e_1, \tau) > P(e_2, \tau)$, $P(e_1, \tau) \rightarrow 1/2$ per $\tau \rightarrow \infty$.

Esercizio 1.1.6 In una variante del gas di Lorentz, l'evoluzione è definita dalla legge di aggiornamento $(q_t, v_t) \rightarrow (q_{t+1}, v_{t+1})$, dove

$$v_{t+1} = T_{b(q_t)}(v_t)$$

è la stessa del gas normale, mentre

$$q_{t+1} = q_t + v_{t+1} + e_1$$

Supponendo che vi siano ostacoli solo di tipo 1, posti indipendentemente con probabilità $\rho\epsilon$ e che lo stato iniziale sia $(q_0, v_0) = (0, e_1)$, si determini (in forma di serie convergente) il limite per $\epsilon \rightarrow 0$ di $E^\epsilon(\phi(\epsilon q_t, v_t))$, $t = \epsilon^{-1}\tau$. Qual'è la nuova equazione per $F_\tau(r, v)$?

Soluzione. Procedendo come nella dimostrazione del Teorema 1.3.1 si ottiene

$$E^\epsilon(\phi(\epsilon q_t, v_t)) = \sum_{n \leq t} \sum_{0 \leq t_1 < \dots < t_n < t} (1 - \rho\epsilon)^{t-n} (\rho\epsilon)^n \phi(\epsilon q_t, v_t) \quad (1.1)$$

dove però

$$q_t = te_1 + v_0 t_1 + v_1(t_2 - t_1) + \cdots + v_n(t - t_n), \quad v_{2k} = e_1, \quad v_{2k+1} = e_2 \quad (1.2)$$

e quindi il limite cercato, $\Gamma(\phi, \tau)$, è

$$\Gamma(\phi, \tau) = e^{-\rho\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \int_0^{\tau} d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \phi(e_1\tau + v_0\tau_1 + \cdots + v_n(\tau - \tau_n), v_n) \quad (1.3)$$

L'equazione macroscopica di evoluzione è

$$\frac{\partial F_{\tau}(r, v)}{\partial \tau} + (v + e_1) \nabla_r F_{\tau}(r, v) = \rho F_{\tau}(r, v^{\perp}) - \rho F_{\tau}(r, v) \quad (1.4)$$

1.2 Esercizi sull'equazione lineare di Boltzmann

La funzione $F_t(r, v)$, $v \in \{e_1, e_2, e_3, e_4\}$, $r \in \mathbb{R}^2$, è la soluzione della seguente equazione lineare di Boltzmann

$$\frac{\partial F_t(r, v)}{\partial t} + v \nabla_r F_t(r, v) = \rho [F_t(r, v^\perp) - F_t(r, v)] \quad (1.5)$$

con dato iniziale $F_0(r, v)$. La funzione $F_0(r, v)$ è una densità di probabilità, quindi è non negativa e la somma su v dell'integrale di F_0 è uguale ad 1.

La (1.5) è stata ricavata nel Capitolo 3 del libro di testo come l'equazione cui soddisfa, nel limite macroscopico, la densità di probabilità di una particella del gas di Lorentz (quando gli ostacoli sono solo di tipo 1). Si è dimostrato che

$$F_t(r, v) = e^{-\rho t} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \int_0^t dt_n \cdots \int_0^{t_n} dt_1 F_0(r - v_0 t_1 - \cdots - v_n(t - t_n), v_0), \quad v_i = v_{i-1}^\perp \quad (1.6)$$

Talvolta useremo notazioni più compatte scrivendo

$$F_t(r, v) = e^{-\rho t} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \int_{D_t^{(n)}} dt F_0(r - \alpha_t(\underline{t}), v_0) \quad (1.7)$$

dove $v_0 = v$ se n è pari, altrimenti $v_0 = v^\perp$, $D_t^{(n)}$ è

$$D_t^{(n)} = \{ \underline{t} \in \mathbb{R}_+^n : 0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_n \leq t \} \quad (1.8)$$

e $\alpha_t(\underline{t})$ (che dipende anche da v) è definito per ogni $\underline{t} \in D_t^{(n)}$ come segue

$$\alpha_t(\underline{t}) = v_0 t_1 - \cdots - v(t - t_n), \quad v_i = v_{i-1}^\perp \quad (1.9)$$

Esercizio 1.2.1 *Si dimostri, usando la (1.6), che se $F_0(r, v)$ ha supporto compatto, allora anche $F_t(r, v)$ ha supporto compatto. Si dimostri inoltre che*

$$\sum_v \int dr F_t(r, v) = \sum_v \int dr F_0(r, v) = 1 \quad (1.10)$$

e che se $F_0(r, v)$ è regolare

$$\sup_{r, v} \left| \frac{\partial^k F_t(r, v)}{\partial r^k} \right| \equiv \left\| \frac{\partial^k F_t}{\partial r^k} \right\|_\infty \leq \left\| \frac{\partial^k F_0}{\partial r^k} \right\|_\infty \quad (1.11)$$

Soluzione. La $F_t(r, v)$ dipende da $F_0(r', \cdot)$ con $|r' - r| \leq t$, quindi $F_t(r, v) = 0$ se $|r| \geq R + t$, dove R è tale che $F_0(r, v) = 0$ per $|r| \geq R$.

Per l'uniforme convergenza della serie nella (1.6), si può invertire l'integrale con la somma ottenendosi

$$\begin{aligned} \sum_v \int dr F_t(r, v) &= e^{-\rho t} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \int_0^t dt_n \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \\ &\quad \times \sum_v \int dr F_0(r - v_0 t_1 - \cdots - v_n(t - t_n), v_0) \mathbf{1}_{v_n=v} \end{aligned}$$

Cambiando variabile d'integrazione nell'integrale in dr , $r' = r - v_0 t_1 - \cdots - v_n(t - t_n)$, si ottiene

$$\sum_v \int dr F_t(r, v) = e^{-\rho t} \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \int_0^t dt_n \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \sum_v \int dr F_0(r, v_0) \mathbf{1}_{v_n=v}$$

Se n è pari, $v_0 = v_n = v$, e

$$\sum_v \int dr F_0(r, v_0) \mathbf{1}_{v_n=v} = \sum_v \int dr F_0(r, v)$$

Analogamente, se n è dispari $v_0 = v^\perp$ e

$$\sum_v \int dr F_0(r, v_0) \mathbf{1}_{v_n=v} = \sum_v \int dr F_0(r, v)$$

Si è quindi ricavata la (1.10).

Per la supposta regolarità di $F_0(r, v)$, la serie delle derivate è uniformemente convergente e le derivate di F_t sono uguali alle serie delle corrispondenti derivate, ottenendosi la (1.11).

Esercizio 1.2.2 Sia $G_t(r, v)$ la funzione definita come

$$G_t(r, v) := F_t(r + vt, v) \quad (1.12)$$

Verificare che $G_t(r, v)$ soddisfa l'equazione differenziale

$$\frac{\partial G_t(r, v)}{\partial t} = \rho [G_t(r + vt - v^\perp t, v^\perp) - G_t(r, v)] \quad (1.13)$$

e l'equazione integrale

$$G_t(r, v) = e^{-\rho t} G_0(r, v) + \int_0^t ds e^{-\rho(t-s)} \rho G_s(r + vs - v^\perp s, v^\perp) \quad (1.14)$$

con $G_0(r, v) = F_0(r, v)$.

Esercizio 1.2.3 Supponendo G_0 limitata, si dimostri che esiste una soluzione limitata G_t della (1.14) e che, per tale soluzione, $\|G_t\| \leq \|G_0\|$. Usando tale risultato si dimostri poi che la soluzione è unica nella classe delle funzioni limitate.

Soluzione. Per l'esercizio 1.2.2 la funzione $G_t(r, v) = F_t(r + vt, v)$ con F data da (1.6) con $F_0 = G_0$ è soluzione della (1.14). Quindi l'esistenza è provata ed inoltre, poiché $\|F_t\| \leq \|F_0\|$, come segue dalla (1.6), se ne deduce che anche $\|G_t\| \leq \|G_0\|$.

Per dimostrare l'unicità, supponiamo esistano due soluzioni G_t e H_t entrambe limitate, $\|G_t\| \leq M$, $\|H_t\| \leq M$ per ogni t . Si ha allora

$$\left| G_t(r, v) - H_t(r, v) \right| \leq \int_0^t ds e^{-\rho(t-s)} \rho \left| G_s(r', v^\perp) - H_s(r', v^\perp) \right|$$

con r' come nella (1.14). Iterando n volte,

$$\left| G_t(r, v) - H_t(r, v) \right| \leq \frac{(\rho t)^n}{n!} 2M$$

(avendo maggiorato l'esponenziale con 1). Quindi $G_t(r, v) = H_t(r, v)$, per l'arbitrarietà di n .

1.3 Entropia

Sia Ω uno spazio discreto, definiamo l'entropia come il funzionale S sulle misure di probabilità P su Ω :

$$S(P) = - \sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) \log P(\omega) \quad (1.15)$$

Al solito indichiamo con $P_\epsilon(\underline{b})$ la probabilità della configurazione di ostacoli e con $Q_\epsilon(q, v)$ la probabilità del dato iniziale (q, v) . \tilde{P}_0 è la probabilità prodotto su $\Lambda_\epsilon \times \mathcal{V}$:

$$\tilde{P}_0(q, v, \underline{b}) = Q_\epsilon(q, v) P_\epsilon(\underline{b})$$

Indichiamo con $S_t(q, v, \underline{b}) = (q(t), v(t))$ l'applicazione che ad ogni dato iniziale e configurazione di ostacoli associa la posizione al tempo t di una particella che si muove secondo l'evoluzione del gas di Lorentz (con 1 oppure con 2 tipi di ostacoli). Si osservi che ad ogni \underline{b} e t fissati l'applicazione $\phi_{t, \underline{b}}(q, v) := S_t(q, v, \underline{b})$ è un'applicazione biunivoca da $\Lambda_\epsilon \times \mathcal{V}$ in se stesso e $\phi_{t, \underline{b}}^{-1}(q, v) = S_{-t}(q, v, \underline{b})$.

Per ogni intero positivo t indichiamo con $\tilde{P}_t(q, v, \underline{b})$ la probabilità che la configurazione di ostacoli sia \underline{b} e lo stato della particella al tempo t sia (q, v) .

Esercizio 1.3.1 *Si dimostri che*

$$S(\tilde{P}_0) = S(Q_\epsilon) + S(P_\epsilon) \quad (1.16)$$

e che l'entropia si conserva cioè per ogni t

$$S(\tilde{P}_t) = S(\tilde{P}_0) \quad (1.17)$$

Soluzione. Per definizione

$$\begin{aligned} S(\tilde{P}_0) &= - \sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) \sum_{q, v} Q_\epsilon(q, v) \{ \log P_\epsilon(\underline{b}) + \log Q_\epsilon(q, v) \} \\ &\quad - \sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) \log P_\epsilon(\underline{b}) \sum_{q, v} Q_\epsilon(q, v) - \sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) \sum_{q, v} Q_\epsilon(q, v) \log Q_\epsilon(q, v) \} \end{aligned}$$

da cui la (1.16) in quanto

$$\sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) = \sum_{q, v} Q_\epsilon(q, v) = 1$$

Si ha

$$\tilde{P}_t(q, v, \underline{b}) = P_\epsilon(\underline{b}) Q_\epsilon(S_{-t}(q, v, \underline{b})) \quad (1.18)$$

Quindi

$$\begin{aligned}
S(\tilde{P}_t) &= - \sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) \sum_{q,v} Q_\epsilon(S_{-t}(q, v, \underline{b})) \{ \log P_\epsilon(\underline{b}) + \log Q_\epsilon(S_{-t}(q, v, \underline{b})) \} \\
&= - \sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) \log P_\epsilon(\underline{b}) \sum_{q,v} Q_\epsilon(S_{-t}(q, v, \underline{b})) \\
&\quad - \sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) \sum_{q,v} Q_\epsilon(S_{-t}(q, v, \underline{b})) \log Q_\epsilon(S_{-t}(q, v, \underline{b})) \\
&= - \sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) \log P_\epsilon(\underline{b}) \sum_{q,v} Q_\epsilon(q, v) - \sum_{\underline{b}} P_\epsilon(\underline{b}) \sum_{q,v} Q_\epsilon(q, v) \log Q_\epsilon(q, v) \\
&= S(P_\epsilon) + S(Q_\epsilon)
\end{aligned}$$

nell'ultimo passaggio si è usato che per ogni fissato valore di \underline{b} l'applicazione $S_{-t}(q, v, \underline{b})$ è biunivoca. Ricordando la (1.16) si conclude che $S(\tilde{P}_t) = S(\tilde{P}_0)$.

I prossimi esercizi hanno lo scopo di dimostrare che se non si tiene conto anche della distribuzione degli ostacoli, allora l'entropia cresce.

Esercizio 1.3.2 *La quantità*

$$S(x) = -x \log x - (1-x) \log(1-x), \quad x \in [0, 1] \quad (1.19)$$

è l'entropia di una probabilità di Bernoulli in $\{0, 1\}$ di parametro x .

Si dimostri che il massimo di $S(x)$ è per $x = \frac{1}{2}$ e che $S'(x)$ è positiva e convessa in $(0, 1/2)$.

Più in generale si determini il grafico di $S(x)$, $S'(x)$ e $S''(x)$.

Soluzione.

$$S'(x) = -\log x + \log(1-x) \quad (1.20)$$

$S'(x)$ è dunque positiva in $(0, 1/2)$ e negativa in $(1/2, 1)$, si annulla in $1/2$ dove $S(x)$ è massima.

$$S''(x) = -\frac{1}{x} - \frac{1}{1-x} \quad (1.21)$$

che è strettamente negativa.

$$S'''(x) = \frac{1}{x^2} - \frac{1}{(1-x)^2} \quad (1.22)$$

che è positiva in $(0, 1/2)$ e negativa in $(1/2, 1)$, quindi $S'(x)$ è convessa in $(0, 1/2)$ e concava in $(1/2, 1)$.

Poiché la funzione $S(x)$ è simmetrica rispetto a $1/2$ bastava studiare la funzione in $(0, 1/2)$.

Esercizio 1.3.3 Si supponga che lo stato iniziale di una particella abbia probabilità

$$Q(q, v) = 0, \quad \forall q \neq 0$$

e, per $p \in (0, 1/2)$,

$$Q(0, v) = \begin{cases} p & \text{se } v = e_2 \\ 1 - p & \text{se } v = e_1 \end{cases} \quad (1.23)$$

Gli ostacoli sono solo di tipo 1 e distribuiti indipendentemente dallo stato iniziale della particella. Indicando con $Q_1^\epsilon(q, v)$ la probabilità di trovare la particella al tempo 1 in (q, v) , si dimostri che $S(Q_1^\epsilon) > S(Q)$ che implica che $S(Q_t^\epsilon) > S(Q)$ per ogni intero t .

Soluzione. Indicando con $\pi = 1 - p\epsilon$ abbiamo

$$Q_1^\epsilon(e_2, e_2) = p\pi + (1-p)(1-\pi); \quad Q_1^\epsilon(e_1, e_1) = (1-p)\pi + p(1-\pi) \quad (1.24)$$

e $Q_1^\epsilon(q, v) = 0$ per gli altri stati.

Indichiamo con

$$\alpha = p\pi + (1-p)(1-\pi) \quad (1.25)$$

e quindi da (1.24) segue che $S(Q_1^\epsilon) = S(\alpha)$ dove (ricorda la (1.19)), $S(\alpha)$ è l'entropia di una Bernoulli di parametro α . Per definizione $S(Q) = S(p)$ l'entropia di una Bernoulli di parametro p . Dobbiamo quindi dimostrare che $S(\alpha) > S(p)$.

Per ipotesi $p < \frac{1}{2}$. Quindi $\frac{1-p}{p} > 1$ e quindi

$$\frac{\alpha}{p} > \pi + \frac{1-p}{p}(1-\pi) > 1$$

Per ϵ piccolo $1 - \pi < \frac{1}{2}$ e questo implica che $\alpha \leq \frac{1}{2}$. In definitiva

$$p < \alpha \leq \frac{1}{2} \quad (1.26)$$

Si ha

$$S(\alpha) - S(p) = \int_p^\alpha dx S'(x) > 0 \quad (1.27)$$

poiché vale la (1.26) e $S'(x) > 0$ per $x < 1/2$, si veda Esercizio 1.3.2.

Il seguente Teorema è noto come disuguaglianza di Jensen.

Teorema Sia $a(x)$ una densità di probabilità e sia $f(x)$ una funzione convessa, allora

$$\int f(x)a(x)dx \geq f\left(\int x a(x)dx\right) \quad (1.28)$$

Più in generale

$$\mathbb{E}(f(X)) \geq f(\mathbb{E}(X))$$

Esercizio 1.3.4 *Nel contesto dell'esercizio 1.3.3 ed usando la disuguaglianza di Jensen si dimostri che*

$$S(\alpha) - S(p) \geq S'(x)(\alpha - p), \quad x = p + \frac{\alpha - p}{2} \quad (1.29)$$

Soluzione. Possiamo riscrivere la (1.27) come

$$S(\alpha) - S(p) = (\alpha - p) \int_p^\alpha S'(x) \frac{1}{\alpha - p} dx > 0 \quad (1.30)$$

e applicare la disuguaglianza (1.28) con $a(x) = (\alpha - p)^{-1} \mathbf{1}_{x \in [p, \alpha]}$ e $f(x) = S'(x) \mathbf{1}_{x \in [p, \alpha]}$. In tale intervallo infatti $S'(x)$ è convessa come visto nell'Esercizio 1.3.2. Si ottiene così la (1.29).

Il seguente esercizio generalizza l'Esercizio 1.3.3 includendo il caso delle distribuzioni $Q_\epsilon(q, v)$ dei dati iniziali considerati nelle lezioni. Poichè si considera il caso con ostacoli solo di tipo 1 non è restrittivo supporre che le velocità possano variare solo nell'insieme $\{e_1, e_2\}$ (per esempio).

Esercizio 1.3.5 *Si supponga che lo stato iniziale di una particella abbia probabilità $Q(q, v)$ come quella del libro di testo, ma supponiamo che dà probabilità non nulla solo ai $v \in \{e_1, e_2\}$. La particella si muove in un reticolo con ostacoli solo di tipo 1 e distribuiti indipendentemente dallo stato iniziale della particella. Indicando con $Q_1^\epsilon(q, v)$ la probabilità di trovare la particella al tempo 1 in (q, v) , si dimostri che $S(Q_1^\epsilon) \geq S(Q)$ che implica che $S(Q_t^\epsilon) > S(Q)$ per ogni intero t .*

Soluzione. Usando i cambi di variabile $q' = q + e_1$ e $q'' = q + e_2$ si ha

$$\begin{aligned} - \sum_{q, v} Q_1^\epsilon(q, v) \log Q_1^\epsilon(q, v) &= \sum_q \{-Q_1^\epsilon(q + e_1, e_1) \log Q_1^\epsilon(q + e_1, e_1) \\ &\quad - Q_1^\epsilon(q + e_2, e_2) \log Q_1^\epsilon(q + e_2, e_2)\} \end{aligned}$$

Lascio per esercizio la dimostrazione della seguente uguaglianza

$$Q_1^\epsilon(q + e_1, e_1) + Q_1^\epsilon(q + e_2, e_2) = Q(q, e_1) + Q(q, e_2) =: Q(q) \quad (1.31)$$

definendo la probabilità P_q su $\{1, 2\}$ come

$$P_q(i) = \frac{Q_1^\epsilon(q + e_i, e_i)}{Q(q)} \quad (1.32)$$

abbiamo (esercizio)

$$S(Q_1^\epsilon) = \sum_q Q(q)[S(P_q) - \log Q(q)] \quad (1.33)$$

Per quanto visto nell'Esercizio 1.3.3, $S(P_q) \geq S(Q_q)$, dove

$$Q_q(i) = \frac{Q(q, e_i)}{Q(q)}, \quad i = 1, 2 \quad (1.34)$$

Quindi

$$S(Q_1^\epsilon) \geq \sum_q Q(q)[S(Q_q) - \log Q(q)] = S(Q) \quad (1.35)$$

in cui l'ultima uguaglianza si ottiene procedendo come per la (1.33).

Capitolo 2

Modello di Boltzman

2.1 Esercizi sull'equazione di Boltzmann

Il gas di Boltzmann è qui descritto da una funzione $f(r, v) \geq 0$ che rappresenta la densità di molecole nell'elemento di volume dello spazio delle fasi di singola particella intorno al punto (r, v) . Si suppone che $f(r, v)$ si annulli quando r è al di fuori di una regione limitata $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ che rappresenta il volume in cui il gas è contenuto.

ESERCIZI DA SVOLGERE

Esercizio 2.1.1 *Si consideri un gas di Boltzmann in una regione cubica Λ divisa da una parete che separa la metà superiore, Λ_1 , da quella inferiore, Λ_2 . La parete (termica) permette scambi di energia ma non di molecole. È inoltre presente un campo esterno il cui potenziale vale U_1 in Λ_1 e $U_2 < U_1$ in Λ_2 . Si determini lo stato di equilibrio del sistema avendo fissato uguale a N_1 il numero di molecole in Λ_1 e uguale a N_2 quello in Λ_2 , mentre l'energia totale è E . Si trovi cioè lo stato $f(r, v)$, $r \in \Lambda$, $v \in \mathbb{R}^d$, in cui l'entropia è massima, condizionatamente ai vincoli*

$$H(f) = \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) \frac{1}{2}mv^2 + U_1 N_1 + U_2 N_2 = E, \quad \int_{\Lambda_i \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) = N_i$$

Si determini la dipendenza da U_1 e U_2 dello stato di equilibrio così trovato.

Esercizio 2.1.2 *Si supponga che un gas di Boltzmann sia confinato nella regione Λ con energia totale E , numero di molecole N e velocità media*

$V = 0$. Gli stati possibili del gas, il cui insieme sarà indicato con $\mathcal{F}(E, N, 0)$, sono le funzioni regolari non negative $f(r, v)$, $r \in \Lambda$, $v \in \mathbb{R}^3$, tali che

$$\int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dv f(r, v) = N, \quad \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) v = 0, \quad \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) \frac{mv^2}{2} = E$$

Si determini lo stato che ha massima entropia in $\mathcal{F}(E, N, 0)$.

Esercizio 2.1.3 Nel contesto dell'esercizio 2.1.2, si supponga che Λ sia un "toro" (cioè un cubo in cui si identificano le facce opposte) e che l'energia totale sia E , il numero di molecole N e la velocità media V :

$$\int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) = N, \quad \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) v = NV, \quad \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) \frac{mv^2}{2} = E$$

Si dimostri che $E \geq mNV^2/2$.

Esercizio 2.1.4 Nel contesto dell'esercizio 2.1.3 in cui il gas nel toro Λ ha numero di molecole N , velocità media V ed energia totale E , $E > mNV^2/2$, l'insieme degli stati, $\mathcal{F}(E, N, V)$, è costituito da tutte le funzioni regolari non negative $f(r, v)$, $r \in \Lambda$, $v \in \mathbb{R}^3$, tali che

$$\int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) = N, \quad \int dr dv f(r, v) v = NV, \quad \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dr dv f(r, v) \frac{mv^2}{2} = E$$

Si determini lo stato di entropia massima in $\mathcal{F}(E, N, V)$.

Soluzione. (suggerimento)

Il caso più semplice di $V = 0$ è stato considerato nell'esercizio 2.1.2. L'idea per il caso generale in cui $V \neq 0$ è di cambiare sistema di riferimento per ridursi al caso precedente.

Per ogni $f(r, v) \in \mathcal{F}(E, N, V)$ si definisca

$$\phi_f(r, v) := f(r, v + V)$$

e si dimostri che $\phi_f \in \mathcal{F}(E', N, 0)$, con $E' = E - mNV^2/2$ (è positivo, per ipotesi).

Dimostrare che viceversa, se $g \in \mathcal{F}(E', N, 0)$, la funzione

$$\psi_g(r, v) := g(r, v - V)$$

è in $\mathcal{F}(E, N, V)$ e, ponendo $f = \psi_g$, si ha $\phi_f = g$ (dimostrarlo). Quindi ϕ_f definisce una corrispondenza biunivoca tra $\mathcal{F}(E, N, V)$ e $\mathcal{F}(E', N, 0)$, la cui inversa è ψ_g . Osserviamo infine che l'insieme $\mathcal{F}(E', N)$ delle funzioni regolari non negative in $\Lambda \times \mathbb{R}^3$ che hanno energia E' e numero di molecole N (non imponendo dunque alcuna condizione sulla velocità media), contiene $\mathcal{F}(E', N, 0)$, $\mathcal{F}(E', N, 0) \subset \mathcal{F}(E', N)$.

Dimostrare che la trasformazione ϕ_f conserva l'entropia (e quindi anche l'inversa ψ_g), cioè

$$S(\phi_f) = S(f), \quad S(g) = S(\psi_g)$$

Concludere la dimostrazione.

Capitolo 3

Modello di Ising

3.1 Introduzione

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

$$\sigma = \{\sigma(x) \in \{-1, 1\}, x \in \Lambda\} \quad (3.1)$$

L'energia $H_\Lambda^{(J)}(\sigma)$, con interazione $\{J(x, y), x \neq y \text{ in } \Lambda\}$ è

$$H_\Lambda^{(J)}(\sigma) = -\frac{1}{2} \sum_{x \neq y} J(x, y) \sigma(x) \sigma(y) \quad (3.2)$$

dove la somma è su tutti gli $x \neq y$ in Λ . Si assume che $J(x, y)$ sia invariante per traslazioni, simmetrico ed a portata finita (cioè esiste R tale che $J(x, y) = 0$ se $|x - y| \geq R$).

Indichiamo con

$$m_\Lambda(\sigma) = \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x) \quad (3.3)$$

la magnetizzazione totale in Λ . L'energia con campo esterno $h \in \mathbb{R}$ è:

$$H_\Lambda(\sigma) = H_\Lambda^{(J)}(\sigma) + H_\Lambda^{(h)}(\sigma); \quad H_\Lambda^{(h)}(\sigma) = -hm_\Lambda(\sigma) \quad (3.4)$$

La misura di Gibbs è

$$\mu_{\beta, h, \Lambda}(\sigma) = \frac{1}{Z_{\beta, h, \Lambda}} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)}, \quad Z_{\beta, h, \Lambda} = \sum_{\sigma} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)} \quad (3.5)$$

In accordo con Gibbs la probabilità definita in (3.5) è anche chiamata *ensemble gran canonico* o *misura di Gibbs gran canonica*.

Esercizio 3.1.1 Sia $\Lambda = [-N, N]^d \cap \mathbb{Z}^d$ e sia $a \in \mathbb{Z}^d$. Indichiamo con $\Delta = \Lambda + a = \{x + a : x \in \Lambda\}$. Dimostrare che

$$H_\Lambda(\sigma) = H_\Delta(\sigma + a) \quad (3.6)$$

Chi è $\sigma + a$?

Esercizio 3.1.2 Quale è il codominio della funzione $m_\Lambda(\sigma)$ definita in (3.3)?

Risposta: L'insieme $\mathcal{M}_\Lambda = \{-|\Lambda| + 2k, k = 0, 1, \dots, |\Lambda|\}$.

Esercizio 3.1.3 Si consideri il modello di Ising in $d = 2$ con energia $H_\Lambda^{(J_\epsilon)}$ con

$$J_\epsilon(x, y) = J^{(1)}(x, y) + \epsilon J^{(2)}(x, y)$$

dove $\epsilon \in [0, 1]$ e $J^{(1)}(x, y)$ e $J^{(2)}(x, y)$ sono interazioni a portata finita, simmetriche ed invarianti per traslazioni. Fissata la temperatura inversa β sia P_ϵ la pressione nel limite termodinamico (ottenuta per esempio come limite della pressione in cubi di lato 2^n). Si dimostri che esiste $c > 0$ (indipendente da ϵ) tale che $|P_\epsilon - P_0| \leq c\epsilon$.

Esercizio 3.1.4 Si consideri il modello d'Ising con $J \equiv 0$ cioè $H_\Lambda(\sigma) = H_\Lambda^{(h)}(\sigma) = -hm_\Lambda(\sigma)$ con $h \in \mathbb{R}$. Indicando con μ la misura di Gibbs, si dimostri che

$$\lim_{h \rightarrow \pm\infty} \mathbb{E}_\mu(m_\Lambda) = \pm|\Lambda| \quad (3.7)$$

Soluzione. Omettendo il sottoindice Λ , abbiamo che

$$\lim_{h \rightarrow -\infty} \frac{1}{|\Lambda|} \mathbb{E}_\mu(m) = \lim_{h \rightarrow -\infty} \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} e^{\beta h m(\sigma)} \frac{m(\sigma)}{|\Lambda|} \quad (3.8)$$

I valori che assume $\frac{m(\sigma)}{|\Lambda|}$ sono $-1 + \frac{2k}{|\Lambda|}$, con $k = 0, \dots, |\Lambda|$ (vedasi Esercizio 3.1.2) e la cardinalità dell'insieme dei σ tali che $m_\Lambda(\sigma) = -|\Lambda| + 2k$ è $\binom{|\Lambda|}{k}$, quindi

$$Z = \sum_{k=0}^{|\Lambda|} \binom{|\Lambda|}{k} e^{\beta h |\Lambda| [-1 + \frac{2k}{|\Lambda|}]} = e^{-\beta h |\Lambda|} \sum_{k=0}^{|\Lambda|} \binom{|\Lambda|}{k} a^k = e^{-\beta h |\Lambda|} (1+a)^{|\Lambda|}, \quad a = e^{2\beta h} \quad (3.9)$$

Da (3.8) ed (3.9) otteniamo

$$\frac{1}{Z} \sum_{\sigma} e^{\beta h m(\sigma)} \frac{m(\sigma)}{|\Lambda|} = -1 + \frac{1}{Z} e^{-\beta h |\Lambda|} \sum_{k=0}^{|\Lambda|} \binom{|\Lambda|}{k} e^{\beta h 2k} \frac{2k}{|\Lambda|} = -1 + a \frac{2}{|\Lambda|} \frac{\sum_k \binom{|\Lambda|}{k} a^{k-1} k}{(1+a)^{|\Lambda|}} \quad (3.10)$$

Poichè

$$\sum_{k=0}^{|\Lambda|} \binom{|\Lambda|}{k} a^{k-1} k = \frac{d}{da} (1+a)^{|\Lambda|} = |\Lambda| (1+a)^{|\Lambda|-1}$$

si ha che

$$\frac{2}{|\Lambda|} \frac{\sum_k \binom{|\Lambda|}{k} a^{k-1} k}{(1+a)^{|\Lambda|}} = \frac{2}{1+a} \quad (3.11)$$

Poichè $a \rightarrow 0$ per $h \rightarrow -\infty$, da (3.11) e (3.10) segue (3.7) nella parte del limite a $-\infty$. L'altro limite si fa allo stesso modo usando che i valori che assume $\frac{m(\sigma)}{|\Lambda|}$ possono essere anche scritti come $1 - \frac{2k}{|\Lambda|}$, con $k = 0, \dots, |\Lambda|$.

Esercizio 3.1.5 *Si consideri il modello d'Ising con $H_{\Lambda}(\sigma) = H_{\Lambda}^{(J)}(\sigma) + H_{\Lambda}^{(h)}(\sigma)$, $J \neq 0$ soddisfa le ipotesi date all'inizio del capitolo. Indicando con μ la misura di Gibbs, si dimostri che anche in questo caso vale (3.7).*

Esercizio 3.1.6 *Si consideri il modello d'Ising con $H_{\Lambda}(\sigma)$ come in (3.4). Sia $P_{\beta, h, \Lambda} = \frac{1}{\beta |\Lambda|} \log Z_{\Lambda}$ la pressione in Λ . Si calcoli $\frac{dP_{\beta, h, \Lambda}}{dh}$ e $\frac{d^2 P_{\beta, h, \Lambda}}{dh^2}$ e se ne concluda che $\frac{d^2 P_{\beta, h, \Lambda}}{dh^2} \geq 0$.*

3.2 Energia Libera

Sia $m^* \in [-1, 1]$ e $T > 0$, definiamo la densità di energia libera F_{Λ} in $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ come un funzionale su $\mathcal{M}_{\Lambda, m^*} =$ insieme delle misure di probabilità su $\{-1, 1\}^{|\Lambda|}$ tali che $\mathbb{E}_{\mu}(m) = m^* |\Lambda|$

$$F_{\Lambda}(\mu) = \frac{1}{|\Lambda|} [\mathbb{E}_{\mu}(H_{\Lambda}^{(J)}) - kTS(\mu)] \quad (3.12)$$

dove $S(\mu)$ è l'entropia di μ :

$$S(\mu) = - \sum_{\sigma} \mu(\sigma) \log(\mu(\sigma)) \quad (3.13)$$

Teorema 3.2.1 *Si ha che*

$$\inf_{\mu \in \mathcal{M}_{\Lambda, m^*}} F_{\Lambda}(\mu) = F_{\Lambda}(\mu_{\beta, h^*, \Lambda}) \quad (3.14)$$

dove $\beta = 1/kT$, $h^* \in \mathbb{R}$ è tale che $\mathbb{E}_{\mu_{\beta, h^*, \Lambda}}(m) = m^*|\Lambda|$ e $\mu_{\beta, h^*, \Lambda}$ è la misura di Gibbs (ricorda (3.4))

$$\mu_{\beta, h^*, \Lambda}(\sigma) = \frac{e^{-\beta H_{\Lambda}(\sigma)}}{Z_{\beta, h^*, \Lambda}}, \quad H_{\Lambda}(\sigma) = H_{\Lambda}^{(J)}(\sigma) + H_{\Lambda}^{(h^*)}(\sigma) \quad (3.15)$$

Inoltre

$$F_{\Lambda, \beta, h^*} := F_{\Lambda}(\mu_{\beta, h^*, \Lambda}) = \frac{-1}{\beta|\Lambda|} \log Z_{\beta, h^*, \Lambda} + h^* m^* \quad (3.16)$$

Dimostrazione. Per tener conto dei due vincoli usiamo i moltiplicatori di Lagrange h e λ e quindi definiamo la funzione g su $[0, 1]^N$, $N := 2^{|\Lambda|} = |\{-1, 1\}^{|\Lambda|}|$,

$$g(\mu(\sigma), \sigma \in \{-1, 1\}^{|\Lambda|}) = \mathbb{E}_{\mu}(H_{\Lambda}^{(J)}) - kTS(\mu) - h(\mathbb{E}_{\mu}(m) - m^*|\Lambda|) - \lambda(\sum_{\sigma} \mu(\sigma) - 1) \quad (3.17)$$

Per determinare i punti stazionari imponiamo che

$$\frac{\partial g}{\partial \mu(\sigma)} = H_{\Lambda}^{(J)}(\sigma) + kT \log(\mu(\sigma)) - hm(\sigma) - \lambda + 1 = 0 \quad (3.18)$$

Quindi

$$\mu(\sigma) = e^{\beta\lambda - 1} e^{-\beta H_{\Lambda}^{(J)}(\sigma) + \beta hm(\sigma)} = e^{\beta\lambda - 1} e^{-\beta H_{\Lambda}(\sigma)} \quad (3.19)$$

Determiniamo λ imponendo che μ sia una misura di probabilità:

$$1 = \sum_{\sigma} \mu(\sigma) = e^{\beta\lambda - 1} \sum_{\sigma} e^{-\beta H_{\Lambda}(\sigma)}, \quad \Rightarrow \quad e^{\beta\lambda - 1} = \frac{1}{Z_{\beta, h, \Lambda}} \quad (3.20)$$

Dimostriamo ora che esiste h^* tale che $\mathbb{E}_{\mu}(m) = m^*|\Lambda|$. Osserviamo che

$$\begin{aligned} \frac{d}{dh} \mathbb{E}_{\mu}(m) &= \frac{1}{Z_{\beta, h, \Lambda}} \sum_{\sigma} e^{-\beta H_{\Lambda}(\sigma)} \beta m(\sigma)^2 - \frac{1}{Z_{\beta, h, \Lambda}^2} \left[\sum_{\sigma} e^{-\beta H_{\Lambda}(\sigma)} \beta m(\sigma) \right]^2 \\ &= \beta \left\{ \mathbb{E}_{\mu}(m^2) - [\mathbb{E}_{\mu}(m)]^2 \right\} = \beta \text{var}(m) > 0 \end{aligned}$$

Quindi $\mathbb{E}_\mu(m)$ è una funzione crescente di h e poichè vale (3.7) l'equazione $\mathbb{E}_\mu(m) = m^*|\Lambda|$ nell'incognita h ammette soluzione unica.

La relazione (3.16) è una semplice verifica. \square

In realtà appare più naturale imporre la condizione sulla magnetizzazione totale puntualmente invece che in media, cioè si opera come segue. Sia $\bar{m} = -1 + \frac{2k}{|\Lambda|}$ $k \in \{0, 1, \dots, |\Lambda|\}$, un fissato valore possibile della densità di magnetizzazione $m_\Lambda(\sigma)/|\Lambda|$, si considera il seguente spazio di configurazioni

$$\mathcal{X}_{\Lambda, \bar{m}}^{\text{can}} = \left\{ \sigma \in \{-1, 1\}^{|\Lambda|} : \frac{m_\Lambda(\sigma)}{|\Lambda|} = \bar{m} \right\} \quad (3.21)$$

Si definisce la *misura di Gibbs canonica* $\mu_{\beta, \Lambda}^{\text{can}}$ come la misura di probabilità su $\mathcal{X}_{\Lambda, \bar{m}}^{\text{can}}$ data dalla solita espressione

$$\mu_{\beta, \Lambda}^{\text{can}}(\sigma) = \frac{1}{Z_{\beta, \Lambda}^{\text{can}}} e^{-\beta H_\Lambda^{\text{can}}(\sigma)}, \quad Z_{\beta, \Lambda, \bar{m}}^{\text{can}} = \sum_{\sigma \in \mathcal{X}_{\Lambda, \bar{m}}^{\text{can}}} e^{-\beta H_\Lambda^{\text{can}}(\sigma)} \quad (3.22)$$

Vale il seguente Teorema la cui dimostrazione è completamente analoga a quella data per il funzionale di pressione Π_Λ .

Teorema 3.2.2 *Sia $\mathcal{M}_{\Lambda, \bar{m}}^{\text{can}}$ lo spazio delle misura di probabilità su $\mathcal{X}_{\Lambda, \bar{m}}^{\text{can}}$ e sia $F_\Lambda(\mu)$ il funzionale dato in (3.12) definito per $\mu \in \mathcal{M}_{\Lambda, \bar{m}}^{\text{can}}$. Si ha che*

$$\inf_{\mu \in \mathcal{M}_{\Lambda, \bar{m}}^{\text{can}}} F_\Lambda(\mu) = F_\Lambda(\mu_{\beta, \Lambda}^{\text{can}}) \quad (3.23)$$

dove $\beta = 1/kT$, e $\mu_{\beta, \Lambda}^{\text{can}}$ è la misura di Gibbs canonica definita in (3.22). Inoltre

$$F_{\Lambda, \beta}^{\text{can}}(\bar{m}) := F_\Lambda(\mu_{\beta, \Lambda}^{\text{can}}) = \frac{-1}{\beta|\Lambda|} \log Z_{\beta, \Lambda, \bar{m}}^{\text{can}} \quad (3.24)$$

Analogamente a quanto fatto per la pressione, si dimostra l'esistenza del limite termodinamico per l'energia libera, vale cioè il seguente risultato.

Teorema 3.2.3 *Dato $m^* \in [-1, 1]$ si consideri una successione $\{m_n\}$ di valori permessi della densità di magnetizzazione $m_\Lambda(\sigma)/|\Lambda|$, e una successione $\{\Lambda_n\}$ di volumi che tende a \mathbb{Z}^d nel senso di van Hove tali che*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{m_n}{|\Lambda_n|} = m^* \quad (3.25)$$

Allora esiste

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F_{\Lambda_n, \beta}^{\text{can}}(m_n) =: F_\beta^{\text{can}}(m^*) \quad (3.26)$$

Osservazioni. Per avere una corretta termodinamica le grandezze termodinamiche devono essere legate dalle relazioni che abbiamo visto. In particolare la pressione è la trasformata di Legendre dell'energia libera (vedasi esercizio 3 nel file [E4]). Quindi il modello è corretto se la pressione $P_{\beta,h}$ ottenuta nel limite termodinamico partendo dall'ensemble gran canonico (Teorema 8.4.2 del libro [P]) è la trasformata di Legendre di $F_{\beta}^{\text{can}}(m^*)$ definita in (3.26). Cioè

$$P_{\beta,h} = \sup_{m \in [-1,1]} [hm - F_{\beta}^{\text{can}}(m)] \quad (3.27)$$

La dimostrazione di (3.27) è complicata ed è nota come *equivalenza degli ensembles*. Noi la dimostreremo in un caso semplice, cioè nel modello di campo medio.

3.3 Modello di Campo Medio

Data una regione $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ con N siti ($|\Lambda| = N$), l'energia di campo medio è quella con interazione $J(x,y) = \frac{1}{N} \mathbf{1}_{x \neq y}$, quindi

$$H_{\Lambda}(\sigma) \equiv H_{\Lambda}^{(J)}(\sigma) = -\frac{1}{2N} \sum_{x \neq y \in \Lambda} \sigma(x)\sigma(y) \quad (3.28)$$

Definiamo la densità di magnetizzazione totale (attenzione uso notazioni diverse da quelle del paragrafo precedente!):

$$m_{\Lambda}(\sigma) := \frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x) \quad (3.29)$$

Come visto precedentemente l'insieme dei possibili valori di m_{Λ} è

$$M_N = \{-1, -1 + 2/N, \dots, -1 + 2n/N, \dots, 1\} \quad (3.30)$$

Dato $m \in M_N$ sia $\mathcal{X}_{\Lambda,m}^{\text{can}}$ come in (3.21), cioè

$$\mathcal{X}_{\Lambda,m}^{\text{can}} = \{\sigma \in \{-1, 1\}^{\Lambda} : m_{\Lambda}(\sigma) = m\} \quad (3.31)$$

Per ogni $\sigma \in \mathcal{X}_{\Lambda,m}^{\text{can}}$,

$$H_{\Lambda}(\sigma) = -\frac{1}{2N} \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x) \left(\sum_{y \neq x} \sigma(y) \right) = -\frac{1}{2N} \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x) [Nm - \sigma(x)]$$

quindi

$$H_{\Lambda}(\sigma) = -\frac{Nm^2}{2} + \frac{1}{2} \quad (3.32)$$

Dunque l'energia è costante in $\mathcal{X}_{\Lambda, m}^{\text{can}}$: questo è il motivo per cui il campo medio è molto semplice. Infatti il limite termodinamico è molto semplice da calcolare come spiego qui sotto. Troveremo che il limite $N \rightarrow \infty$ delle grandezze termodinamiche (energia libera e pressione) esiste e quindi non solo per successioni di van Hove.

Iniziamo col calcolare la funzione di partizione canonica usando (3.32):

$$Z_{\beta, \Lambda, m}^{\text{can}} = e^{-\beta/2} \sum_{\sigma \in \mathcal{X}_{\Lambda, m}^{\text{can}}} e^{\beta N \frac{m^2}{2}} = e^{-\beta/2} e^{\beta N \frac{m^2}{2}} |\mathcal{X}_{\Lambda, m}^{\text{can}}| \quad (3.33)$$

Poichè $m \in M_N$, esiste $n \in \{0, \dots, N\}$ tale che $m = -1 + \frac{2n}{N}$, quindi

$$|\mathcal{X}_{\Lambda, m}^{\text{can}}| = \binom{N}{n}, \quad n = N \frac{m+1}{2} \quad (3.34)$$

Da (3.33) e (3.34) otteniamo dunque

$$\log Z_{\beta, \Lambda, m}^{\text{can}} = -\beta/2 - \beta N \left[-\frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} I_N(m) \right], \quad I_N(m) := \frac{1}{N} \log \binom{N}{n} \quad (3.35)$$

Quindi l'energia libera in Λ , $|\Lambda| = N$ è

$$F_{\Lambda, \beta}^{\text{can}}(m) = \frac{-1}{\beta N} \log Z_{\beta, \Lambda, m}^{\text{can}} = \frac{1}{2N} + F_{\beta, N}(m) \quad (3.36)$$

dove

$$F_{\beta, N}(m) := -\frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} I_N(m) \quad (3.37)$$

Per calcolare il limite termodinamico dell'energia libera quindi bisogna calcolare il limite di $I_N(m)$, cosa che facciamo nel seguente lemma.

Lemma 3.3.1 *Sia $m \in [-1, 1]$. Per ogni $N > 0$ sia n tale che*

$$-1 + \frac{2n}{N} \leq m < -1 + \frac{2(n+1)}{N}$$

Indicando con $m_N = -1 + \frac{2n}{N}$ si ha

$$\lim_{N \rightarrow \infty} I_N(m_N) = -\frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} - \frac{1+m}{2} \log \frac{1+m}{2} =: I(m) \quad (3.38)$$

Dimostrazione. Si usa la seguente formula di Stirling,

$$k! = k^{k+1/2} e^{-k} \sqrt{2\pi} \left(1 + o\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right) \right), \quad k \in \mathbb{N}_+ \quad (3.39)$$

Considerando solo il termine k^k otteniamo

$$\frac{N!}{n!(N-n)!} \sim N^N n^{-n} (N-n)^{-N-n} = e^{N \log N - n \log n - (N-n) \log(N-n)} \quad (3.40)$$

Sostituendo $n \sim N \frac{1+m}{2}$ ed osservando che $N-n \sim N \frac{1-m}{2}$ otteniamo che l'esponente è uguale a

$$\begin{aligned} N \log N - N \frac{m+1}{2} \log N - N \frac{m+1}{2} \log \frac{1+m}{2} - N \frac{1-m}{2} \log N - N \frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} \\ = -N \left[\frac{m+1}{2} \log \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} \right] = NI(m) \end{aligned}$$

Da (3.40) e (3.41) otteniamo che

$$\log \left(\frac{N!}{n!(N-n)!} \right) \sim NI(m) \quad (3.41)$$

Usando tutti i termini in (3.39) si ottiene che esiste $C > 0$ tale che

$$\left| I_N(m_N) - I(m) \right| \leq C \frac{\log N}{N} \quad (3.42)$$

da cui (3.38) segue. \square

Abbiamo quindi dimostrato il seguente teorema.

Teorema 3.3.2 (Limite termodinamico dell'energia libera). *Si ha che per ogni $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, $|\Lambda| = N$,*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} F_{\Lambda, \beta}^{can}(m) = -\frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} I(m) =: F_{\beta}(m) \quad (3.43)$$

dove $I(m)$ è l'entropia di una distribuzione di Bernoulli di parametro $p = \frac{1+m}{2}$.

Consideriamo ora l'ensemble gran canonico, cioè m non è fissato e l'energia contiene il termine di interazione con un campo esterno $h \in \mathbb{R}$

$$H_{\Lambda}(\sigma) = -\frac{1}{2N} \sum_{x \neq y \in \Lambda} \sigma(x)\sigma(y) - hNm_{\Lambda}(\sigma) = -\frac{Nm_{\Lambda}(\sigma)^2}{2} - hNm_{\Lambda}(\sigma) + \frac{1}{2} \quad (3.44)$$

Si ha

Teorema 3.3.3 (Limite termodinamico della Pressione) *Si ha che per ogni $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, $|\Lambda| = N$,*

$$P_{\beta, h} := \lim_{N \rightarrow \infty} P_{\beta, h, \Lambda} = \max_{m \in [-1, 1]} \left\{ hm - F_{\beta}(m) \right\}, \quad F_{\beta}(m) = -\frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} I(m) \quad (3.45)$$

Dimostrazione: Da (3.44), (3.30), (3.31), (3.34) e (3.35) e (3.37) segue che

$$\begin{aligned} Z_{\beta,h,\Lambda} &= \sum_{m \in M_N} e^{-\beta/2} \sum_{\sigma \in \mathcal{X}_{\Lambda,m}^{\text{can}}} e^{\beta N [\frac{m^2}{2} + hm]} = \sum_{m \in M_N} e^{-\beta/2} e^{\beta N [\frac{m^2}{2} + hm]} \left| \mathcal{X}_{\Lambda,m}^{\text{can}} \right| \\ &= e^{-\beta/2} \sum_{m \in M_N} e^{\beta N [hm - F_{\beta,N}(m)]} \end{aligned}$$

Da (3.42) e (3.43) segue che

$$|F_{\beta,N}(m) - F_{\beta}(m)| = |I_N(m) - I(m)| \leq C \frac{\log N}{N} \quad (3.46)$$

sommando e sottraendo $F_{\beta}(m)$ in (3.46) otteniamo

$$Z_{\beta,h,\Lambda} = e^{-\beta/2} \sum_{m \in M_N} e^{\beta N [hm - F_{\beta}(m)]} e^{\beta N [F_{\beta}(m) - F_{\beta,N}(m)]} \quad (3.47)$$

Poiché $|M_N| = N + 1$ da (3.47) otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta N} \log Z_{\beta,h,\Lambda} &\leq \frac{\log(N+1)}{N} + \max_{m \in M_N} [hm - F_{\beta}(m)] + C' \frac{\log N}{N} \\ &\leq \max_{m \in [-1,1]} [hm - F_{\beta}(m)] + c'' \frac{\log N}{N} \end{aligned}$$

Per ottenere una stima dall'alto procediamo come segue. Sia $m^* \in [-1, 1]$ il valore in cui si ottiene il massimo di $hm - F_{\beta}(m)$ e sia n tale che $m^* \in [-1 + \frac{2n}{N}, -1 + \frac{2(n+1)}{N})$, poichè i termini nella somma in (3.47) sono positivi, ed usando (3.46) si ha

$$Z_{\beta,h,\Lambda} \geq e^{-\beta/2} e^{\beta N [hm_N^* - F_{\beta}(m_N^*)]} e^{-\beta C \log N}, \quad m_N^* = -1 + \frac{2n}{N} \quad (3.48)$$

da cui otteniamo

$$\frac{1}{\beta N} \log Z_{\beta,h,\Lambda} \geq -\frac{1}{2N} + [hm_N^* - F_{\beta}(m_N^*)] - \frac{C \log N}{N} \quad (3.49)$$

Poichè che $\lim_{N \rightarrow \infty} m_N^* = m^*$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ hm_N^* - F_{\beta}(m_N^*) \right\} = \max_{m \in [-1,1]} \left\{ hm - F_{\beta}(m) \right\}$$

Quindi (3.45) segue da (3.49) e (3.48). \square

3.4 Ensemble micro-canonico

In un sistema isolato non sono permessi scambi di energia con l'esterno, quindi, in analogia a quanto fatto per il gas di Boltzmann, introduciamo lo spazio delle configurazioni ad energia fissata. Dato $E \in \mathbb{R}$ definiamo quindi

$$\mathcal{X}_{E,\Lambda} = \left\{ \sigma \in \{-1, 1\}^{|\Lambda|} : H_\Lambda(\sigma) = E \right\} \quad (3.50)$$

e consideriamo la densità di entropia come un funzionale su $\mathcal{M}_{\Lambda,E}$ = insieme delle misure di probabilità in $\mathcal{X}_{E,\Lambda}$:

$$S(\mu) := \frac{1}{|\Lambda|} \left[- \sum_{\sigma \in \mathcal{X}_{E,\Lambda}} \mu(\sigma) \log(\mu(\sigma)) \right], \quad \mu \in \mathcal{M}_{\Lambda,E} \quad (3.51)$$

Nel seguente Teorema dimostriamo che l'entropia raggiunge il massimo nella misura di Gibbs μ_E *micro-canonica*: $\mu_E(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E}$.

Teorema 3.4.1 *Si ha che*

$$\max_{\mu \in \mathcal{M}_{\Lambda,E}} S(\mu) = S(\mu_E), \quad \mu_E(\sigma) = \frac{1}{|\mathcal{X}_{E,\Lambda}|} \quad \forall \sigma \quad (3.52)$$

$$S(\mu_E) = \frac{\log\{|\mathcal{X}_{E,\Lambda}|\}}{|\Lambda|} \quad (3.53)$$

Dimostrazione. Introducendo al solito un moltiplicatore di Lagrange λ , definiamo

$$g(\mu(\sigma), \sigma \in \{-1, 1\}^{|\Lambda|}) = -\lambda \left(\sum_{\sigma} \mu(\sigma) - 1 \right)$$

Derivando otteniamo

$$\frac{dg}{d\mu(\sigma)} = \frac{1}{|\Lambda|} \left[-\log(\mu(\sigma)) - 1 - \lambda \right]$$

Quindi un punto stazionario è tale che $\mu(\sigma) = e^{-1-\lambda}$ per ogni σ ; imponendo che il vettore trovato sia una probabilità otteniamo la probabilità uniforme:

$$1 = \sum_{\sigma \in \mathcal{X}_{E,\Lambda}} \mu(\sigma) = e^{-1-\lambda}, \quad \Rightarrow e^{-1-\lambda} = \frac{1}{|\mathcal{X}_{E,\Lambda}|} \quad (3.54)$$

Osserva che tale probabilità è un massimo perchè $-\frac{1}{\mu(\sigma)} < 0$. La relazione (3.53) è una semplice verifica. \square

L'esistenza del limite termodinamico (usando successioni di van Hove) per l'entropia è un teorema delicato che non dimostreremo. Ancora più delicata è l'equivalenza degli ensembles: per esempio una delle relazioni che si vuol dimostrare è che l'entropia è legata alla pressione (entrambe ottenute nel limite termodinamico) dalla relazione

$$S(E) = \inf_{\beta > 0} [\beta P_\beta + \beta E] \quad (3.55)$$

Al fine di illustrare le difficoltà coinvolte dimostro una disuguaglianza valida in generale. Per prima cosa bisogna definire uno spazio delle configurazioni più grande in cui si indebolisce la nozione di numero degli stati con fissata energia introducendo un parametro piccolo δ

$$\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta} = \left\{ \sigma \in \{-1, 1\}^{|\Lambda|} : \left| \frac{H_\Lambda(\sigma)}{|\Lambda|} - E \right| \leq \delta \right\} \quad (3.56)$$

Manderemo $\delta \rightarrow 0$ dopo $|\Lambda| \rightarrow \infty$. Dal Teorema 3.4.1 (ovviamente valido anche in questo caso) sappiamo che la densità di entropia in Λ è data da

$$S_{E,\Lambda,\delta} := \frac{\log N_{E,\Lambda,\delta}}{|\Lambda|}, \quad N_{E,\Lambda,\delta} := |\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}| \quad (3.57)$$

Si ha

Teorema 3.4.2 *Sia P_β la pressione ottenuta come limite termodinamico partendo dall'ensemble gran canonico (Teorema 8.4.2 del libro [P]). Per ogni successione di van Hove $\{\Lambda_n\}$ vale che*

$$\limsup_{\delta \rightarrow 0} \limsup_{n \rightarrow \infty} S_{E,\Lambda_n,\delta} \leq \inf_{\beta > 0} [\beta P_\beta + \beta E] \quad (3.58)$$

e per ogni β ,

$$\liminf_{\delta \rightarrow 0} \liminf_{n \rightarrow \infty} S_{E,\Lambda_n,\delta} \geq \beta P_\beta + \beta E + \liminf_{\delta \rightarrow 0} \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \log \left(\mu_\Lambda(\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}) \right) \quad (3.59)$$

Dimostrazione. Partiamo dalla semplice identità

$$\begin{aligned} N_{E,\Lambda,\delta} &= \sum_{\sigma \in \{-1,1\}^{|\Lambda|}} \mathbf{1}_{|H_\Lambda(\sigma) - |\Lambda|E| \leq \delta |\Lambda|} \\ &= \sum_{\sigma \in \{-1,1\}^{|\Lambda|}} \mathbf{1}_{|H_\Lambda(\sigma) - |\Lambda|E| \leq \delta |\Lambda|} \frac{e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)}}{Z_\Lambda} e^{\beta H_\Lambda(\sigma)} Z_\Lambda \end{aligned}$$

Per la presenza della funzione caratteristica possiamo maggiorare $H_\Lambda(\sigma) \leq |\Lambda|[E + \delta]$ (e minorare $H_\Lambda(\sigma) \geq |\Lambda|[E - \delta]$) nell'ultimo termine: quel che

rimane è la probabilità rispetto alla misura di Gibbs μ_Λ dell'insieme $\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}$, in definitiva otteniamo

$$\begin{aligned} N_{E,\Lambda,\delta} &\leq Z_\Lambda e^{\beta|\Lambda|[E+\delta]} \mu_\Lambda(\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}) \\ N_{E,\Lambda,\delta} &\geq Z_\Lambda e^{\beta|\Lambda|[E-\delta]} \mu_\Lambda(\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}) \end{aligned}$$

Passando ai logaritmi, dividendo per $|\Lambda|$ ed usando che $\mu_\Lambda(\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}) \leq 1$, otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{\log N_{E,\Lambda,\delta}}{|\Lambda|} &\leq \frac{\log Z_\Lambda}{|\Lambda|} + \beta[E + \delta] + \frac{1}{|\Lambda|} \log \left(\mu_\Lambda(\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}) \right) \\ \frac{\log N_{E,\Lambda,\delta}}{|\Lambda|} &\geq \frac{\log Z_\Lambda}{|\Lambda|} + \beta[E - \delta] + \frac{1}{|\Lambda|} \log \left(\mu_\Lambda(\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}) \right) \end{aligned}$$

da cui (3.58) e (3.59) seguono. \square

Dal Teorema 3.4.2 segue che per poter dimostrare l'esistenza del limite e la validità della (3.55) bisogna dimostrare che la probabilità rispetto alla misura di Gibbs dell'insieme $\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}$ tende ad 1 quando $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$. Nel caso semplice di assenza di interazione ($J = 0$) questo si può dimostrare grazie alla legge dei grandi numeri come dimostro qui sotto.

Assumiamo dunque che $J = 0$ ed $h = 1$, quindi l'energia è

$$H_\Lambda(\sigma) = - \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x) \quad (3.60)$$

Indichiamo con $\mu_{\beta,\Lambda}$ la misura di Gibbs con questa energia (è una probabilità prodotto). Sia $\mathcal{X}_{E,\Lambda,\delta}$ come in (3.56), osserva che i valori permessi di E sono i punti dell'intervallo $[-1,1]$. Osserviamo anche che la pressione per questo modello è stata calcolata nel Paragrafo 8.3 del libro [P] ed è data da

$$P_\beta = \frac{\log(2 \cosh \beta)}{\beta} \quad (3.61)$$

Lemma 3.4.3 *Dato $E \in [-1,1]$ esiste β^* tale che*

$$\mathbb{E}_{\mu_{\beta^*,\Lambda}} \left(\frac{H_\Lambda}{|\Lambda|} \right) = E \quad (3.62)$$

Dimostrazione. Si ha che

$$\mathbb{E}_{\mu_{\beta^*,\Lambda}} \left(\frac{H_\Lambda}{|\Lambda|} \right) = - \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} \mathbb{E}_{\mu_{\beta^*,\Lambda}}(\sigma(x)) = - \sum_{a \in \{-1,1\}} \frac{1}{2 \cosh \beta} a e^{\beta a} = - \tanh \beta \quad (3.63)$$

Poichè \tanh è una funzione crescente la tesi segue. \square

Lemma 3.4.4 *Dati E e β^* come in Lemma 3.4.3, si ha*

$$\mu_{\beta^*, \Lambda}(\mathcal{X}_{E, \Lambda, \delta}) \geq 1 - \frac{1 - \tanh^2 \beta^*}{\delta^2 |\Lambda|} \quad (3.64)$$

Quindi

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} \mu_{\beta^*, \Lambda}(\mathcal{X}_{E, \Lambda, \delta}) = 1 \quad (3.65)$$

Dimostrazione. È una banale applicazione della disuguaglianza di Chebyshev. Osserva che con la legge $\mu_{\beta^*, \Lambda}$ le variabili aleatorie $\{\sigma(x), x \in \Lambda\}$ sono i.i.d. ed assumono valori ± 1 con probabilità di 1 data da $p = \frac{e^{\beta^*}}{e^{\beta^*} + e^{-\beta^*}}$ quindi la media è $\tanh \beta^*$ e la varianza $1 - \tanh^2 \beta^*$. \square

Quindi in questo caso semplice abbiamo:

Teorema 3.4.5 *Sia l'energia data da (3.60), allora per ogni $E \in [-1, 1]$,*

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} \frac{\log N_{E, \Lambda, \delta}}{|\Lambda|} = \beta^* P_{\beta^*} + \beta^* E \quad (3.66)$$

con β^* definito in Lemma 3.4.3.

Inoltre, indicando con ν_p la probabilità su $\{-1, 1\}$ tale che $\nu_p(1) = p = \frac{e^{\beta^*}}{e^{\beta^*} + e^{-\beta^*}}$ si ha che

$$\beta^* P_{\beta^*} + \beta^* E = S(\nu_p), \quad S(\nu_p) = \text{entropia di } \nu_p \quad (3.67)$$

Dimostrazione. La (3.66) è una semplice conseguenza di (3.58), di (3.59) con $\beta = \beta^*$ e (3.63).

La (3.67) è una semplice verifica ricordando la definizione di β^* e (3.61):

$$\begin{aligned} S(\nu_p) &= -\nu_p(1)[- \log(2 \cosh \beta^*) + \beta^*] - \nu_p(-1)[- \log(2 \cosh \beta^*) - \beta^*] \\ &= \log(2 \cosh \beta^*) - \beta^* \tanh \beta^* = \beta^* P_{\beta^*} + \beta^* E \end{aligned}$$

\square

Quel che segue è un esempio molto semplice di quanto si fa in teoria dell'informazione. Consideriamo un canale che trasmette messaggi presi da un alfabeto finito Ω : vogliamo valutare la capacità del canale contando quanti messaggi possono essere emessi da una sorgente che invia f con una frequenza ϕ . Questo vuol dire che $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ è una data funzione e ϕ è

un numero nell'intervallo $\phi \in (\min f, \max f)$ e che la quantità che vogliamo determinare è:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log |\mathcal{N}_\delta(N)|}{N}$$

dove

$$\mathcal{N}_\delta(N) = \left\{ (\omega_1, \dots, \omega_N) \in \Omega^N : A_N := \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\omega_i) - \phi \right| \leq \delta \right\} \quad (3.68)$$

Come fatto precedentemente, iniziamo dall'identità

$$|\mathcal{N}_\delta(N)| = \sum_{\omega_1, \dots, \omega_N} \mathbf{1}_{A_N \leq \delta} \frac{p(\omega_1) \cdots p(\omega_N)}{p(\omega_1) \cdots p(\omega_N)} \quad (3.69)$$

e scegliamo opportunamente la probabilità $p(\omega)$ su Ω .

Indicando con $Z_b = \sum_{\omega \in \Omega} e^{bf(\omega)}$ definiamo

$$p(\omega) = \frac{e^{bf(\omega)}}{Z_b}, \quad b \text{ tale che } \sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) f(\omega) = \phi \quad (3.70)$$

Esercizio 3.4.6 *Dimostrare esistenza ed unicità di b .*

Con la scelta (3.70) per $p(\cdot)$, da (3.69) si ottiene

$$|\mathcal{N}_\delta(N)| = \sum_{\omega_1, \dots, \omega_N} \mathbf{1}_{A_N \leq \delta} [p(\omega_1) \cdots p(\omega_N)] e^{-\sum (bf(\omega_i) - \log Z_b)} \quad (3.71)$$

Indicando con

$$S := \log Z_b - b\phi$$

e con P_N la probabilità prodotto $p(\omega_1) \cdots p(\omega_N)$ da (3.71) segue che

$$P_N(A_N \leq \delta) e^{(S-b\delta)N} \leq |\mathcal{N}_\delta(N)| \leq e^{(S+b\delta)N} \quad (3.72)$$

Esercizio 3.4.7 *Dimostrare che*

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log |\mathcal{N}_\delta(N)|}{N} = S \quad (3.73)$$

e che

$$S = \log Z_b - b\phi = - \sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) \log p(\omega) =: S(p) \quad (3.74)$$

In conclusione la capacità del canale è uguale all'entropia della misura di Gibbs p definita in (3.70).

Come abbiamo visto, nelle nostre applicazioni $\Omega = \{-1, 1\}$, \mathbb{N}_+ è sostituito da \mathbb{Z}^d , b è l'inverso della temperatura β e f è sostituita dalla funzione energia che in generale, a differenza di f , e del caso considerato nel Teorema 3.4.5 non dipende soltanto dal singolo spin. Nel caso generale quindi bisogna sostituire la legge dei grandi numeri con un Teorema Ergodico di cui parleremo in seguito.

3.5 Esercizi

Esercizio 3.5.1 *Siano X e Y spazi con un numero finito di punti, $\nu(x, y)$ una probabilità su $X \times Y$ e*

$$\lambda(x) = \sum_{y \in Y} \nu(x, y), \quad \mu(y) = \sum_{x \in X} \nu(x, y) \quad (3.75)$$

le marginali di ν su X e Y . Si dimostri che

$$S(\lambda) \leq S(\nu) \quad (3.76)$$

Sia

$$S(\mu|\lambda) := S(\nu) - S(\lambda) \quad (3.77)$$

Si dimostri che

$$S(\mu|\lambda) \leq S(\mu) \quad (3.78)$$

e che l'ultima disuguaglianza è stretta a meno che $\nu(x, y) = \lambda(x)\mu(y)$.

Soluzione. (suggerimenti)

Si indichi con

$$\nu(x|y) = \frac{\nu(x, y)}{\mu(y)}, \quad \nu(y|x) = \frac{\nu(x, y)}{\lambda(x)} \quad (3.79)$$

le probabilità di una variabile (x o y) condizionata ad aver fissato l'altra. Per dimostrare la prima disuguaglianza in (3.76) si scriva $S(\nu)$ in termini di $\nu(y|x)$. La relazione che si trova permette di scrivere $S(\mu|\lambda)$ in termini di $\nu(y|x)$ e la (3.78) si dimostra usando la disuguaglianza di Jensen.

Esercizio 3.5.2 Sia

$$P = \left\{ \underline{p} = (p_1, \dots, p_n) \in \mathbb{R}_+^n : \sum_{i=1}^n p_i = 1 \right\} \quad (3.80)$$

e $S(\underline{p})$, $\underline{p} \in P$, l'entropia di \underline{p} (pensata come probabilità su $\{1, \dots, n\}$):

$$S(\underline{p}) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad (3.81)$$

Si calcoli il massimo di $S(\underline{p})$ per $\underline{p} \in P$ e dove viene raggiunto.

Esercizio 3.5.3 Nel contesto dell'esercizio 3.5.2 e indicando con

$$P^0 = \{ \underline{p} \in P : p_i \in (0, 1) \text{ per ogni } i = 1, \dots, n \} \quad (3.82)$$

si consideri l'equazione di evoluzione

$$\frac{dp_i}{dt} = - \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_j} - \frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_i} \right), \quad \underline{p}(0) \in P^0 \quad (3.83)$$

Si dimostri che la soluzione $\underline{p}(t) \in P^0$ per ogni t e che

$$dS(\underline{p}(t))/dt > 0 \quad (3.84)$$

per ogni $\underline{p}(t) \neq \underline{p}^*$, dove $p_i^* = n^{-1}$.

Soluzione. (Suggerimenti).

Calcolando le derivate, si scriva esplicitamente $\frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_j} - \frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_i}$.

Sia

$$p^+(t) = \max\{p_i(t), i = 1, \dots, n\}, \quad p^-(t) = \min\{p_i(t), i = 1, \dots, n\}$$

si dimostri che

$$\frac{dp^+(t)}{dt} \leq 0, \quad \frac{dp^-(t)}{dt} \geq 0$$

e se ne deduca che $p_i(t) \in (0, 1)$ per ogni $i = 1, \dots, n$ e $t \geq 0$.

Calcolando la derivata di $\sum_{i=1}^n p_i(t)$ si dimostri che

$$\sum_{i=1}^n p_i(t) = \sum_{i=1}^n p_i(0) = 1$$

Se ne concluda che quanto sopra implica che per ogni t , $\underline{p}(t) \in P^0$.

Per dimostrare (3.84) si calcoli $\frac{dS(\underline{p}(t))}{dt}$ e per ogni coppia i e j si scriva

$$\frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_i} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_i} + \frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_j} \right\} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_i} - \frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_j} \right\} \quad (3.85)$$

Esercizio 3.5.4 *Nel contesto dell'esercizio 3.5.3 si consideri l'equazione di evoluzione*

$$\frac{dp_i}{dt} = - \sum_{j=1}^n \left(F \left(\frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_j} \right) - F \left(\frac{\partial S(\underline{p})}{\partial p_i} \right) \right), \quad \underline{p}(0) \in P^0 \quad (3.86)$$

con $F(x)$, $x \in \mathbb{R}$, una funzione strettamente crescente. Si dimostri che la soluzione $\underline{p}(t) \in P^0$ per ogni t e che $dS(\underline{p}(t))/dt > 0$ se $\underline{p}(t) \neq \underline{p}^*$, dove $p_i^* = n^{-1}$.

Esercizio 3.5.5 *Risolvere le equazioni del moto (3.86) dell'esercizio 3.5.4 nel caso in cui $F(x) = e^{x+1}$.*

3.6 Transizione di fase

È ben noto che una medesima sostanza può apparire in forme molto diverse, l'acqua composta da molecole H_2O può apparire solida, ghiaccio, ma anche un liquido o un gas. La "fase" in cui appare è determinata dai valori che hanno i parametri di controllo, per esempio, per l'acqua, la temperatura T e la pressione P . Vi saranno quindi regioni di valori di P e T per cui l'acqua è un solido, ghiaccio, altri in cui è un liquido e altri infine in cui è vapore. Variando i valori di P e T possiamo passare da una regione all'altra osservando la liquefazione del ghiaccio o la vaporizzazione dell'acqua, per esempio, tutte operazioni che vediamo spesso nella vita di tutti i giorni. Uno degli argomenti più interessanti e affascinanti della termodinamica e della meccanica statistica è quello di spiegare questi fenomeni, in particolare determinare le curve di transizione da una fase all'altra in cui entrambe possono esistere.

L'equazione di van der Waals

Sperimentalmente si osserva che quasi tutte le sostanze rispettano un diagramma di fase (cioè il grafico di un'equazione di stato nei piani (V, P) o (T, P)) descritte nel paragrafo 2.1, Capitolo 2 del libro di Huang [H] e nel paragrafo 15, Capitolo 4 del libro di Fermi [F].

L'equazione di stato dei gas perfetti descrive bene le isoterme per alte temperature e basse pressioni, cioè nella regione gassosa. Tuttavia quando la temperatura e la pressione sono tali che il gas è vicino al punto di condensazione, si osservano isoterme molto differenti dalle iperboli predette dall'equazione $pV = NkT$. L'equazione di van der Waals è quella più accettata tra quelle introdotte per descrivere il comportamento dei sistemi reali lontani dalla fase gassosa: essa ha la forma

$$\left(P + \frac{N^2 a}{V^2}\right)(V - Nb) = NkT \quad (3.87)$$

con a e b costanti che dipendono dalla sostanza in esame. Vedasi Paragrafo 2.3 Capitolo 2 del libro di Huang [H].

Le isoterme dell'equazione di stato di van der Waals hanno un comportamento "non fisicamente accettabile" per $T < T_c$, dove T_c è la temperatura dell'isoterma critica. Per $T < T_c$ le isoterme di (3.87) nel piano (V, P) hanno un minimo ed un massimo e quindi un intervallo (V_1, V_2) dove la pressione è una funzione crescente. Questo contraddice i principi della termodinamica. Infatti, come abbiamo visto, l'energia libera termodinamica $F^{\text{td}}(T, V, N)$ è una funzione convessa di V e quindi la sua derivata seconda è positiva. Inoltre (vedi equazione (7.32) del libro [P])

$$\left(\frac{\partial F^{\text{td}}(T, V, N)}{\partial V}\right)_{T, N} = -P \quad (3.88)$$

Da cui segue che P deve essere una funzione monotona non crescente di V e quindi l'isoterma di van der Waals non è corretta nell'intervallo (V_1, V_2) . Per avere una teoria termodinamicamente accettabile Maxwell ha proposto la modificazione delle isoterme di van der Waals che va sotto il nome di *regola delle aree uguali di Maxwell*. Essa consiste nel tagliare il grafico di $P = P(V)$ con un segmento orizzontale che interseca il grafico dell'isoterma di van der Waals in tre punti V_-, V_0 e V_+ con $V_- < V_1 < V_0 < V_2 < V_+$ e di definire $P^*(V)$

$$P^*(V) = \begin{cases} P(V), & \text{se } V < V_-, V > V_+ \\ P(V_-), & \text{se } V \in [V_-, V_+] \end{cases}$$

Con questa costruzione la funzione $P^*(V)$ è monotona non crescente come

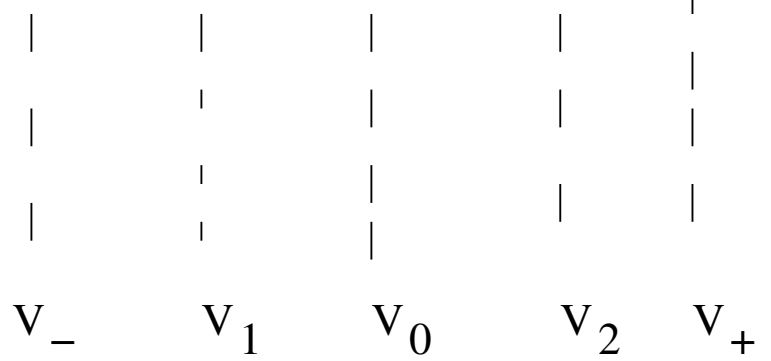


Figura 3.1: Grafico di $P(V)$

deve essere. Ma abbiamo bisogno che questa prescrizione lasci anche invariato il valore dell'energia libera (che indico con $F(V)$) al di fuori dell'intervallo $[V_-, V_+]$ in questione. Questa seconda richiesta porta alla regola di Maxwell che consiste nella prescrizione per il posto dove si taglia il grafico: esso deve essere tale che le aree al di sopra ed al di sotto del grafico dell'isoterma di van der Waals siano uguali. Infatti, se V_- e V_+ sono tali da soddisfare questa richiesta sulle aree allora

$$P^*(V_-)[V_+ - V_-] = \int_{V_-}^{V_+} P(V)dV$$

Quindi, definendo

$$F^*(V) = F(0) - \int_0^V P^*(V)dV$$

Si ha che $F^*(V) = F(V)$ per $V \leq V_-$ perchè in questa regione $P^*(V) = P(V)$. Inoltre

$$\begin{aligned} F^*(V_+) &= F(V_-) - \int_{V_-}^{V_+} P^*(V)dV = F(V_-) - P^*(V_-)[V_+ - V_-] \\ &= F(V_-) - \int_{V_-}^{V_+} P(V)dV = F(V_+) \end{aligned}$$

e questa relazione implica che $F^*(V) = F(V)$ per $V \geq V_+$ perchè in questa regione $P^*(V) = P(V)$.

Osserviamo che la funzione F^* così definita è l'involuppo convesso della funzione $F(V)$, cioè la funzione convessa massimale il cui grafico giace al di sotto di quello di $F(V)$. Infatti F^* è continua e convessa e l'unica regione in cui differisce da $F(V)$ è l'intervallo aperto (V_-, V_+) dove è una retta. Questo intervallo è dunque l'unico posto dove si potrebbe far crescere la funzione mantenendola sotto il grafico di $F(V)$, ma questo non è possibile se si vuole mantenere la convessità.

Figura 3.2: Grafico di $F_\beta(m)$, $\beta > 1$; $F_\beta(\pm 1) = -1/2$ e $F_\beta(0) = -\log 2/\beta$. La linea tratteggiata e' il grafico dell'inviluppo convesso.

3.7 Termodinamica del campo medio

Torniamo al modello introdotto nel Paragrafo 3.3 e facciamo vedere che l'ensemble canonico produce delle incongruenze che possono essere risolte considerando il gran canonico dove si può verificare la teoria di van der Waals e di Maxwell descritta nel paragrafo precedente.

Ricordando la funzione,

$$F_\beta(m) = -\frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} I(m), \quad I(m) = -\frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} - \frac{1+m}{2} \log \frac{1+m}{2} \quad (3.89)$$

nel Teorema 3.3.3 abbiamo dimostrato che la pressione ottenuta nel limite termodinamico a partire dall'ensemble gran-canonico è data da

$$P_\beta(h) = \max_{m \in [-1,1]} \{hm - F_\beta(m)\} \quad (3.90)$$

Invece nel Teorema 3.3.2 abbiamo dimostrato che l'energia libera ottenuta nel limite a partire dall'ensemble canonico è data da

$$\lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} F_{\Lambda, \beta}^{\text{can}}(m) = F_\beta(m) \quad (3.91)$$

Come abbiamo più volte osservato l'energia libera termodinamica $F_\beta^{\text{td}}(m)$ è, per ogni β , una funzione convessa di m e quindi il teorema che segue ci dice che non è sempre corretto identificare F^{td} con la funzione $F_\beta(m)$ ottenuta nel limite in (3.91).

Lemma 3.7.1 *$F_\beta(m)$ è una funzione simmetrica di m , convessa per $\beta \leq 1$ e della forma di una doppia buca (come mostrato in figura 3.2) per $\beta > 1$ con minimi a $\pm m_\beta$ dove m_β è l'unica soluzione positiva dell'equazione seguente detta "equazione di campo medio"*

$$m_\beta = \tanh\{\beta m_\beta\} \quad (3.92)$$

Dimostrazione. Evidentemente $F_\beta(m) = F_\beta(-m)$.

La funzione $F_\beta(m)$ è la somma di una funzione concava (energia $= -m^2/2$) e di una funzione convessa (-l'entropia $= -I(m)$) moltiplicata per il fattore $1/\beta$. Quindi se β è piccolo "vince" l'entropia, altrimenti "vince" l'energia.

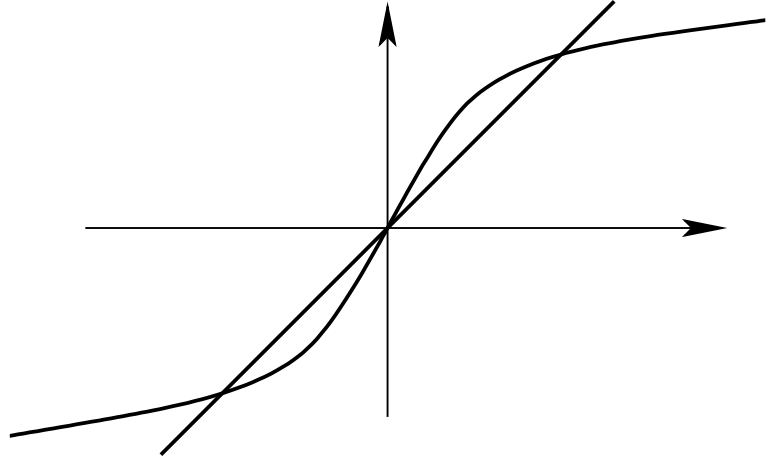


Figura 3.3: Grafico di $\tanh \beta m$, $\beta > 1$: le intersezioni con la diagonale sono nei punti $m = \pm m_\beta$.

Calcoliamo le derivate prima e seconda ottenendo

$$F'_\beta(m) = -m + \frac{1}{\beta} \left[\log\left(\frac{1+m}{2}\right) - \log\left(\frac{1-m}{2}\right) \right] = -m + \frac{1}{\beta} \log \frac{1+m}{1-m}$$

e

$$F''_\beta(m) = \frac{1}{\beta(1-m^2)} - 1$$

Quindi $F''_\beta(m) > 0$ per $\beta < 1$; $F''_1(m) \geq 0$ e l'uguaglianza vale solo a $m = 0$.

Per $\beta > 1$, nell'intervallo $|m| < \sqrt{1 - 1/\beta}$ si ha che $F''_\beta(m) < 0$.

Nella figura 3.3 si dimostra l'esistenza per $\beta > 1$ di 2 soluzioni opposte dell'equazione di campo medio (3.92). Il fatto che siano dei minimi si verifica facilmente usando che $\beta(1 - m_\beta^2) = \beta(1 - \tanh^2(\beta m_\beta))$.

□

Osserviamo che la teoria di campo medio spiega l'origine delle transizioni di fase come dovute alla competizione tra l'energia e l'entropia, in accordo con le leggi della termodinamica. In particolare nel campo medio si trova una temperatura critica T_c ($T_c = 1$) che separa la regione dove vince l'entropia in cui F_β è strettamente convessa da quella dove vince l'energia e si perde la convessità.

Ritornando alla termodinamica del campo medio, dal Lemma 3.7.1 segue che l'ensemble canonico non ci fornisce la corretta energia libera essendo $F_\beta(m)$ non convessa. Invece l'ensemble gran-canonic ci permette di definire F^{td} . Da (3.90) segue che la pressione $P_\beta(h)$ è la trasformata di Legendre di $F_\beta(m)$. Dalla teoria delle trasformate di Legendre sappiamo che la trasformata di Legendre di una funzione convessa è una funzione convessa. Inoltre

la trasformata di Legendre della trasformata di Legendre è la funzione stessa se questa è convessa, altrimenti è il suo involucro convesso (vedasi Esercizio 1 del file [E4]).

Ricordiamo che abbiamo dimostrato che, per ogni β , $P_\beta(h)$ è una funzione convessa di h e quindi la sua trasformata di Legendre

$$F_\beta^*(m) = \sup_h [hm - P_{\beta,h}] \quad (3.93)$$

è una funzione convessa di m . Poiché vale la (3.90), dalle proprietà delle trasformate di Legendre sappiamo che $F_\beta^*(m) = F_\beta(m)$ se $F_\beta(m)$ è convessa, (quindi se $\beta \leq 1$) altrimenti $F_\beta^*(m)$ = involucro convesso di $F_\beta(m)$. Quindi $F_\beta^{\text{td}}(m) = F_\beta^*(m)$ e vale la regola delle aree uguali di Maxwell.

Si può dimostrare che l'energia libera ottenuta dall'ensemble canonico di un modello con un'energia della forma standard data in (3.2) è convessa. La patologia in questo modello nasce dall'ipotesi di campo medio in cui l'energia di interazione cambia con il volume: le leggi termodinamiche descrivono un regime dove il rapporto tra la portata dell'interazione microscopica e il volume della regione in cui il sistema è confinato va a 0 nel limite di volumi grandi. Questo è il limite termodinamico in cui ci si aspetta che le leggi termodinamiche valgano, il campo medio invece descrive un regime completamente differente. Del resto, la semplicità, cioè la migliore qualità del campo medio, è una conseguenza del fatto che tutti gli spin interagiscono nello stesso modo indipendentemente dalla loro posizione relativa che è esattamente la ragione per le discrepanze con la termodinamica.

Nonostante le incongruenze possiamo dire che col campo medio abbiamo una ragionevole trattazione della transizione di fase con una interpretazione microscopica della teoria di van der Waals. Tuttavia una trattazione più soddisfacente richiede un'analisi dell'effetto che le condizioni al contorno hanno sulla misura di Gibbs nel limite termodinamico. Questo porta alla teoria delle misure DLR (dai nomi di Dobrushin, Lanford e Ruelle) che consiste nel caratterizzare le misure ottenute nel limite termodinamico in termini delle cosiddette equazioni DLR (si veda ad esempio i libri [G], [HG], [P2]). Senza entrare nei dettagli considererò il modello d'Ising con interazione di primo vicino in 1 e 2 dimensioni e farò vedere che nel limite $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ le condizioni al contorno non hanno alcun effetto in 1 dimensione per ogni temperatura, mentre a basse temperature possono produrre stati diversi (transizioni di fase in 2 dimensioni).

3.8 Modello d'Ising con interazione di primi vicini.

Per $L \in \mathbb{N}$, sia $\Lambda_L = (-L, L)^d \cap \mathbb{Z}^d$ per $d = 1, 2$. Indichiamo con $\sigma_{\Lambda_L^c}$ una successione

$$\sigma_{\Lambda_L^c} = \{\sigma_{\Lambda_L^c}(x), x \notin \Lambda_L\}$$

Dati $J > 0$ e $\sigma_{\Lambda_L^c}$, definiamo l'energia di interazione di primo vicino con condizioni al contorno $\sigma_{\Lambda_L^c}$ come la funzione $H_L(\cdot | \sigma_{\Lambda_L^c})$ su $\{-1, 1\}^{|\Lambda_L|}$ definita come segue

$$H_L(\sigma | \sigma_{\Lambda_L^c}) = -\frac{J}{2} \sum_{x, y \in \Lambda_L, |x-y|=1} \sigma(x)\sigma(y) - J \sum_{x \in \Lambda_L, y \in \Lambda_L^c, |x-y|=1} \sigma(x)\sigma_{\Lambda_L^c}(y) \quad (3.94)$$

osserva che H_L dipende solo dai $\sigma_{\Lambda_L^c}(y)$ con y a distanza 1 dalla frontiera di Λ_L .

La misura di Gibbs in Λ_L con condizioni al contorno $\sigma_{\Lambda_L^c}$ e con inverso della temperatura $\beta > 0$, è la probabilità su $\{-1, 1\}^{|\Lambda_L|}$ definita dalla solita formula di Gibbs

$$\mu_L(\sigma | \sigma_{\Lambda_L^c}) = \frac{e^{-\beta H_L(\sigma | \sigma_{\Lambda_L^c})}}{Z_L(\sigma_{\Lambda_L^c})}, \quad Z_L(\sigma_{\Lambda_L^c}) = \sum_{\sigma \in \{-1, 1\}^{|\Lambda_L|}} e^{-\beta H_L(\sigma | \sigma_{\Lambda_L^c})} \quad (3.95)$$

Per semplificare le notazioni considero $J = 1$ in seguito.

Teorema 3.8.1 (*Una dimensione.*) *Sia $d = 1$. Allora $\forall \beta$ e per ogni configurazione $\sigma_{\Lambda_L^c}$ fissata si ha che:*

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \mu_L(\sigma(0) = 1 | \sigma_{\Lambda_L^c}) = \frac{1}{2} \quad (3.96)$$

Dimostrazione

In questo caso $\Lambda_L = [-L + 1, L - 1] \cap \mathbb{Z}$ e $\sigma_{\Lambda_L^c} = (\sigma(-L), \sigma(-L))$.

Dunque:

$$H_L(\sigma | \sigma_{\Lambda_L^c}) = -\sigma(-L)\sigma(-L+1) - \sigma(-L+1)\sigma(-L+2) - \dots - \sigma(L-1)\sigma(L)$$

dove $\sigma = (\sigma(x) : x \in [-L + 1, L - 1] \cap \mathbb{Z})$.

Siano:

$$\begin{aligned} \chi_L &= \{\sigma = (\sigma(x) : x \in [-L, L] \cap \mathbb{Z}) : \sigma(x) \in \{-1, 1\}\} \\ A &= \{\eta = (\eta(x) : x \in [-L, L - 1] \cap \mathbb{Z}) : \eta(x) \in \{-1, 1\}\} \end{aligned}$$

Consideriamo la seguente applicazione:

$$T : \chi_L \longrightarrow A \quad (3.97)$$

tale che $T(\sigma) = (\sigma(x)\sigma(x+1) : x \in [-L, L-1] \cap \mathbb{Z})$. Siano, infine:

$$\begin{aligned}\chi_L^* &= \{\sigma : \sigma(-L) = \sigma(L) = 1\} \\ A^* &= \left\{ \eta : \sum_{x=-L}^{L-1} \mathbf{1}_{\eta(x)=1}(\eta) \text{ é un numero pari} \right\}\end{aligned}$$

Osserviamo che $\mathbf{1}_{\eta(x)} = 1$ é una variabile aleatoria su A .

Mostriamo che $T : \chi_L^* \rightarrow A^*$ é un'applicazione biettiva. Proviamo, per prima cosa, che se $\sigma \in \chi_L^*$ allora $T(\sigma) \in A^*$. Sia, dunque, $\phi \in \chi_L^*$ ($\sigma(-L) = \sigma(L) = 1$). Osserviamo che $\sigma(-L) = \sigma(L) = \prod_{x=-L}^{L-1} \sigma(x)\sigma(x+1)$. Dunque $\prod_{x=-L}^{L-1} \sigma(x)\sigma(x+1) = \prod_{x=-L}^{L-1} T_x(\sigma) = \prod_{x=-L}^{L-1} \eta(x) = 1$. Dunque $\sum_{x=-L}^{L-1} \mathbf{1}_{\eta(x)=1}(\eta)$ é un numero pari.

Proviamo la suriettività: sia $\eta \in A^*$. Vogliamo trovare $\sigma \in \chi_L^*$ tale che $T(\sigma) = \eta$.

Definiamo σ nel modo seguente:

$$\begin{aligned}\sigma(L) &= 1 \\ \sigma(x) &= \sigma(x+1)\eta(x); x \in [-L, L-1] \cap \mathbb{Z}\end{aligned}$$

É immediato verificare che tale σ é quello cercato. L'iniettività dell'applicazione si verifica facilmente.

Siano:

$$\begin{aligned}\chi_L^{<0} &= \{\sigma : \sigma(-L) = \sigma(0) = 1\} \\ \chi_L^{\geq 0} &= \{\sigma : \sigma(0) = \sigma(L) = 1\} \\ A^{<0} &= \left\{ \eta : \sum_{x=-L}^{-1} \text{ é un numero pari} \right\} \\ A^{\geq 0} &= \left\{ \eta : \sum_{x=0}^{L-1} \text{ é un numero pari} \right\}\end{aligned}$$

Si prova, analogamente a sopra, che $T : \chi_L^{<0} \rightarrow A^{<0}$ e $\chi_L^{\geq 0} \rightarrow A^{\geq 0}$ sono applicazioni biettive.

A questo punto possiamo provare il teorema. Consideriamo in A la seguente misura prodotto:

$$\nu(\eta) = \prod_{x=-L}^{L-1} \frac{e^{\beta\eta(x)}}{e^{\beta} + e^{-\beta}} \quad (3.98)$$

Calcoliamo:

$$\nu(A^*) = \sum_{\eta \in A^*} \prod_{x=-L}^{L-1} \frac{e^{\beta\eta(x)}}{e^{\beta} + e^{-\beta}} = \frac{1}{(e^{\beta} + e^{-\beta})^{2L}} \sum_{\eta \in A^*} \prod_{x=-L}^{L-1} e^{\beta\eta(x)} =$$

$$\frac{1}{(e^\beta + e^{-\beta})^{2L}} \sum_{\sigma \in A^*} e^{-\beta H_L(\sigma/+)}$$

dove $H_L(\sigma/+) = -\sigma(-L)\sigma(-L+1) - \dots - \sigma(L-1)\sigma(L)$. Abbiamo sfruttato la corrispondenza biunivoca tra χ_L^* e A^* tramite T. Dunque:

$$\nu(\eta/A^*) = \mathbf{1}_{\eta \in A^*}(\eta) \frac{\nu(\eta)}{\nu(A^*)} = \frac{e^{-\beta H_L(\sigma/+)}}{\sum_{\sigma \in A^*} e^{-\beta H_L(\sigma/+)}} \mathbf{1}_{\sigma \in \chi_L^*}$$

Indichiamo con:

$$\mu_L(\sigma/\chi_L^*) = \frac{e^{-\beta H_L(\sigma/+)}}{\sum_{\sigma \in A^*} e^{-\beta H_L(\sigma/+)}} \quad (3.99)$$

la probabilità su χ_L^* . Osserviamo che fissata la condizione $\sigma_{\Lambda_L^c} = (\sigma(-L) = 1, \sigma(L) = 1)$ si ha:

$$\begin{aligned} & \mu_L(\sigma(0) = 1/\sigma_{\Lambda_L^c}) = \mu_L(\sigma(0) = 1/\chi_L^*) = \mu_L(\chi_L^{<0} \cap \chi_L^{\geq 0}/\chi_L^*) = \\ = & \sum_{\sigma \in \chi_L^{<0} \cap \chi_L^{\geq 0}} \mu_L(\sigma/\chi_L^*) = \sum_{\eta \in A^{<0} \cap A^{\geq 0}} \nu(\eta/A^*) = \nu(A^{<0} \cap A^{\geq 0}/A^*) = \\ & = \frac{\nu(A^{<0})\nu(A^{\geq 0})}{\nu(A^*)} \end{aligned}$$

poiché le variabili aleatorie $\{\mathbf{1}_{\eta(x)=1}\}_{x=-L}^{L-1}$ sono indipendenti e identicamente distribuite.

Osservando che tali variabili sono bernoulliane, per il lemma 3.8.2, si ha:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\nu(A^{<0})\nu(A^{\geq 0})}{\nu(A^*)} = \frac{1}{2}. \quad (3.100)$$

Lemma 3.8.2 *Siano $\{X_i\}$ variabili aleatorie i.i.d. di Bernoulli: $P(X_i = 0) = p$ con $p \leq \frac{1}{2}$.*

Sia:

$$S_n = \sum_{i=1}^n X_i$$

Allora

$$P(S_n = \text{numero pari}) - \frac{1}{2} = [1 - 2p]^n \quad (3.101)$$

quindi

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(S_n = \text{numero pari}) = \frac{1}{2} \quad (3.102)$$

Dimostrazione. Se $p = 1/2$ allora $P(S_n = \text{numero pari}) = \frac{1}{2}$, infatti

$$\begin{aligned}
& P(S_n = \text{numero pari}) \\
&= \sum_k \left[P(S_n = \text{numero pari}, S_{n-1} = 2k) + P(S_n = \text{numero pari}, S_{n-1} = 2k + 1) \right] \\
&= \sum_k \left[P(X_n = 0)P(S_{n-1} = 2k) + P(X_n = 1)P(S_{n-1} = 2k + 1) \right] \\
&= \frac{1}{2} \sum_k \left[P(S_{n-1} = 2k) + P(S_{n-1} = 2k + 1) \right] = \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

Se $p < 1/2$ dalle prime due uguaglianze in (3.103) otteniamo

$$\begin{aligned}
& P(S_n = \text{numero pari}) \\
&= (1-p) \sum_k P(S_{n-1} = 2k) + p \sum_k P(S_{n-1} = 2k + 1) \\
&= (1-p)P(S_{n-1} = \text{numero pari}) + p[1 - P(S_{n-1} = \text{numero pari})] \\
&= p + (1-2p)P(S_{n-1} = \text{numero pari}) \\
&= \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2p) + (1-2p)P(S_{n-1} = \text{numero pari})
\end{aligned}$$

Chiamando

$$a_n = P(S_n = \text{numero pari}) - \frac{1}{2}$$

da (3.103) segue che

$$a_n = (1-2p)a_{n-1}$$

che implica (3.101). \square

Consideriamo ora il caso bidimensionale, e supponiamo che $L = 2n$, quindi $\Lambda_L \equiv \Delta_n$ è il quadrato in \mathbb{Z}^2 di lato $2n+1$ con centro nell'origine. Fissiamo le condizioni + al bordo, cioè $\sigma_{\Delta_n^c}(x) = 1$ for all $x \notin \Delta_n$. Ricordando la (3.95) indichiamo con $\mu_n^+(\sigma) = \mu_{\Delta_n}(\sigma | \sigma_{\Delta_n^c})$ la misura di Gibbs in Δ_n con questa condizione al bordo.

Teorema 3.8.3 *Per ogni β sufficientemente grande e per ogni n*

$$\mu_{\beta, \Delta_n}^+(\sigma_{\Delta_n}(0) = 1) > \frac{1}{2} \quad (3.103)$$

Dimostrazione.

Usiamo l'argomento di Peierls che consiste nel descrivere la configurazione di spin σ in Δ_n per mezzo di linee che separano i + dai -.

- **Contorni.**

Se (x, y) è una coppia di siti a distanza 1 tali che $\sigma(x) \neq \sigma(y)$ tracciamo un segmento perpendicolare alla congiungente x ed y con centro nel mezzo. La collezione di tutti questi segmenti forma una linea chiusa che chiamiamo contorno. Poichè tutti gli spin al di fuori di Δ_n sono +, i contorni non possono entrare in Δ_n^c . I contorni si possono intersecare: usiamo quindi la convenzione che, muovendoci in senso orario giriamo a sinistra ad un punto di intersezione.

Indichiamo con γ un contorno.

Frontiere dei contorni. Dato un contorno γ indichiamo con C_1 l'insieme dei siti all'interno di γ che hanno almeno un sito primo vicino all'esterno di γ . Indichiamo con C_2 i siti all'esterno di γ che hanno almeno un sito primo vicino all'interno di γ . Per costruzione tutti gli spin in C_2 hanno lo stesso segno ed anche tutti gli spin in C_1 hanno lo stesso segno ma opposto a quello degli spin in C_2 .

Indichiamo con γ^- un contorno tale che gli spin in C_1 sono tutti -1 e

$$\mu_n^+(\{\gamma^-\}) = \mu_n^+(\sigma_{\Delta_n} : \sigma_{\Delta_n} \text{ ha il contorno } \gamma^-) \quad (3.104)$$

- **Stima d'energia.**

Dato un contorno γ indichiamo con Δ' i siti dentro γ distinti da quelli in C_1 , e con Δ'' i siti fuori γ e distinti da quelli in C_2 . Con $H(\sigma_\Lambda|\pm)$ indichiamo l'energia di σ_Λ quando gli spin fuori di Λ sono tutti +, oppure, rispettivamente, tutti -. Infine con $|\gamma|$ indichiamo il numero di siti in γ . Osserviamo che

$$H(\sigma_{C_1}|\sigma_{C_2}) = J|\gamma|$$

Infatti per ogni coppia di punti (x, y) con $x \in C_1$ ed $y \in C_2$ c'è un segmento di lunghezza 1 del contorno γ .

Si ha

$$\begin{aligned} \mu_n^+(\{\gamma^-\}) &= \frac{1}{Z_n^+} \sum_{\sigma_{\Delta'}} \sum_{\sigma_{\Delta''}} e^{-\beta H(\sigma_{\Delta'}|-)} e^{-\beta H(\sigma_{\Delta''}|+)} e^{-\beta[H(\sigma_{C_1})+H(\sigma_{C_2})]} e^{-\beta J|\gamma|} \\ &= \frac{e^{-\beta J|\gamma|}}{Z_n^+} \sum_{\sigma_{\Delta'}} \sum_{\sigma_{\Delta''}} e^{-\beta H(\sigma_{\Delta'}|+)} e^{-\beta H(\sigma_{\Delta''}|+)} e^{-\beta[H(-\sigma_{C_1})+H(\sigma_{C_2})]} \end{aligned}$$

Abbiamo usato che $H(-\sigma_{C_1}) = H(\sigma_{C_1})$ e che la funzione di partizione con una o l'altra condizione al bordo sono uguali e quindi si può rimpiazzare $H(\sigma_{\Delta'}|-)$ con $H(\sigma_{\Delta'}|+)$.

Indichiamo con

$$A_+ = \{\sigma_{\Delta_n} : \sigma_{\Delta_n}(x) = 1, \forall x \in C_1 \cup C_2\}$$

Aggiungendo e sottraendo l'energia di interazione tra C_1 e C_2 con spins uguali a $+1$ in entrambi i lati otteniamo

$$\mu_n^+(\{\gamma^-\}) \leq \frac{e^{-2\beta J|\gamma|}}{Z_n^+} \sum_{\sigma_{\Delta_n} \in A_+} e^{-\beta H(\sigma_{\Delta_n}|+)}$$

La somma a destra è minore di Z_n^+ quindi

$$\mu_n^+(\{\gamma^-\}) \leq e^{-2\beta J|\gamma|} \quad (3.105)$$

• **Stima d'entropia.**

Il numero di cammini connessi in \mathbb{Z}^2 che partono da un punto dato e che hanno lunghezza ℓ è minore di 3^ℓ , (3 è il numero di direzioni dove il cammino può andare ad ogni passo). Se un contorno di lunghezza ℓ ha 0 al suo interno, allora deve essere contenuto nel quadrato di lato $2\ell + 1$ e centro 0 . Quindi il numero totale di contorni di lunghezza ℓ che hanno l'origine all'interno è minore od uguale a $(2\ell + 1)^2 3^\ell$.

In definitiva la stima d'energia e quella di entropia danno:

$$\mu_n^+(\{\sigma(0) = -1\}) \leq \sum_{\gamma^- \ni 0} \mu_n^+(\{\gamma^-\}) \leq c \sum_{\ell \geq 4} \ell^2 3^\ell e^{-2\beta J\ell} \quad (3.106)$$

La stima è indipendente dalla regione Δ_n e si annulla nel limite $\beta \rightarrow \infty$, quindi (3.103) è dimostrata. \square

Si calcoli la pressione

$$P_{\beta,J} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\log Z_L}{\beta |\Lambda_L|} \quad (3.107)$$

Sia T la seguente matrice

$$\begin{pmatrix} T_{1,1} = e^{\beta J} & T_{-1,1} = e^{-\beta J} \\ T_{1,-1} = e^{-\beta J} & T_{-1,-1} = e^{\beta J} \end{pmatrix}$$

T ammette un autovalore $\lambda > 0$, $\lambda = 2 \cosh \beta J$ con autovettore destro $R = (R_1, R_{-1})$ ad elementi strettamente positivi. Dal calcolo esplicito segue che $R_1 = R_{-1}$. La matrice P definita da

$$P(i,j) = \frac{1}{\lambda R_i} T_{i,j} R_j, \quad i, j \in \{-1, 1\} \quad (3.108)$$

è una matrice stocastica, cioè

$$\sum_j P(i, j) = 1, \quad 0 < P(i, j) < 1 \quad (3.109)$$

Si ha che

$$\begin{aligned} e^{-\beta H_L(\sigma)} &= \prod_{x=-L+1}^L T_{\sigma(x-1), \sigma(x)} = \lambda^{2L+1} \frac{R_{\sigma(-L)}}{R_{\sigma(L)}} \prod_{x=-L+1}^L P(\sigma(x-1), \sigma(x)) \\ &= \lambda^{2L+1} \prod_{x=-L+1}^L P(\sigma(x-1), \sigma(x)) \end{aligned}$$

nell'ultima uguaglianza si è usato che $R_{\sigma(-L)} = R_{\sigma(L)}$.

Quindi, usando (3.109), otteniamo che la funzione di partizione è data da

$$Z_L = \sum_{\sigma} e^{-\beta H_L(\sigma)} = \lambda^{2L+1} \sum_{\sigma(-L)} \sum_{\sigma(L)} P^{2L}(\sigma(-L), \sigma(L)) = 2\lambda^{2L+1} \quad (3.110)$$

Quindi

$$\frac{\log Z_L}{\beta|\Lambda_L|} = \beta^{-1} \log \lambda + \frac{2}{\beta|\Lambda_L|}$$

Da cui segue che

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\log Z_L}{\beta|\Lambda_L|} = \frac{\log \lambda}{\beta}$$

Capitolo 4

Ipotesi Ergodica

4.1 Il Teorema di Birkhoff

Sia X uno spazio topologico e $T : X \rightarrow X$ un'applicazione invertibile. Una probabilità μ , definita su una σ -algebra Σ di sottoinsiemi di X si dice T -invariante se per ogni insieme $A \in \Sigma$, $\mu(A) = \mu(T^{-1}A)$. Equivalentemente, per ogni funzione misurabile f

$$\mathbb{E}_\mu(f \circ T) = \mathbb{E}_\mu(f) \quad (4.1)$$

Con T^i indichiamo la composizione di T con se stesso i -volte.

La terna (X, T, μ) viene detta sistema dinamico astratto discreto.

La versione "continua" della precedente definizione è la seguente. Per ogni numero $t \in \mathbb{R}$, $S_t : X \rightarrow X$ è una trasformazione invertibile tale che

$$S_t^{-1} = S_{-t}, \quad S_0 = \text{identità}, \quad S_{t+s} = S_t \circ S_s$$

Una probabilità μ , definita su una σ -algebra Σ di sottoinsiemi di X si dice S_t -invariante se per ogni insieme $A \in \Sigma$, $\mu(A) = \mu(S_{-t}A)$, per ogni $t \in \mathbb{R}$.

La terna $(X, \{S_t, t \in \mathbb{R}\}, \mu)$ viene detta sistema dinamico astratto continuo.

Prima di enunciare il teorema di Birkhoff dimostriamo un teorema che si usa nella sua dimostrazione.

Teorema 4.1.1 (*Teorema ergodico massimale*)

Sia (X, T, μ) un sistema dinamico astratto e sia f una funzione misurabile e limitata. Definiamo

$$E_f := \{x \in X : \exists n \geq 0 \text{ tale che } \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(T^i x) \geq \epsilon > 0\} \quad (4.2)$$

allora (χ_A) e' la funzione caratteristica dell'insieme A ,

$$\mathbb{E}(\chi_{E_f} f) > 0 \quad (4.3)$$

A prima vista la tesi del teorema può apparire per lo meno problematica. Infatti un punto x può appartenere ad E_f anche se $f(x) < 0$. Tale contributo dovrà essere compensato da altri punti di E_f in modo tale che l'integrale diventi non negativo. Si noti a tale scopo che se x è come sopra allora anche Tx apparterrà ad E_f come si deduce dalla definizione di E_f . Così sarà anche per $T^i x$, $i \leq n$ dove n è il primo intero per cui $\sum_{i=1}^n f(T^i x) > 0$. Si noti che in qualche senso i punti $T^i x$ hanno lo stesso peso nell'integrale (4.3) essendo la misura μ T -invariante e questo fa capire perchè il contributo di x può essere compensato nell'integrale in (4.3). La dimostrazione che daremo ha un carattere più astratto e non usa le argomentazioni sopra fatte.

Dimostrazione del Teorema 4.1.1

Sia h_n , $n \geq 0$ la seguente successione:

$$h_n := \max[0, f(x), f(x) + f(Tx), \dots, f(x) + f(Tx) + \dots + f(T^n x)] \quad (4.4)$$

Sia inoltre

$$E_n := \{x \in X : h_n(x) > 0\}$$

Si noti che $E_n \rightarrow E_f$ quando $n \rightarrow \infty$.

Poichè

$$h_n(Tx) = \max[0, f(Tx), f(Tx) + f(T^2x), \dots, f(Tx) + f(T^2x) + \dots + f(T^{n+1}x)]$$

si ha

$$f + h_n \circ T = \max[f, \dots, f + f \circ T + \dots + f \circ T^{n+1}]$$

Da cui segue che

$$(f + h_n \circ T)\chi_{E_{n+1}} = h_{n+1}\chi_{E_{n+1}}$$

Quindi, poiché $h_{n+1} = 0$ in $X \setminus E_{n+1}$ e per l'invarianza di μ ,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\chi_{E_{n+1}} f) &= \mathbb{E}(\chi_{E_{n+1}} h_{n+1}) - \mathbb{E}(\chi_{E_{n+1}} (h_n \circ T)) \\ &\geq \mathbb{E}(h_{n+1}) - \mathbb{E}(h_n \circ T) \\ &= \mathbb{E}(h_{n+1} - h_n) \geq 0 \end{aligned}$$

Da Teorema della convergenza dominata di Lebesgue segue

$$\int_{E_f} d\mu(x) f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{E_n} d\mu(x) f(x) \geq 0$$

□

Teorema 4.1.2 (*Teorema di Birkhoff discreto*)

Sia (X, T, μ) un sistema dinamico astratto e sia f una funzione misurabile e limitata. Allora per μ quasi tutti gli $x \in X$ il seguente limite esiste

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (A_N f)(x) = f^*(x), \quad (A_N f)(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(T^i x) \quad (4.5)$$

$A_N f$ viene detta *media temporale* di f .

Inoltre f^* è una funzione misurabile e limitata e

$$\mathbb{E}_\mu(f^*) = \mathbb{E}_\mu(f) \quad (4.6)$$

Dimostrazione

Si deve dimostrare che l'insieme degli x tali che il limite non esiste ha misura 0. Quindi dati due reali $a < b$ definiamo

$$D_{a,b} = \{x \in X : \liminf_{N \rightarrow \infty} A_N f(x) \leq a < b \leq \limsup_{N \rightarrow \infty} A_N f(x)\} \quad (4.7)$$

E' sufficiente dimostrare che

$$\mu(D_{a,b}) = 0, \quad \forall a < b$$

Assumiamo per assurdo che $\mu(D_{a,b}) > 0$ e poiché $D_{a,b}$ è T -invariante si può applicare il Teorema Ergodico Massimale al sistema dinamico $(D_{a,b}, T, \mu)$ e alle due funzioni $f_1(x) = f(x) - b$, $f_2(x) = a - f(x)$ ristrette a $D_{a,b}$.

Poiché $E_{f_i} = D_{a,b}$, $i = 1, 2$ si ha

$$\mathbb{E}_\mu(\chi_{D_{a,b}}(f - b)) \geq 0 \quad \mathbb{E}_\mu(\chi_{D_{a,b}}(a - f)) \geq 0$$

Sommando membro a membro le precedenti disuguaglianze, si ottiene

$$(a - b)\mu(D_{a,b}) \geq 0$$

che implica la tesi poiché $a - b < 0$.

La dimostrazione di (4.6) segue dal Teorema della convergenza dominata di Lebesgue e dall'invarianza di μ . Infatti

$$\mathbb{E}_\mu(f^*) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \mathbb{E}_\mu(f \circ T^i) = \mathbb{E}_\mu(f)$$

□

Teorema 4.1.3 (Teorema di Birkoff "continuo")

Sia $(X, \{S_t, t \in \mathbb{R}\}, \mu)$ un sistema dinamico astratto continuo e sia f una funzione misurabile e limitata. Allora per μ quasi tutti gli $x \in X$ il seguente limite esiste

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} (A_\tau f)(x) = f^*(x), \quad (A_\tau f)(x) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f(S_t(x)) dt, \quad \tau > 0 \quad (4.8)$$

$A_\tau f$ viene detta media temporale di f .

Inoltre f^* è una funzione misurabile e limitata e

$$\mathbb{E}_\mu(f^*) = \mathbb{E}_\mu(f) \quad (4.9)$$

Dimostrazione. Ci si riconduce al caso discreto nel modo seguente. Poniamo $T = S_1$ e, data f , funzione misurabile e limitata, definiamo

$$g(x) := \int_0^1 f(S_t(x)) dt$$

che risulta essere misurabile e limitata. Dato $\tau > 0$ indichiamo con N_τ la parte intera di τ ed osserviamo che

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N_\tau} g(T^n x) &= \sum_{n=0}^{N_\tau} \int_0^1 f(S_t(T^n x)) dt = \sum_{n=0}^{N_\tau} \int_0^1 f(S_{t+n}(x)) dt \\ &= \sum_{n=0}^{N_\tau} \int_n^{n+1} f(S_s(x)) ds \end{aligned}$$

Dal Teorema 4.1.2 segue che esiste (μ -q.o.)

$$f^*(x) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{N_\tau} \sum_{n=0}^{N_\tau} g(T^n x)$$

Quindi, μ -q.o.

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f(S_t(x)) dt = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left\{ \frac{N_\tau}{\tau} \frac{1}{N_\tau} \sum_{n=0}^{N_\tau} g(T^n x) + \frac{1}{\tau} \int_{N_\tau}^\tau f(S_t(x)) dt \right\} = f^*(x)$$

Da (4.6) e dal fatto che μ è S_t -invariante, segue che

$$\mathbb{E}_\mu(f^*) = \mathbb{E}_\mu(g) = \int_0^1 \mathbb{E}_\mu(f(S_t(x))) dt = \mathbb{E}_\mu(f)$$

4.2 Sistemi Ergodici

Il sistema dinamico astratto $(X, \{S_t, t \in \mathbb{R}\}, \mu)$ si dice ergodico se ogni insieme $E \in \Sigma$ tale che $E = S_t E$, ha probabilità 0 oppure 1. Cioè,

$$E = S_t E \quad \text{implica} \quad \mu(E) = \mu(E)^2 \quad (4.10)$$

Nel seguente teorema diamo delle definizioni equivalenti di ergodicità.

Teorema 4.2.1 *Sia $(X, \{S_t, t \in \mathbb{R}\}, \mu)$ un sistema dinamico astratto, le seguenti condizioni sono equivalenti.*

1. Il sistema è ergodico, cioè vale (4.10)
2. Sia f una funzione misurabile S_t -invariante (μ quasi ovunque), cioè tale che $f(x) = f(S_t(x))$ per μ quasi tutti gli $x \in X$, allora f è quasi ovunque costante
3. Per ogni funzione f misurabile e limitata,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f(S_t(x)) dt = \mathbb{E}_\mu(f) \quad (4.11)$$

4. Per ogni coppia di insiemi misurabili E ed F si ha

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \mu(E \cap S_t F) dt = \mu(E)\mu(F)$$

Dimostrazione

(1) \Rightarrow (2). Gli insiemi $\{x : f(x) \leq a\}$, $a \in \mathbb{R}$, sono μ -quasi ovunque S_t -invarianti e quindi hanno probabilità 0 oppure 1. Quindi f è μ -quasi ovunque costante.

(2) \Rightarrow (3). Data f misurabile, dal teorema di Birkhoff segue che esiste il limite della media temporale che definisce una funzione $f^*(x)$ misurabile e S_t -invariante. Quindi per (2) f^* è μ -quasi ovunque costante. Sempre dal Teorema di Birkhoff, (A.18), segue che la costante deve essere uguale a $\mathbb{E}_\mu(f)$.

(3) \Rightarrow (4). Si ha che

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau \mu(E \cap S_t F) dt = \int_X \chi_E(x) \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \chi_F(S_t(x)) dt d\mu$$

Quindi (4) segue dal Teorema della convergenza dominata di Lebesgue e dalla (A.18) per $f = \chi_F$.

(4) \Rightarrow (1). Basta considerare $F = E$ in (4) con E un insieme S_t -invariante.

□

Appendice A

Potenziali Termodinamici

In termodinamica l'energia libera è definita come

$$F = E - TS \quad (\text{A.1})$$

dove E è l'energia (interna), T la temperatura e S l'entropia.

Si ha (Huang pag.24): *In un sistema meccanicamente isolato tenuto a temperatura costante l'energia libera decresce.* Quindi in un sistema tenuto a temperatura T in una regione di volume V e numero di molecole N lo stato di equilibrio ha energia libera minima.

Meccanicamente isolato vuol dire che non si hanno variazioni di volume e di numero di molecole; tenuto a temperatura costante vuol dire messo in contatto termico con un termostato a temperatura T .

Per quanto sopra è opportuno che l'energia libera termodinamica sia scritta come funzione delle variabili indipendenti (T, V, N) , cioè $F = F(T, V, N)$. Quindi il membro di destra nella (1) deve essere scritto in funzione di (T, V, N) .

Per far questo operiamo come segue.

- *Variabili indipendenti (E, V, N) .* In questo primo passo l'espressione $E - TS$ è scritta nelle variabili indipendenti (E, V, N) .

Abbiamo definito l'entropia $S^{\text{td}}(E, V, N)$ in funzione delle variabili (E, V, N) e sappiamo dai principi della termodinamica che

$$\frac{\partial S^{\text{td}}(E, V, N)}{\partial E} = \frac{1}{T} > 0, \quad T = T(E, V, N) \quad (\text{A.2})$$

- *Variabili indipendenti (S, V, N) .* In questo secondo passo l'espressione $E - TS$ è scritta nelle variabili indipendenti (S, V, N) .

Da (A.2) segue che S^{td} è una funzione crescente di E e può dunque essere invertita definendo la funzione $E(S, V, N)$ che quindi è tale che

$$S(E(S, V, N), V, N) = S \quad (\text{A.3})$$

Derivando (A.3), dalla (A.2) otteniamo

$$\frac{\partial E(S, V, N)}{\partial S} = T(S, V, N), \quad T(S, V, N) = T(E(S, V, N), V, N) \quad (\text{A.4})$$

• *Variabili indipendenti* (T, V, N) . Derivando la relazione $\frac{\partial S}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial S} = 1$ otteniamo

$$\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)^2 + \frac{\partial S}{\partial E} \frac{\partial^2 E}{\partial S^2} = 0 \quad (\text{A.5})$$

che, usando la concavità di S ($\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} < 0$) e la (A.2), implica che

$$\frac{\partial^2 E}{\partial S^2} > 0 \quad (\text{A.6})$$

Per passare alla variabile indipendente T usiamo la relazione (A.4) per T dato e nell'incognita S . Bisogna dunque invertire l'applicazione $S \rightarrow \frac{\partial E(S, V, N)}{\partial S}$ e questo è possibile per la (A.6).

Quindi dato T sia S_T l'unico valore di S tale che

$$\left. \frac{\partial E(S, V, N)}{\partial S} \right|_{S=S_T} = T \quad (\text{A.7})$$

l'energia libera è data da

$$F^{\text{td}}(T, V, N) = E(S_T, V, N) - TS_T \quad (\text{A.8})$$

Osservazioni. Definiamo la seguente funzione (V ed N sono fissati in tutta questa trattazione)

$$g(s) = f(s) - Ts, \quad f(s) = E(s, V, N) \quad (\text{A.9})$$

ed osserviamo che $g'(S_T) = 0$ per la (A.7) mentre $g''(S_T) > 0$ per la (A.6), quindi

$$\min_s g(s) = g(S_T) \quad (\text{A.10})$$

Abbiamo quindi dimostrato che

$$F^{\text{td}}(T, V, N) = \min_S [E(S, V, N) - TS] \quad (\text{A.11})$$

La (A.11) è un caso particolare di una trasformazione ben nota in matematica e con moltissime applicazioni in fisica: *la trasformata di Legendre*. Più precisamente si ha che $F^{\text{td}}(T, V, N)$ è la trasformata di Legendre di $E(S, V, N)$ nella variabile S .

Il cambio di variabili definito dalla (A.7) ha un preciso significato geometrico: la soluzione S_T della (A.7) è l'ascissa s per cui è minima la differenza “di quota” $g(s) := f(s) - Ts$ tra il grafico della f e la retta $y = Ts$ (di coefficiente angolare T). $g(s)$ ha infatti un minimo quando la tangente al grafico e la retta sono paralleli (per la convessità di f , infatti, $g(s)$ aumenta spostandosi da quel punto), condizione che si traduce analiticamente nella $g'(s) = f'(s) - T = 0$, cioè $f'(s) = T$ che è la (A.7).

Usualmente *la trasformata di Legendre* di una funzione $f(s)$ si definisce con un sup invece di un min. Basta cambiare il segno: se $a = \inf_s \{f(s) - Ts\}$, allora $b := -a$ verifica

$$b = \sup_s \{Ts - f(s)\} \quad (\text{A.12})$$

Esercizio 1. Sia f una funzione convessa ($f'' > 0$). Si dimostri che la trasformata di Legendre f_* di f (cioè $f_*(T) := \sup_s [Ts - f(s)]$) è una funzione convessa di T e che la trasformata di Legendre di f_* è f .

Soluzione. Il $\sup_s [Ts - f(s)]$ è in realtà un massimo:

$$f_*(T) = Ts - f(s), \quad \text{dove } s = s(T) : f'(s(T)) = T \quad (\text{A.13})$$

Derivando rispetto a T ,

$$f'_*(T) = s(T) + T \frac{ds(T)}{dT} - f'(s(T)) \frac{ds(T)}{dT} = s(T) \quad (\text{A.14})$$

che dimostra che la $s(T)$ è semplicemente la derivata $f'_*(T)$ della trasformata di Legendre.

Derivando la (A.14) rispetto a T

$$f''_*(T) = \frac{ds(T)}{dT} = \frac{1}{f''(s(T))} \quad (\text{A.15})$$

(l'ultima uguaglianza si ottiene derivando l'identità $f'(s(T)) = T$). Quindi $f'' > 0$ implica $f''_* > 0$.

Indicando con $T(s)$ la soluzione di $f'_*(T) = s$,

$$(f_*)_*(s) = T(s)s - f_*(T(s)) \quad (\text{A.16})$$

Da (A.14) segue che $T(s)$ è l'inversa di $s(T)$ soluzione di $f'(s) = T$, quindi la (A.16) diventa usando la (A.13)

$$(f_*)_*(s) = Ts(T) - f_*(T) = f(s) \quad (\text{A.17})$$

Esercizio 2. In termodinamica il potenziale di Gibbs è definito come

$$\phi = F + PV \quad (\text{A.18})$$

dove F è l'energia libera, P la pressione e V il volume. Si ha (Huang pag.25): *In un sistema tenuto a temperatura e pressione costante il potenziale di Gibbs decresce.* Quindi è opportuno definire il potenziale di Gibbs nelle variabili indipendenti (T, P, N) , cioè $\phi^{\text{td}} = \phi^{\text{td}}(T, P, N)$. Quindi il membro di destra nella (A.18) deve essere scritto in funzione di (T, P, N) .

Dimostrare che $\phi^{\text{td}}(T, P, N)$ è la trasformata di Legendre di $F(T, V, N)$ nella variabile V .

Esercizio 3. Si dimostri che la pressione P è la trasformata di Legendre della densità di energia libera, cioè

$$P = P(T, V, \lambda) = \frac{1}{V} \sup_N \{ \lambda N - F(T, V, N) \} \quad (\text{A.19})$$

(Suggerimento: si usi quanto dimostrato a lezione per il potenziale Ω)