

APPUNTI DI MECCANICA STATISTICA

Rossana Marra

Dipartimento di Fisica, Università di Roma Tor Vergata

Note dalle lezioni per il corso di Meccanica Statistica 1995–2003

Ringrazio lo studente Palombi che mi ha aiutato a stendere queste note, sulla base degli appunti presi durante le lezioni.

Ringrazio lo studente Giulio De Magistris, corso di Meccanica Statistica 2, che le ha revisionate nell'A.A. 2011/2012.

Indice

1	Ipotesi Ergodica	4
1.1	Nozione di sistema dinamico.	5
1.2	Criteri di ergodicit�.	5
1.2.1	Sistemi mixing e Bernoulli.	7
2	Equivalenza degli Ensembles e Limite Termodinamico	10
2.1	Potenziali stabili.	11
2.2	Limite termodinamico.	14
2.3	Equivalenza degli ensembles.	17
2.3.1	Fluttuazioni	19
2.4	Transizione di fase.	20
2.5	Gas reticolari. Modello di Ising	23
2.5.1	Modello di Ising e ferromagnetismo	24
2.6	Modello di Ising unidimensionale	26
2.7	Funzioni di correlazione.	28
2.8	Argomento energia-entropia.	30
3	Misure di Probabilit� a Volume Infinito	33
3.1	Equazioni DLR	35
3.2	Misure trasl-invarianti e principio variazionale.	37
4	Teoria di Campo Medio per il Modello di Ising	43
4.1	Formulazione variazionale	43
4.2	Equazione di consistenza	45
4.3	Teoria di van der Waals.	51
4.4	Modello 1/N e potenziale di Kac	52
4.5	Correzioni alla teoria di campo medio	56
4.5.1	Funzioni di correlazione	58
5	Modello di Ising - Risultati	63
5.1	Teoria di Lee-Yang delle transizioni di fase.	63
5.2	Matrice di trasferimento	67
5.3	Caso bidimensionale e dualit�	69
5.4	Argomento di Peierls	74
5.5	Soluzione di Onsager	76
6	Metodi Non Perturbativi - Disuguaglianze	83
6.1	Diseguaglianze di correlazione.	83
6.2	Applicazioni.	85
6.3	Le disuguaglianze F.K.G.	88
6.4	La disuguaglianza di Simon.	90

7	Espansioni ad Alta e Bassa Temperatura	93
7.1	Equazioni ricorsive: alta temperatura.	93
7.2	Equazioni ricorsive: basse temperatura.	96
8	Altri Modelli	101
8.1	Modello gaussiano	101
8.1.1	Teoria di Campo Scalare Massivo	104
8.2	Modello rotatore piano.	105
8.3	Trasformazione di dualità.	110
8.4	Modelli di teoria di gauge.	112
9	Elementi di Teoria della Percolazione	118
9.1	Modello di Ising e percolazione di sito.	121
9.2	Percolazione di legame e modello random cluster.	123
10	Il Gruppo di Rinormalizzazione	126
10.1	Blocchi di spin e teorema del limite centrale	127
10.2	Leggi di scala ed esponenti critici.	130
10.2.1	Rinormalizzazione - Modello gaussiano	132
10.3	Trasformazione del gruppo di rinormalizzazione	133
11	Dinamica dei Fluidi	136
11.1	Nozione di sistema continuo	136
11.2	Conservazione della massa	140
11.3	Bilancio dell'impulso (equazione di Newton).	142
11.4	Bilancio del momento angolare.	145
11.5	Bilancio dell'energia (prima legge della Termodinamica).	146
11.6	Fluido ideale (o di Eulero)	149
11.7	Fluido viscoso di Navier-Stokes	152
11.8	Fluido incompressibile.	157
11.9	Limite incompressibile per le equazioni di Eulero isoentropiche.	158
12	Teoria Cinetica	162
12.1	Gas di Boltzmann.	163
12.2	Derivazione euristica dell'equazione di Boltzmann.	164
12.3	Il teorema H e gli stati d'equilibrio.	168
12.3.1	Entropia e Teorema H di Boltzmann	171
12.4	Leggi di conservazione.	175
12.5	Equazioni di Eulero	178
12.6	La gerarchia BBGKY	179
12.7	La gerarchia di Boltzmann.	184
13	Dalla Teoria Cinetica all'Idrodinamica	186
13.1	Perturbazione di un gas in equilibrio cinetico	186
13.2	L'espansione di Hilbert	190
13.3	Le equazioni di Navier-Stokes	193
13.4	L'espansione di Chapman-Enskog	194
13.5	Equazioni di Navier-Stokes incompressibili	201
14	Dalla Dinamica Newtoniana all'Idrodinamica	206
14.1	Descrizione microscopica	206
14.2	Leggi di conservazione locali.	208
14.3	Equazioni di Eulero	213

Capitolo 1

Ipotesi Ergodica

La Meccanica Statistica è lo studio dell'andamento dei sistemi con un numero molto grande di gradi di libertà. La descrizione microscopica di un sistema di particelle interagenti è basata sul moto di ciascuna particella che è dato dalle equazioni di Newton. Data l'Hamiltoniana in linea di principio si può ricostruire il moto di ogni particella. Se il numero di particelle è molto grande questo procedimento è molto laborioso; inoltre l'informazione che si ottiene può essere troppo dettagliata. Se si è interessati solo a comportamenti medi, ad esempio, è inutile conoscere tanti dettagli. Per descrivere lo stato di equilibrio di un tale sistema basta una descrizione ridotta in termini solo delle osservabili densità ed energia, la Termodinamica. Scopo della Meccanica Statistica dell'equilibrio è spiegare il passaggio dalla descrizione microscopica alla descrizione termodinamica di un sistema all'equilibrio.

La Meccanica Statistica è basata sull'ipotesi di Gibbs: un sistema all'equilibrio è distribuito in modo uniforme sulla ipersuperficie dell'energia nello spazio delle fasi. Questa assunzione è giustificata dall'idea che il sistema dopo un tempo, che può essere anche molto lungo, rilassa all'equilibrio, e che l'evoluzione all'equilibrio sia tale che le configurazioni nello spazio delle fasi che il sistema assume nel corso del tempo si distribuiscono uniformemente sulla ipersuperficie dell'energia. Intuitivamente questo significa che il punto rappresentativo del sistema nello spazio delle fasi nel suo moto visita tutto lo spazio delle fasi e rimane in media lo stesso tempo nell'intorno di ogni punto.

Se si misura un'osservabile f quello che si ottiene come risultato della misura è una media temporale. Se il sistema si comporta come descritto prima, la sua media temporale può essere sostituita da una media sullo spazio delle fasi rispetto alla misura microcanonica

$$\frac{1}{T} \int_0^T f(S_t x) dt = \langle f \rangle_{mc}$$

per T molto grandi.

Un tale comportamento è caratteristico dei sistemi cosiddetti *ergodici*.

La nozione di ergodicità si può formulare per sistemi più generali dei sistemi di particelle. Un sistema dinamico è un oggetto costituito da uno spazio delle configurazioni M , una misura normalizzata su M , μ , e una famiglia di trasformazioni S_t ad un parametro da M in M , che conserva la misura μ . Nel caso di un sistema Hamiltoniano di N particelle M è la superficie ad energia costante dello spazio delle fasi a N particelle, μ è la misura di Lebesgue, e S_t è l'evoluzione associata all'Hamiltoniana H .

1.1 Nozione di sistema dinamico.

Una terna (M, μ, S_t) costituita da uno spazio di misura, da una misura di probabilità e da un gruppo di trasformazioni continue e con inversa continua, che ha μ come misura invariante, si dice sistema dinamico.

Definizione Data un'osservabile f su M e misurabile rispetto a μ , la **media temporale** è definita da

$$\bar{f}(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(S_t x) dt \quad (1.1.1)$$

L'esistenza del limite (1.1.1) è data dal teorema di Birkhoff

Teorema 1.1.1. *Il limite (1.1.1) esiste quasi ovunque rispetto alla misura μ . Inoltre per costruzione \bar{f} è invariante rispetto a S_t , cioè $\bar{f}(S_t x) = \bar{f}(x)$ per ogni t , a parte insiemi di misura nulla. Infine $\langle \bar{f} \rangle = \langle f \rangle$, dove il simbolo $\langle \cdot \rangle$ indica la media rispetto alla misura μ , $\langle g \rangle = \int_M g d\mu$.*

1.2 Criteri di ergodicità.

Un sistema dinamico si dice ergodico se

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^t f(S_t x) dt = \langle f \rangle \quad (1.2.1)$$

Quindi per un sistema ergodico la media temporale non dipende dal dato iniziale. Ritornando al sistema di particelle, da qualunque punto nello spazio delle fasi il sistema inizi il suo moto la sua media temporale sarà sempre la stessa. Questo significa che il sistema per essere ergodico non può avere moti periodici, non ci possono essere orbite periodiche che descrivano il suo moto nello spazio delle fasi. Infatti in tal caso si ottengono valori diversi per la media temporale in dipendenza dall'orbita scelta (e questa dipende dal dato iniziale). La presenza di orbite periodiche è legata all'esistenza di quantità conservate nel moto, cioè osservabili f tali che $f(S_t x) = f(x)$. Ogni osservabile di questo tipo individua una ipersuperficie nello spazio delle fasi. Queste considerazioni portano ad un criterio per l'ergodicità, che è una definizione equivalente di l'ergodicità

Teorema 1.2.1. *Un sistema è ergodico se e solo se ogni funzione invariante è costante.*

Dimostrazione. La prova è semplice. Supponiamo che il sistema è ergodico; poichè f è invariante la sua media temporale coincide con il valore della funzione lungo il moto, ma poichè il sistema è ergodico questo valore non dipende da x e quindi la funzione è costante. Viceversa supponiamo che ogni f invariante è costante e proviamo che il sistema è ergodico. Ragionando per assurdo se non vale l'ergodicità esiste almeno una funzione tale che \bar{f} dipende da x . Ma \bar{f} è invariante e quindi si contraddice l'ipotesi. \square

E' molto facile fare un esempio di sistema non ergodico: una catena di oscillatori armonici. Ci sono tante grandezze conservate quanti sono i modi normali. Invece è molto difficile fare un esempio di sistema ergodico (biliardo di Sinai).

Esempio 1.2.1. *Esempio: rotazione uniforme sul cerchio*

Un esempio di sistema ergodico unidimensionale è il seguente: sia M il cerchio di raggio 1; $M = \{y : y = e^{2\pi i x}, x \in \mathbb{R}\}$. La misura μ è data da $dx/2\pi$. Il gruppo delle trasformazioni è il gruppo delle traslazioni discrete sul cerchio, di parametro $\alpha \in \mathbb{R}$: $S_\alpha y = e^{2\pi i(x+\alpha)}$. Se α è irrazionale il sistema dinamico è ergodico. Infatti sia f una funzione sul cerchio invariante sotto S_α . I coefficienti di Fourier \hat{f}_k di $f(y)$ e di $f(S_\alpha y)$ devono coincidere da cui

$$\int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-2\pi i k x} f(x) = \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-2\pi i k(x-\alpha)} f(x)$$

per ogni k . Questa condizione è verificata, per α irrazionale se e solo se $\hat{f}_k = 0$ per ogni $k \neq 0$. Quindi f è una costante.

Un'altra criterio di ergodicità è basato sulla nozione di indecomponibilità metrica.

Definizione Un sistema dinamico si dice **metricamente decomponibile** se esistono due sottoinsiemi di M , M_1 e M_2 , invarianti e di misura positiva tali che $M_1 \cup M_2 = M$.

Teorema 1.2.2. *Un sistema dinamico è ergodico se e solo se è metricamente indecomponibile.*

Dimostrazione. a) supponiamo che il sistema sia decomponibile e mostriamo che necessariamente non è ergodico. Per ipotesi esistono due insiemi M_1 e M_2 invarianti di misura positiva tali che $M = M_1 \cup M_2$. Costruiamo la funzione

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \in M_1 \\ 0, & x \in M_2 \end{cases} \quad (1.2.2)$$

La media temporale di f così costruita è tale che

$$\bar{f}(x) = \begin{cases} 1 & x \in M_1 \\ 0 & x \in M_2 \end{cases} \quad (1.2.3)$$

e quindi il sistema non può essere ergodico, perchè \bar{f} è invariante e non costante allo stesso tempo.

b) supponiamo che il sistema non è ergodico e proviamo che necessariamente è decomponibile. Per ipotesi esiste una funzione invariante che non è costante, chiamiamola g . Costruiamo due sottoinsiemi di M

$$M_1 = \{x : g(x) < k\}; \quad M_2 = \{x : g(x) \geq k\}$$

Poichè g è invariante i due insiemi sono invarianti per costruzione. Inoltre la loro unione è M ed è sempre possibile scegliere k in modo che i due insiemi sono di misura positiva. Quindi il sistema è decomponibile. □

Teorema 1.2.3. *Un sistema dinamico è indecomponibile se e solo se ogni sottoinsieme invariante ha misura 0 o 1.*

1.2.1 Sistemi mixing e Bernoulli.

Una nozione più forte di ergodicità (nel senso che la implica) è quella di mixing.

Definizione Un sistema dinamico (M, S_t, μ) si dice **mescolante** se per ogni coppia di sottoinsiemi di M , A e B si ha

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu(S_t A \cap B) = \mu(A)\mu(B) \quad (1.2.4)$$

Una nozione equivalente di sistema mescolante è la seguente.

Definizione Un sistema dinamico (M, S_t, μ) si dice mescolante se per ogni coppia di funzioni misurabili f e g si ha

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_M f(S_t x)g(x)d\mu = \int_M f(x)d\mu \int_M g(x)d\mu$$

Per vedere che le due definizioni sono equivalenti basta osservare che se si scelgono come f e g le funzioni caratteristiche degli insiemi A e B , χ_A , χ_B la seconda relazione si riduce alla prima usando le identità

$$\int_M \chi_A(x)d\mu = \mu(A); \quad \int_M \chi_A(x)\chi_B(x)d\mu = \mu(A \cap B)$$

Viceversa ogni funzione misurabile si può approssimare con una combinazione lineare di funzioni caratteristiche di sottoinsiemi di M .

Una proprietà più debole del mescolamento è quella di mescolamento in media:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_M f(S_t x)g(x)d\mu = \int_M f(x)d\mu \int_M g(x)d\mu \quad (1.2.5)$$

o equivalentemente

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \mu(S_t A \cap B) = \mu(A)\mu(B) \quad (1.2.6)$$

Teorema 1.2.4. *Il mescolamento in media è equivalente all'ergodicità.*

Dimostrazione. Se un sistema è mescolante in media allora per $A = B$ e A insieme invariante si ha che $\mu(A) = \mu^2(A)$ che implica $\mu(A) = 0, 1$ e quindi l'ergodicità.

Viceversa se il sistema è ergodico, si ha

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \chi_A(S_t x)\chi_B(x) = \mu(A)\chi_B(x)$$

da cui integrando rispetto a $d\mu$ si ottiene il mescolamento in media. □

Il significato fisico e l'origine del nome di mescolamento sono date dal seguente esempio. Sia M un contenitore pieno di due liquidi, 1 e 2, 1 occupa il 20% e 2 il restante 80%. Sia A la regione occupata dal liquido 1 inizialmente (quindi $\mu(A) = 1/5$) e B una qualunque parte del contenitore. Agitando il contenitore i due liquidi cominciano a mescolarsi. Detta S_t l'evoluzione indotta dall'agitare il contenitore, consideriamo $\frac{\mu(S_t A \cap B)}{\mu(B)}$. Nel limite $t \rightarrow \infty$ si ha che $\frac{\mu(S_t A \cap B)}{\mu(B)} \rightarrow \mu(A)$ per ogni B e questo significa che in ogni parte B c'è una porzione di liquido 1 pari al 20%, cioè i due liquidi sono completamente mescolati.

Osservazione 1.2.1. La rotazione uniforme sul cerchio per α irrazionale è ergodico ma non mixing. Infatti sia A un arco di circonferenza e S_T il suo shift di α . La sua intersezione con un arco fissato sarà a volte vuota a volte positiva.

Esempio 1.2.2. Sistema di Bernoulli.

Successione infinita di 0 e 1 generata dai valori di testa e croce nel lancio ripetuto di una moneta (o pari e dispari alla roulette).

Per descrivere questo come un sistema dinamico si costruisce lo spazio M come lo spazio di tutte le possibili successioni

$$M = \prod_{-\infty}^{\infty} [0, 1]$$

La misura μ su M è costruita assegnando misura $\frac{1}{2^k}$ all'insieme $A(x_{i_1} \cdots x_{i_k})$ dove

$$A(x_{i_1} \cdots x_{i_k}) = \{x : x_{i_1} = \sigma_{i_1} \cdots x_{i_k} = \sigma_k\}$$

cioè l'insieme delle successioni $x \in M$ tali che gli elementi di indici i_1, \dots, i_k hanno i valori $\sigma_{i_1} \cdots \sigma_{i_k}$.

Tutti gli altri sottoinsiemi misurabili sono ottenuti costruendo la σ -algebra generata dagli insiemi cilindrici.

T trasformazione di M in se definita come

$$(Tx)_i = x_{i+1}$$

T sposta ogni elemento nel successivo. T è invertibile e conserva la misura $\mu(T(A)) = \mu(A)$. Se A è un insieme cilindrico questo è ovviamente vero perchè conta solo il numero di elementi per determinare la misura. Questo sistema dinamico si chiama schema di Bernoulli $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Si dimostra che esso è mescolante con velocità di mescolamento infinita nel senso che esiste N tale che per ogni $n > N$

$$\mu(T^n A \cap B) = \mu(A)\mu(B)$$

mescola in un tempo finito e quindi con velocità infinita.

Dati A e B due cilindri, $T(A)$ è ancora un cilindro e per N sufficientemente grande le basi di $T^N(A)$ e B diventeranno disgiunte. La misura di due insiemi disgiunti è il prodotto.

Esempio 1.2.3. Biliardo.

Tavolo con ostacoli, un punto materiale urta con gli ostacoli e con le pareti del tavolo elasticamente. Spazio delle fasi q, θ con $q \in T$ e $\theta \in [0, 2\pi]$ angolo che determina la velocità. S_t è la soluzione delle equazioni del moto.

Diffusione:

$$D = \int dt \int dx dy \cos[\theta(t) - \theta]$$

$\cos\theta$ e $\sin\theta$ devono mescolare velocemente in modo da far convergere l'integrale.

Si può costruire una partizione dello spazio delle fasi in due parti (ad es. secondo il segno della velocità). Fissato un intervallo di tempo, t , si osserva il moto a multipli di t . Si ha una successione di 0, 1 a seconda di dove si trova il punto al tempo kt . Si dimostra che è possibile dare una partizione e un collegato sistema dinamico di sequenze che è uno schema di Bernoulli. Questo implica tra l'altro l'ergodicità del biliardo.

Capitolo 2

Equivalenza degli Ensembles e Limite Termodinamico

Come è noto lo scopo della meccanica statistica è quello di derivare le proprietà termodinamiche della materia a partire dallo studio dell'interazione dei suoi atomi e delle sue molecole. Questo fine viene perseguito utilizzando strumenti matematici di tipo statistico. L'indagine meccanico-statistica di un sistema di particelle viene compiuta secondo la seguente procedura. Si considera un sistema costituito da un numero finito di N particelle, confinate all'interno di una regione limitata $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ (d è il numero di dimensioni dello spazio dove vivono le particelle). Si assegna il potenziale d'interazione tra le particelle. Questo definisce, almeno in linea di principio, l'evoluzione temporale microscopica del sistema. La meccanica statistica subentra in questa descrizione mediante la scelta di una opportuna misura di probabilità (ensemble), scelta che dipende dal tipo di rapporto esistente tra il sistema ed il mondo esterno. Esistono tre differenti misure di probabilità: l'ensemble microcanonico, l'ensemble canonico e l'ensemble grancanonico. L'ensemble microcanonico rappresenta la misura di probabilità corretta per un sistema di particelle isolato energeticamente dal resto dell'universo e con un numero di particelle costante nel tempo. L'ensemble canonico deve invece essere utilizzato per descrivere un sistema di particelle con un numero di particelle costante nel tempo e a contatto con un reservoir termico che ne mantiene la temperatura costante. Infine l'ensemble grancanonico è adatto alla descrizione di un sistema di particelle a contatto con un reservoir termico permeabile al passaggio di particelle. Questi tre ensembles sono definiti pensando il sistema confinato nella regione Λ e pertanto producono valori d'aspettazione differenti per una medesima osservabile. Questi valori d'aspettazione dipendono ovviamente dalla regione Λ e tale dipendenza si verifica per ogni tipo di osservabile (sia essa intensiva oppure estensiva), essendo dovuta alla definizione stessa delle misure. Ciò non può essere considerato fisicamente corretto, in quanto in natura il comportamento di un volume di materia macroscopico non dipende in generale dalle dimensioni o dalla forma del volume. Ne segue che

1. a volume finito non è possibile riprodurre correttamente la termodinamica del sistema.
2. a volume finito i tre ensemble non sono equivalenti.

L'unica possibilità per realizzare il programma della meccanica statistica consiste nel considerare le distribuzioni delle osservabili nel limite in cui il sistema occupa tutto lo spazio R^d , noto tecnicamente come limite termodinamico. In altre parole per produrre risultati fisicamente corretti si calcolano i valori medi delle osservabili a volume finito in un dato ensemble e quindi si esegue il limite termodinamico. A tal fine è però indispensabile conoscere sotto quali

condizioni esistono i limiti termodinamici dei valori d'aspettazione delle osservabili nei tre ensembles (problema dell'esistenza del limite termodinamico) ed in quali condizioni tali limiti non dipendono dall'ensemble inizialmente adottato (problema dell'equivalenza degli ensembles). La teoria che vogliamo discutere ha a che fare con questi due problemi. Il programma che essa svolge può essere riassunto brevemente come segue. Si dimostra l'esistenza del limite termodinamico nell'ensemble microcanonico. Si utilizzano i risultati ottenuti per dimostrare l'esistenza del limite termodinamico nell'ensemble canonico. Si utilizzano i risultati ottenuti negli ensembles microcanonico e canonico per dimostrare l'esistenza del limite termodinamico nell'ensemble grancanonico. Quindi si esegue l'identificazione dei potenziali termodinamici (che sono l'oggetto del limite) ed infine si dimostra l'equivalenza degli ensembles nel limite termodinamico. Per l'esistenza del limite termodinamico è essenziale fare delle ipotesi sul potenziale di interazione.

2.1 Potenziali stabili.

Per avere un corretto comportamento termodinamico del sistema si richiede:

1. che le particelle non si addensino sul bordo del contenitore
2. che non si creino agglomerati di particelle ad alta densità, cioè bisogna escludere situazioni cosiddette di collasso in cui ci sono infinite particelle in un volume finito.

La situazione 1) si può verificare se il potenziale ha una parte positiva (repulsiva) all'infinito, per cui si richiede un opportuno decadimento a zero con la distanza (temperatezza)

La situazione 2) si verifica invece quando il potenziale è troppo attrattivo, sia a corte che a grandi distanze. Una condizione detta di stabilità viene introdotta per controllare questi effetti attrattivi. Un esempio di potenziale (energia potenziale) ragionevole dal punto di vista fisico è un potenziale centrale a coppie $\phi(|q_i - q_j|)$

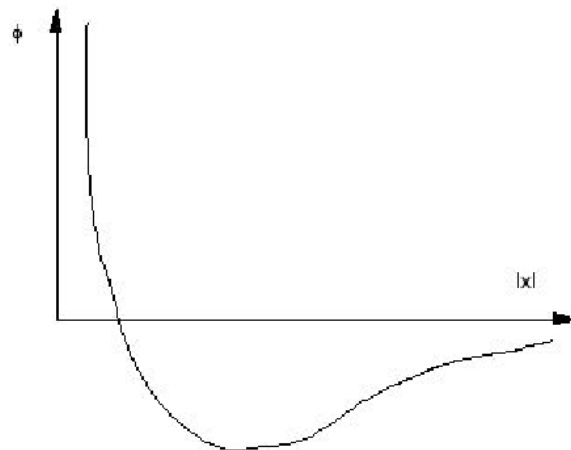


Figura 2.1: Tipico potenziale centrale a coppie che da un corretto limite termodinamico.

Considereremo solo potenziali a coppie centrali:

$$U(q_1, \dots, q_N) = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \phi(|q_i - q_j|)$$

Definizione Un potenziale si dice temperato se

$$\phi(r) \leq cr^{-\alpha} \quad (2.1.1)$$

per r grandi con $\alpha > d$

Per comprendere il significato di questa condizione consideriamo l'energia media d'interazione di una particella con le altre distribuite uniformemente con densità ρ a distanza $r \geq D$

$$\rho \int_{|x| \geq D} \phi(|x|) d^d x \leq c\rho \int_{|x| \geq D} |x|^{-\alpha} d^d x = c\rho \int_D^\infty r^{-\alpha} r^{d-1} dr < \infty$$

La condizione di decadimento (2.1.1) è tale da rendere l'energia media d'interazione considerata prima finita.

Un potenziale che non ha parte positiva all'infinito è temperato. Ad esempio il potenziale di Van der Waals o un potenziale a range finito (che è zero per $|x| > R$).

Definizione Un potenziale si dice **stabile** se

$$U(q_1 \dots q_N) > -Nc \quad (2.1.2)$$

per ogni N e per ogni configurazione $(q_1 \dots q_n)$.

Questa condizione è sufficiente ad assicurare che la funzione di partizione gran canonica è finita. Infatti

$$Q_\Lambda = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \int_{\Lambda^N} dq_1 \dots dq_N \exp -\beta U$$

Usando la stima di stabilità per il potenziale si ha

$$Q_\Lambda \leq \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N!} |\Lambda|^N \exp N\beta c = \exp[z|\Lambda| \exp \beta c].$$

La stima lineare in N per l'energia potenziale è essenziale: si può mostrare che la condizione di stabilità è necessaria, in una classe ragionevole di potenziali, per la convergenza della funzione di partizione.

Osservazione 2.1.1. *Il fatto che la funzione di partizione gran canonica è infinita a volume finito significa che la probabilità di trovare un numero finito di particelle in una regione finita è zero.*

Un esempio di potenziale non stabile è il seguente: consideriamo un potenziale centrale a coppie tale che

$$\int \phi(y) dy \leq 0$$

Mostriamo che la funzione di partizione gran canonica è infinita.

Sia $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ tale che $|\Lambda| < \infty$. Per la convessità dell'esponenziale si ha

$$\frac{1}{|\Lambda|^N} \int_{\Lambda^N} dq_1 \dots dq_N e^{-\beta U(q_1, \dots, q_N)} \geq \exp \left\{ -\frac{\beta}{|\Lambda|^N} \int_{\Lambda^N} dq_1 \dots dq_N U(q_1, \dots, q_N) \right\} = (2.1.3)$$

$$= \exp \left\{ -\frac{\beta}{|\Lambda|^N} \int_{\Lambda^N} dq_1 \dots dq_N \sum_{i < j}^{1, N} \phi(|q_i - q_j|) \right\} = (2.1.4)$$

$$= \exp \left\{ -\frac{\beta}{|\Lambda|^N} \sum_{i < j}^{1, N} \int_{\Lambda^N} dq_1 \dots dq_N \phi(|q_i - q_j|) \right\} = (2.1.5)$$

$$= \exp \left\{ -\frac{\beta}{|\Lambda|^2} \frac{N(N-1)}{2} \int_{\Lambda \times \Lambda} dq_1 dq_2 \phi(|q_1 - q_2|) \right\} (2.1.6)$$

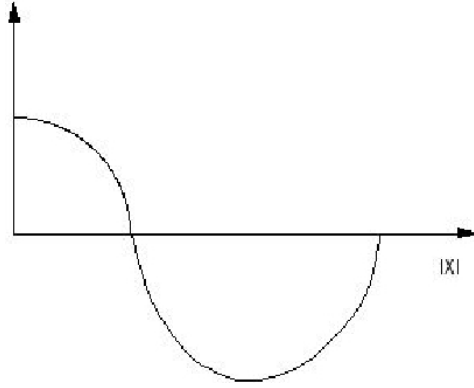


Figura 2.2: Potenziale non stabile: ad esso corrisponde una funzione di partizione grancanonica Q_Λ divergente.

Se Λ è una regione molto grande, ma limitata, $|q_1 - q_2|$ assume valori su un intervallo molto grande del semi asse reale positivo, e quindi, data la forma del potenziale, risulta che esiste un Λ_0 tale che per ogni $\Lambda \geq \Lambda_0$ si ha $\frac{1}{|\Lambda|^2} \int_{\Lambda^2} dq_1 dq_2 U(|q_1 - q_2|) = -k < 0$. In definitiva

$$\frac{1}{|\Lambda|^N} \int_{\Lambda^N} dq_1 \dots dq_N e^{-\beta U(q_1, \dots, q_N)} \geq \exp\left\{\frac{\beta k}{\Lambda^2} N(N-1)\right\} \quad (2.1.7)$$

Ne segue che

$$\begin{aligned} Q_\Lambda(\beta, z) &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \frac{|\Lambda|^N}{|\Lambda|^N} \int_{\Lambda^N} dq_1 \dots dq_N e^{-\beta U(q_1, \dots, q_N)} \geq \\ &\geq \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N!} |\Lambda|^N \exp\left\{\frac{\beta k}{2} N(N-1)\right\} = +\infty \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

La conclusione è che ci deve essere un bilanciamento tra la parte attrattiva e quella repulsiva del potenziale per evitare situazioni patologiche dal punto di vista termodinamico.

Il seguente teorema dà delle condizioni sufficienti per la stabilità. L'idea è che affinché un potenziale sia stabile serve che esso non sia troppo attrattivo a lunghe distanze e sia abbastanza repulsivo a corta distanza. Non diamo la dimostrazione: si trova sul libro di Ruelle.

Teorema 2.1.1. *Un potenziale a coppie $\phi(|x|)$ limitato dal basso è stabile se diverge in modo non integrabile in 0 e se è sommabile all'infinito.*

In altri termini

$$\phi(|x|) \geq \phi_1(|x|) \quad |x| \leq r_1; \quad \phi(|x|) \geq -\phi_2(|x|) \quad |x| \geq r_2$$

con $0 < r_1 < r_2$ e ϕ_1, ϕ_2 due funzioni positive decrescenti tali che

$$\int_0^{r_1} \phi_1(t) t^{d-1} dt = +\infty; \quad \int_{r_2}^{\infty} \phi_2(t) t^{d-1} dt < \infty$$

Un potenziale ϕ tale che $\phi_1 = \phi_2 = |x|^\alpha$, con $\alpha > d$ è stabile. Il potenziale di Van der Waals è stabile.

Osservazione 2.1.2. *L'energia potenziale dovuta all'interazione gravitazionale è instabile.*

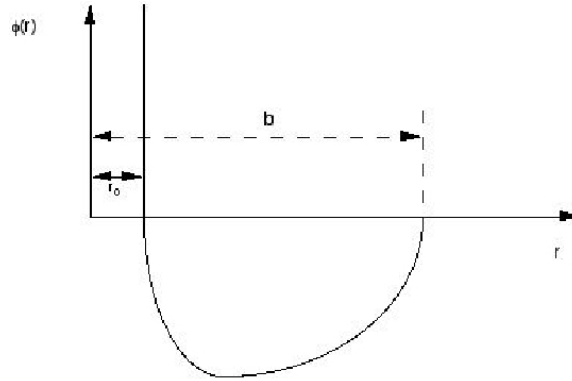
2.2 Limite termodinamico.

Definizione (di successione di van Hove) Una successione di insiemi Λ_k di \mathbb{R}^d diventa infinitamente grande nel senso di van Hove se

$$\lim_{k \rightarrow \infty} N_\varepsilon^i(k) = \infty, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{N_\varepsilon^i(k)}{N_\varepsilon(k)} = 1 \quad (2.2.1)$$

per ogni ε , dove $N_\varepsilon^i(k)$ è il numero di tessere di lato ε contenute in Λ_k e $N_\varepsilon(k)$ è il numero di tessere di lato ε che hanno intersezione non vuota con Λ_k

Diamo ora la dimostrazione dell'esistenza del limite termodinamico per la funzione di partizione canonica, per una opportuna classe di potenziali. Consideriamo un potenziale a coppie con hard core di raggio R_0 , range finito b e limitato dal basso.



Potenziale di Van Hove

Figura 2.3: Il potenziale considerato diverge per $r < r_0$; viene detto di “hard core” perché rappresenta l’interazione tra “sfere dure” di raggio $r_0/2$, non compenetrabili.

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & r \leq r_0 \\ < 0 & r_0 < r < b \\ 0 & r \geq b \end{cases}$$

Consideriamo la funzione di partizione canonica Z associata a questa interazione, in un volume finito Λ . Vogliamo mostrare che esiste il limite

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\Lambda} \log Z_\Lambda(\rho, \beta) \quad (2.2.2)$$

Scegliamo una particolare successione di volumi Λ_k così costruita: il primo elemento della successione è un cubo di volume Λ_1 . Ritagliamo un contorno di spessore $\frac{r_0}{2}$ intorno al bordo. N_1 particelle sono messe all’interno e non vi sono particelle nel contorno. Il secondo elemento della successione è costruito traslando in ogni direzione il cubo Λ_1 col suo contorno; si ottengono così 2^d cubi ciascuno col suo contorno che costituiscono un cubo Λ_2 di volume $|\Lambda_2| = 2^d |\Lambda_1|$ con dei corridoi al suo interno di spessore r_0 e un contorno di spessore $\frac{r_0}{2}$. Le particelle non possono stare nei corridoi e nei contorni esterni. Il numero di particelle in Λ_2 è $2^d N_1$ in modo da tenere la densità costante. Iterando il procedimento si ottiene una successione Λ_k . Ora bisogna valutare la funzione di partizione $Z_{\Lambda_k} \equiv Z_k$ per ogni elemento della successione. Si vuole provare un

andamento esponenziale nel volume per Z_k . Questo è equivalente a mostrare una proprietà di fattorizzazione del tipo $Z_\Lambda \sim Z_{\Lambda/n}^n$. L'idea è di confrontare la funzione di partizione nel cubo Λ_{k+1} con quella nel cubo Λ_k e ottenere una stima del tipo $Z_{k+1} \geq Z_k^{2^d}$. Prima di tutto per fattorizzare bisogna eliminare l'interazione tra cubi diversi. Poichè l'interazione è attrattiva per particelle appartenenti a cubi diversi si minora eliminando queste interazioni. Inoltre si minora ulteriormente restringendo l'integrazione alle configurazioni in cui ci sono N_k particelle in ogni cubo. In questo modo la funzione di partizione si può riscrivere come un prodotto di funzioni di partizione nei cubi Λ_k . Ma ci sono tanti termini di questo tipo quanti sono i modi di suddividere le particelle nei cubi piú piccoli. Il numero di modi di disporre N_k particelle su un totale di N_{k+1} in 2^d cubi è $(2^d N_k)! / (N_k)!^{2^d}$. Combinando questo fattore con $\frac{1}{N_{k+1}!}$ in Z_{k+1} si ottiene la stima

$$Z_{k+1}(\rho, \beta) \geq [Z_k(\rho, \beta)]^{2^d}$$

Definiamo l'energia libera a volume finito

$$f_k = \frac{1}{\Lambda_k} \log Z_k \quad (2.2.3)$$

Si ha

$$f_{k+1} = \frac{1}{2^d |\Lambda_k|} \log Z_{k+1} \geq \frac{1}{2^d |\Lambda_k|} \log Z_k^{2^d} = f_k.$$

La successione f_k è quindi monotona crescente. Se proviamo che è anche limitata dall'alto è convergente e questo equivale all'esistenza del limite termodinamico della funzione di partizione. La stima dall'alto è fornita dalla proprietà di stabilità del potenziale considerato. Infatti

$$Z_k(\rho, \beta) \leq \frac{1}{N_k!} |\Lambda_k|^{N_k} \exp \beta N_k c$$

dove c è la costante che entra nella condizione di stabilità. Per l'energia libera si ha, usando l'approssimazione di Stirling $\log N! \sim N \log N - N$,

$$f_k \leq \rho [\beta c + \log |\Lambda_k| - \log N_k + 1] < \infty$$

perchè il limite è preso tenendo costante la densità.

Osservazione 2.2.1. *Per estendere la dimostrazione precedente ad una successione di cubi senza le cornici, si può procedere così: si minora considerando solo le configurazioni in cui le particelle non si trovano nelle cornici. In questo modo a destra della disuguaglianza si ottengono le funzioni di partizione relative ai quadrati con le cornici, che differiscono da quelle senza cornici per termini di superficie (questo va provato). Dividendo per il volume nel limite termodinamico questi termini vanno a zero.*

L'energia libera $f(\rho, \beta) = \lim_{k \rightarrow \infty} f_k$ è legata all'energia libera di Helmholtz per particella ψ dalla relazione $\frac{1}{\rho} f(\rho, \beta) = -\beta \psi(v, \beta)$, dove $\frac{1}{\rho} = v$ e $\Psi(V, T) = U - TS$, $\frac{1}{N} \Psi(V, T) \equiv \psi$. L'energia libera di Helmholtz è legata alla compressibilità $K_t^{-1} = -V \frac{\partial P}{\partial V}$ dalla relazione $-\frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} = (VK_t)^{-1}$. poichè per ragioni fisiche la compressibilità deve essere positiva l'energia libera deve essere convessa nel volume. L'energia libera f che abbiamo costruito come limite termodinamico deve quindi essere concava come funzione di ρ .

Osservazione 2.2.2. *Se $h(v) = \frac{1}{\rho} g(\rho)$ e g è una funzione convessa di ρ anche h è una funzione convessa di v .*

Per definizione una funzione continua g è concava se

$$g(\alpha x + (1 - \alpha)x') \geq \alpha g(x) + (1 - \alpha)g(x') \quad (2.2.4)$$

con $\alpha \in [0, 1]$.

Basta dimostrare che, fissati arbitrariamente $x_1, x_2 \in R$ la disuguaglianza di concavità vale per $\alpha = 1/2$. Infatti sfruttando questo risultato si dimostra per induzione che la stessa disuguaglianza vale per α diadico razionale, cioè per α della forma

$$\alpha = \frac{2j + 1}{2^k} \quad k \in N \quad \text{e} \quad j = 0, 1, \dots, 2^k - 1 \quad (2.2.5)$$

Mostriamo come esempio come si passa da $\alpha = \frac{1}{2}$ ad $\alpha = \frac{3}{4}$.

Supponiamo che la (2.2.5) sia vera per $\alpha = \frac{1}{2}$ ed ogni coppia x, x' . Fissata una coppia, la stessa disuguaglianza sarà valida per la coppia x'', x' con x'' il punto di mezzo del segmento di estremi x, x' .

$$g(\alpha x'' + (1 - \alpha)x') \geq \alpha g(x'') + (1 - \alpha)g(x') \quad (2.2.6)$$

Osserviamo che possiamo rappresentare il punto di mezzo del segmento x'', x' , z , come $z = \alpha x'' + (1 - \alpha)x'$ con $\alpha = \frac{1}{2}$ oppure $z = \alpha x + (1 - \alpha)x'$ con $\alpha = \frac{3}{4}$. Abbiamo anche $x'' = \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}x'$. Da cui,

$$g(z) \geq \frac{1}{2}g(x'') + \frac{1}{2}g(x')$$

Applicando la disuguaglianza di nuovo

$$\begin{aligned} g(z) &\geq \frac{1}{2}[\frac{1}{2}g(x) + \frac{1}{2}g(x')] + \frac{1}{2}g(x') = \\ &\frac{1}{4}g(x) + \frac{3}{4}g(x') \end{aligned}$$

Infine la validità della disuguaglianza si estende ad ogni $\alpha \in [0, 1]$ sfruttando la superiore semicontinuità della $g(x)$.

Vogliamo provare che l'energia libera (per volume) f è concava in ρ mostrando che, per ogni coppia di valori della densità, si ha

$$f\left(\frac{\rho_1 + \rho_2}{2}\right) \geq \frac{1}{2}[f(\rho_1) + f(\rho_2)]$$

Siccome f è ottenuta come limite delle f_k , ritorniamo a considerare il caso di un volume finito. Fissiamo un volume N_{k+1} e prendiamo un numero di particelle $N_{k+1} = 2^{d-1}[N_K^1 + N_K^2]$ e ne poniamo N_K^1 nella metà dei 2^d cubi Λ_k e N_K^2 nell'altra metà. $N_K^1/|\Lambda_k| = \rho_1$ e $N_K^2/|\Lambda_k| = \rho_2$. Inoltre $N_{k+1}/|\Lambda_{k+1}| = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2}$. Ragionando come nella dimostrazione del limite termodinamico si ottiene la disuguaglianza

$$f_{k+1}\left(\frac{\rho_1 + \rho_2}{2}\right) \geq \frac{1}{2}[f_k(\rho_1) + f_k(\rho_2)]$$

Passando al limite si ottiene la proprietà di concavità desiderata.

2.3 Equivalenza degli ensembles.

La prova dell'equivalenza degli ensembles è basata sull'esistenza del limite termodinamico. Si procede dimostrando l'esistenza del limite termodinamico in ciascun ensemble, ottenendo i relativi potenziali termodinamici, che andranno poi identificati con l'entropia, l'energia libera e la pressione. Come conseguenza dell'esistenza del limite termodinamico si trovano anche le relazioni tra tali potenziali in modo da ricostruire correttamente la termodinamica. Infine il metodo usato per provare l'esistenza del limite termodinamico serve anche per provare che le fluttuazioni (di energia nel canonico e di densità nel grancanonico) vanno a zero.

Determiniamo la relazione tra entropia e energia libera. L'argomento euristico è il seguente.

$$Z_\Lambda(\rho, \beta) = \frac{1}{N!} \int_{\Lambda^N} dq_1 \dots dq_n \exp -\beta U(q_1 \dots q_N)$$

Riarrangiando l'integrale sulle configurazioni mettendo insieme tutte le configurazioni che hanno la stessa energia si ha

$$Z_\Lambda(\rho, \beta) = \int_{-k_\Lambda^2}^{k_\Lambda^1} de \exp -\beta e \Lambda \frac{1}{N!} \int \delta(U(q_1 \dots q_N) = e \Lambda) dq_1 \dots dq_n$$

dove $\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} k_\Lambda^i = \infty$. Assumendo l'esistenza del limite termodinamico nel microcanonico, si ha che l'integrale è legato all'entropia da

$$\frac{1}{N!} \int \delta(U(q_1 \dots q_N) = e \Lambda) dq_1 \dots dq_n \sim \exp \Lambda s(\rho, e)$$

da cui

$$Z_\Lambda(\rho, \beta) \sim \int_{-k_\Lambda^2}^{k_\Lambda^1} de \exp -\Lambda [\beta e - s(\rho, e)]$$

Per Λ grandi l'integrale si concentra sui valori di energia che rendono minimo l'esponente $[\beta e - s(\rho, e)]$ (metodo del punto di sella). In conclusione, passando al limite per Λ che tende all'infinito si ha per l'energia libera

$$f(\rho, \beta) = \sup_e (s(\rho, e) - \beta e) \quad (2.3.1)$$

In altri termini, l'energia libera è la trasformata di Legendre dell'entropia rispetto all'energia. L'estremo superiore esiste perchè l'entropia microcanonica è concava come funzione dell'energia. Questa proprietà di concavità dell'entropia discende dalla prova dell'esistenza del limite termodinamico microcanonico, analogamente a quanto detto sopra per il caso dell'ensemble canonico.

Inciso

Definizione di trasformata di Legendre.

Sia $f(x)$ una funzione convessa, si chiama trasformata di Legendre e si denota con $f^*(p)$

$$f^*(p) = \sup_x (px - f(x))$$

da cui la relazione

$$\frac{d}{dx} f(x) = p$$

Dal punto di vista grafico, si tracci una retta tangente a $f(x)$ in un punto x_0 di pendenza p : il valore di $f^*(p)$ è la massima distanza tra la retta e la funzione. $f^*(p)$ è a sua volta convessa e la trasformata di Legendre di $f^*(p)$ è $f(x)$. Inoltre

$$\frac{d}{dx}f(x) = \left[\frac{d}{dp}f^*(p)\right]^{-1}$$

La definizione si può estendere al caso di una funzione convessa in senso generalizzato in cui la derivata prima può essere discontinua.

Supponiamo per il momento che l'estremo superiore venga raggiunto per un solo valore dell'energia, che chiamiamo \bar{e} .

Una immediata conseguenza della (2.3.1) è la relazione $\frac{\partial s}{\partial e} = \beta$, dove la derivata è valutata nel valore di e in cui è raggiunto il sup. Inoltre il fatto che l'energia libera è la trasformata di Legendre rispetto ad e di una funzione concava implica che essa è concava rispetto alla variabile coniugata all'energia, cioè β . Possiamo quindi invertire la trasformata di Legendre e ottenere l'entropia come funzione dell'energia (e della densità)

$$s(\rho, e) = \sup_{\beta}(\beta e + f(\rho, \beta)) \quad (2.3.2)$$

da cui per il valore dell'energia che determina il massimo, \bar{e} , si ha la relazione $\frac{\partial f(\rho, \beta)}{\partial \beta} = -\bar{e}$

Se si parte dalla funzione di partizione gran canonica, si ottiene la relazione tra pressione ed energia libera. Identificando la pressione termodinamica P come

$$\beta P(z, \beta) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \log Q_{\Lambda}(z, \beta). \quad (2.3.3)$$

Ragionando come nel caso precedente si ha, tramite l'utilizzo del metodo del punto di sella:

$$\beta P(z, \beta) = \sup_{\rho}(\beta \rho \log z + f(\rho, \beta)) \quad (2.3.4)$$

Inoltre, detto $\bar{\rho}$ il valore in cui è assunto il massimo, si ha la relazione $\frac{\partial f(\bar{\rho}, \beta)}{\partial \rho} = -\log z$. Tutte le altre relazioni termodinamiche si ottengono a partire da queste.

Rimane il problema della identificazione dei potenziali termodinamici. Infatti la funzione determinata come limite termodinamico nel microcanonico è identificata con l'entropia termodinamica, dopo aver identificato la temperatura, usando il primo principio. Poiché $\partial s / \partial e = \beta$ per un cambiamento infinitesimo nello stato a volume specifico costante si ha $T ds = de$, da cui si vede che s può differire dall'entropia per una funzione che dipende dalla densità al più. Quindi bisogna lavorare nel canonico o meglio nel grancanonico. Il modo logicamente corretto di procedere è il seguente: partire dal grancanonico, identificare indipendentemente la pressione, poi usare la relazione termodinamica con l'energia libera per identificare quest'ultima e infine identificare l'entropia come trasformata di Legendre dell'energia libera.

Identificazione della temperatura.

È basata sulla nozione intuitiva che mettendo due corpi in contatto essi all'equilibrio devono avere la stessa temperatura. Usando $\frac{\partial s}{\partial e} = \beta$ e il fatto che all'equilibrio l'entropia complessiva del sistema deve essere massima, si identifica β con l'inverso della temperatura.

Identificazione della pressione.

Consideriamo una scatola Λ e un contorno $\Delta\Lambda$ di spessore infinitesimo, $\Lambda \cup \Delta\Lambda = \Lambda'$. Riscriviamo la funzione di partizione grancanonica in Λ' come

$$\sum_{n=0, m=0}^{\infty} z^n z^m \frac{1}{n!m!} \int_{\Lambda^n} dq_1 \dots dq_n \int_{\Delta\Lambda^m} dq_{n+1} \dots dq_{n+m} \exp -\beta U(q_1 \dots q_{n+m})$$

La funzione di partizione in Λ è la somma in cui $m = 0$. La quantità

$$\frac{Q_{\Lambda \cup \Delta\Lambda} - Q_{\Lambda}}{Q_{\Lambda \cup \Delta\Lambda}} \quad (2.3.5)$$

è la probabilità rispetto alla misura gran canonica di avere almeno una particella in $\Delta\Lambda$. Se lo spessore $\Delta\Lambda$ è sufficientemente piccolo nella somma contribuiscono solo le configurazioni con 1 particella in $\Delta\Lambda$ (le altre hanno probabilità che va a zero). Quindi si ha per tale probabilità l'espressione

$$Q_{\Lambda}^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{n+1}}{n!} \int_{\Delta\Lambda} d\bar{q} \int_{\Lambda^n} dq_1 \dots dq_n \exp -\beta U(\bar{q}, q_1 \dots q_n) = \int_{\Delta\Lambda} dq n(q)$$

dove $n(q)$ è il numero medio di particelle nel volumetto dq centrato in q rispetto alla misura gran canonica.

Mandando a zero il volume di $\Delta\Lambda$, si ha

$$\int_{\Delta\Lambda} dq n(q) \rightarrow \int_{\partial\Lambda} d\sigma(q) n(q)$$

dove $\partial\Lambda$ è la superficie di Λ e $d\sigma$ è l'elemento infinitesimo di superficie.

Dividendo per il volume di $\Delta\Lambda$ si ha un'espressione per il rapporto incrementale del logaritmo di Q rispetto ad un incremento infinitesimo del volume, cioè

$$\lim_{\Delta|\Lambda| \rightarrow 0} \frac{\Delta \log Q_{\Lambda}}{\Delta|\Lambda|} = \frac{\int_{\partial\Lambda} d\sigma(q) n(q)}{\int_{\partial\Lambda} d\sigma(q)}$$

La successione ottenuta dei rapporti incrementali facendo crescere Λ ha lo stesso limite della successione delle funzioni per cui

$$\lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} \frac{\log Q_{\Lambda}}{|\Lambda|} = \frac{\int_{\partial\Lambda} d\sigma(q) n(q)}{\int_{\partial\Lambda} d\sigma(q)} \quad (2.3.6)$$

L'espressione che compare a destra della (2.3.6) è uguale a βP , vedere ad es. Presutti, Lezioni di Meccanica Statistica 1995.

2.3.1 Fluttuazioni

La probabilità di un sottinsieme di configurazioni A rispetto alla misura canonica a volume finito Λ è data da $Z_{\Lambda}[A]/Z_{\Lambda}$ dove $Z_{\Lambda}[A]$ è definita come

$$Z_{\Lambda}(\rho, \beta)^A = Z_{\Lambda}(\rho, \beta) = \frac{1}{N!} \int_A dq_1 \dots dq_n \exp -\beta U(q_1 \dots q_N)$$

$Z_{\Lambda}[A]$ si può interpretare come una funzione di partizione parziale nel senso che non si integra su tutte le possibili configurazioni del sistema ma solo su un sottinsieme A .

Anche la funzione di partizione parziale ha un andamento esponenziale in Λ per grandi Λ , perchè si applicano gli stessi argomenti usati per provare il limite termodinamico per Z . Consideriamo come insieme A l'insieme delle configurazioni tali che l'energia per unità di volume

U/Λ sia minore di $\bar{e} - \delta$ per ogni δ positivo, dove \bar{e} è l'energia termodinamica. Possiamo quindi dire che

$$Z_\Lambda[A] \sim \exp \Lambda \sup_{e \in \mathbb{I}} (s(\rho, e) - \beta e)$$

dove $\mathbb{I} = [-\infty, \bar{e} - \delta]$. La probabilità che U/Λ sia minore di $e - \delta$ è allora data da

$$Z_\Lambda[A]/Z_\Lambda(\rho, \beta) \sim \exp \Lambda [\sup_{e \in \mathbb{I}} (s(\rho, e) - \beta e) - \sup_{e \in \mathbb{R}} (s(\rho, e) - \beta e)]$$

Poichè l'estremo superiore su un sottinsieme è in genere piu' piccolo dell'estremo superiore su tutto l'insieme tale probabilità va a zero per Λ che tende all'infinito. Per lo stesso motivo va a zero la probabilità che U/Λ sia maggiore di $\bar{e} + \delta$ per ogni δ positivo. In conclusione nel limite Λ che tende all'infinito l'energia per unità di volume assume lo stesso valore per tutte le configurazioni e questo valore è il valore dell'energia che caratterizza lo stato nel microcanonico.

2.4 Transizione di fase.

La concavità dell'energia libera non implica che la funzione abbia un unico punto di massimo. Può infatti accadere che f come funzione di ρ abbia dei tratti rettilinei. Cominciamo ad esaminare l'entropia come funzione di e . Supponiamo che l'entropia abbia un tratto rettilineo. Siano e_- ed e_+ i valori estremi dell'intervallo in cui l'entropia è lineare. Se si guarda al grafico di $s(\rho, e) - \beta e$, si ha che la funzione raggiunge il massimo non in un punto, ma sull'intervallo $[e_-, e_+]$, in cui quindi risulta costante.

L'energia libera può ancora essere costruita come trasformata di Legendre, ma in tal caso la funzione sarà solo concava in β e non avrà derivata seconda. Infatti l'energia interna risulta una funzione discontinua di β con un salto pari a rispetto $e_+ - e_-$. Per vederlo si ragiona così: se $\beta' < \beta$ è tale che il massimo è raggiunto in un solo punto $e(\rho, \beta')$, allora per la concavità dell'entropia si avrà $e(\rho, \beta') > e_+$. Analogamente se $\beta'' > \beta$ è tale che il massimo è raggiunto in un solo punto $e(\rho, \beta'')$ allora $e(\rho, \beta'') < e_-$. Poichè β' e β'' possono essere scelti arbitrariamente vicini a β , l'energia ha un salto di $e_+ - e_-$, che rappresenta il calore latente per unità di volume. Di conseguenza, poichè l'energia interna è la derivata rispetto a β dell'energia libera, si ha che $f(\rho, \beta)$ ha derivata discontinua in β .

In conclusione, ci possono essere situazioni in cui lo stato temodinamico non è caratterizzato da un unico valore del parametro, ma c'è un intervallo di valori che corrispond fisicamente ad una situazione di coesistenza di due fasi termodinamiche con valori dell'energia interna e_+, e_- .

Analizziamo ora l'energia libera come funzione di ρ . Se c'è una parte piatta nel suo grafico rispetto a ρ , la funzione $\rho\mu + f(\rho, \beta)$ è costante (e assume il massimo) in un intervallo $[\rho_-, \rho_+]$.

Questo significa che la densità come funzione del potenziale chimico μ è discontinua. Di conseguenza la derivata della pressione rispetto alla densità è discontinua in μ . Ancora una volta si è in presenza di coesistenza di due fasi termodinamiche corrispondenti a densità $[\rho_-, \rho_+]$.

Per comprendere a quale fenomeno fisico corrisponde la coesistenza di fase, consideriamo la pressione come funzione del volume specifico $v = \rho^{-1}$. La pressione come funzione di V è continua. Il salto nella densità al variare del potenziale chimico appare nel grafico di P come una parte piatta (questo perchè μ è piatto in funzione di ρ in presenza di coesistenza). L'apparire della coesistenza dipende dal valore della temperatura. Se consideriamo un gas ad una temperatura T opportunamente bassa e lo comprimiamo il gas raggiunge una certa densità

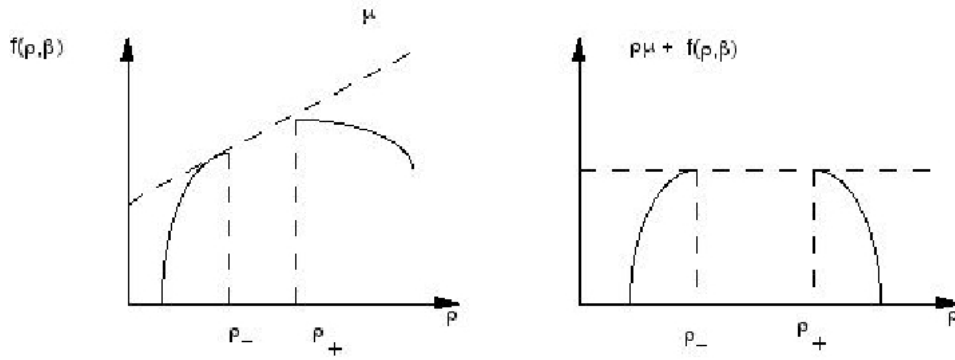


Figura 2.4: Energia libera e pressione in presenza di una transizione di fase.

ρ_- . Se compresso ancora, la pressione rimane costante ma il gas comincia a condensare fino a diventare liquido ad una densità piú grande ρ_+ . Si è quindi in presenza di una transizione di fase gas-liquido. I valori della densità intermedi $\alpha\rho_- + (1 - \alpha)\rho_+$ corrispondono ad uno stato miscela con una percentuale α di gas e $1 - \alpha$ di liquido. Questo fenomeno appare per temperature $T < T_c$. Per temperature maggiori il gas per quanto compresso non diventa liquido e le isoterme diventano le iperboli del gas perfetto.

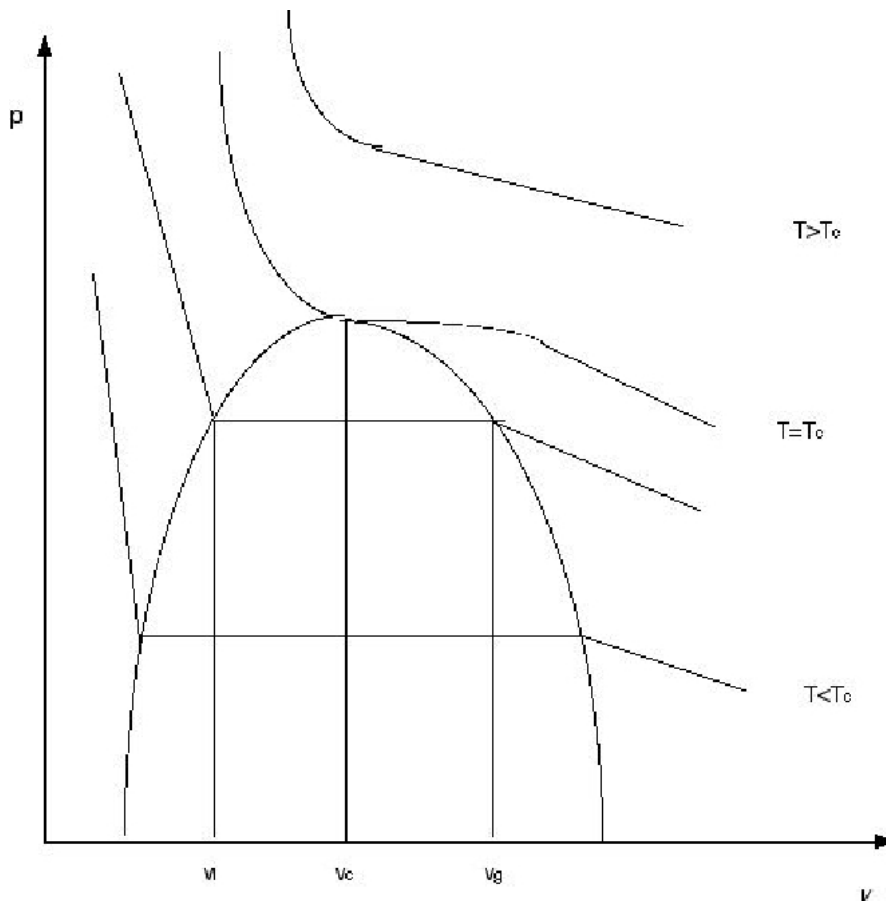


Figura 2.5: Isotherme per $T > T_c$, $T = T_c$, $T > T_c$ nel piano pv , dove $v = 1/\rho$, volume specifico. Al di sotto di T_c compaiono due valori di v , v_L e v_G , tra cui p è costante e si ha transizione.

Osservazione 2.4.1. *In questo tipo di transizioni di fase c'è anche presenza di calore latente $\lambda = Tds$, dove λ è l'energia liberata (od assorbita) in una transizione di fase $\lambda = e_+ - e_- + P(v_+ - v_-)$.*

2.5 Gas reticolari. Modello di Ising

Consideriamo ora il gas reticolare che è un modello estremamente semplificato che però presenta proprietà interessanti in meccanica statistica, in particolare si hanno fenomeni di transizione di fase per questo modello. Esso è la versione discreta di un sistema di N particelle interagenti in un sottinsieme Λ di \mathbb{R}^d . Consideriamo un potenziale a coppie e un'energia di interazione della forma:

$$U(q_1 \dots q_N) = \sum_{i < j} \phi(|q_i - q_j|).$$

La funzione di partizione gran canonica è

$$Q_\Lambda(\beta, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{\beta\mu n} \frac{1}{n!} \int_{\Lambda^n} dq_1 \dots dq_n \exp -\beta U(q_1 \dots q_n)$$

Consideriamo una partizione di \mathbb{R}^d in cubi di lato 1 (ciò corrisponde ad aver fissato l'unità di misura uguale alla lunghezza del lato). Supponiamo che in ogni cubo sia presente al più una particella e che l'interazione fra particelle non vari in modo significativo all'interno dei cubi. In questo modo stiamo costruendo un reticolo \mathbb{Z}^d formato dai centri dei cubi. Una configurazione del sistema di particelle è determinata assegnando la variabile numero di occupazione in ogni cubo. Quindi una configurazione è una funzione su \mathbb{Z}^d a valori 0, 1. Indichiamo con $n = \{n_i\}_{i \in \mathbb{Z}^d}$ una configurazione dove $n_i = 0, 1$ è il numero di occupazione nel sito i . Gli stati di un gas reticolare sono le misure di probabilità μ sullo spazio delle configurazioni $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$.

L'interazione è una funzione $\phi_{xy} = |\phi(|x - y|)|$, $x, y \in \mathbb{Z}^d$, $\phi : \mathbb{Z}^d \rightarrow \mathbb{R}$ con $\sum_{r \in \mathbb{Z}^d} \phi(|r|) < \infty$.¹ L'hamiltoniana è data da

$$H(n) = -\frac{1}{2} \sum_{x \neq y} \phi_{xy} n_x n_y$$

La presenza del fattore $n_x n_y$ discende dal fatto che se nel sito i non c'è una particella il contributo all'energia è zero. La somma sulle particelle è diventata una somma sui siti reticolari.

Per costruire la funzione di partizione gran-canonica si osserva che l'integrale sullo spazio delle configurazioni $q_1 \dots q_n$ diventa una somma sulle configurazioni $\underline{n} = \{n_i, i \in \Lambda\}$ tale che $\sum_i n_i = N$. In definitiva

$$Q_\Lambda(\beta, \mu) = \sum_n \exp\left\{\beta\mu \sum_i n_i + \frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} n_i n_j\right\}$$

Notare che il fattore $\frac{1}{N!}$ è scomparso perchè in una configurazione \underline{n} non è detto quali particelle sono in quali siti.

Un altro caso interessante isomorfo al gas reticolare è un sistema di spin di Ising. In questo caso la configurazione nel sito i è individuata dal valore dello spin σ_i che può assumere valori 1 e -1 . L'energia associata alla configurazione σ è

$$H(\sigma) = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i$$

dove h_i è il campo magnetico locale. L'isomorfismo si ha mediante la seguente identificazione:

$$n_i = \frac{1 - \sigma_i}{2}$$

¹In tal modo è soddisfatta la condizione di temperatezza (2.1.1).

Si ha

$$\begin{aligned}
& \mu \sum_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} n_i n_j \\
&= \mu \sum_i \frac{1 - \sigma_i}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} \frac{1 - \sigma_i}{2} \frac{1 - \sigma_j}{2} \\
&= \frac{\mu}{2} |\Lambda| - \sum_i \frac{\mu}{2} \sigma_i + \frac{1}{2} \frac{1}{4} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} \\
&\quad - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \sum_i \sigma_i \left(\sum_{j: i \neq j} \phi_{ij} \right) + \frac{1}{2} \frac{1}{4} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} \sigma_i \sigma_j \\
&-h_i = \frac{\mu}{2} + \frac{1}{2} \sum_{j: 0 \neq j} \phi_{0j}; \quad J_{ij} = \frac{1}{4} \phi_{ij}
\end{aligned}$$

Il conto precedente ci dice che la funzione di partizione gran canonica del gas reticolare diventa la funzione di partizione di un sistema di spin sul reticolo con un numero di spin fissato ("canonico").

Usando la relazione tra le funzioni di partizione si mettono in corrispondenza le altre grandezze termodinamiche

$$\beta p(\mu, \beta) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\Lambda} \log Q_\Lambda = -\beta [f + h + \frac{1}{2} \sum_{j: 0 \neq j} \phi_{0j}]$$

dove

$$f(h, \beta) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\Lambda} \log Z$$

Per la densità e la magnetizzazione si ha

$$\rho = \frac{1}{2} [1 - m]$$

Per la compressibilità e suscettività

$$K_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mu} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}; \quad \chi = \frac{\partial m}{\partial h} = T \frac{\partial^2 f}{\partial h^2}$$

2.5.1 Modello di Ising e ferromagnetismo

Il modello di Ising

$$H(\sigma) = -J \sum_{i \neq j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$

descrive un sistema di spin ferromagnetico nel caso $J > 0$, antiferromagnetico nel caso $J < 0$. Lo studio del comportamento dei materiali ferromagnetici viene affrontato in Meccanica Statistica mediante l'uso di tecniche matematiche che consentono di semplificare il problema e al tempo stesso comprendere qualitativamente i fenomeni fisici caratteristici. Il punto di partenza nello studio del ferromagnetismo consiste nell'osservare che gli atomi di un solido sono disposti con regolarità nei siti di un reticolo cristallino e che ciascuno di essi è dotato di un certo momento angolare (fondamentalmente lo spin, se gli atomi non si muovono troppo dalle posizioni di equilibrio). Il comportamento ferromagnetico è legato alla distribuzione degli spin. È allora possibile operare due semplificazioni indipendenti sul sistema. Da un lato si eliminano i gradi di libertà legati al moto orbitale degli atomi imponendo che essi si mantengano fermi nei siti del

reticolo cristallino. Dall'altro si riducono i gradi di libertà legati allo spin imponendo che questo possa assumere soltanto un numero finito di valori. Si ottiene così un *modello* del materiale ferromagnetico in studio.

Il modello di Ising è specificato dalla scelta del reticolo cristallino, dall'insieme dei valori consentiti allo spin, e della hamiltoniana che governa l'interazione tra i diversi spin. Si fanno dunque le seguenti assunzioni

1. il reticolo cristallino è costituito da un insieme Λ di punti appartenenti allo spazio \mathbb{Z}^d (d è il numero di dimensioni)
2. lo spin σ_i nel sito i può assumere soltanto i valori $\sigma_i = \pm 1$. In tal modo lo stato microscopico del sistema è completamente definito assegnando una configurazione $\sigma = \{\sigma_i\}_{i \in \Lambda}$, cioè una successione di spin su Λ . Il numero di configurazioni associate al modello è chiaramente $2^{|\Lambda|}$.
3. L'interazione è definita dalla hamiltoniana

$$H_\Lambda(\sigma) := - \sum_{i \in \Lambda} h_i \sigma_i - \sum_{i, j \in \Lambda: i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + W_\Lambda(\sigma)$$

Essa è definita dalla somma di tre termini. Il primo descrive l'interazione degli spin del sistema con un campo magnetico esterno h . Il secondo descrive l'interazione tra i diversi spin del sistema, specificata dalla matrice J_{ij} . Se risulta $J_{ij} > 0$ per ogni coppia $i, j \in \Lambda$ allora il modello descrive un ferromagnete, in quanto l'energia del sistema è minima quando tutti gli spin sono allineati. Nel caso $J_{ij} < 0$ per ogni $i, j \in \Lambda$ il modello descrive un sistema detto *antiferromagnetico*. Naturalmente sono ammesse situazioni miste. Il terzo termine descrive le condizioni al bordo (b.c.), cioè l'interazione degli spin che si trovano in $\partial\Lambda$ con eventuali spin che si trovano all'esterno di Λ .

La descrizione statistica del sistema come per i sistemi di particelle hamiltoniani è data in termini di distribuzione degli spin di tipo Gibbsiano. La funzione di partizione nell'ensemble canonico è

$$Z_\Lambda(\beta, h) := \sum_{\sigma} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)}$$

e da essa l'energia libera di Gibbs $f(\beta, h)$ e la magnetizzazione $m_j(\beta, h)$, definite dalle relazioni

$$f(\beta, h) := \lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_\Lambda(\beta, h)$$

$$m_j(\beta, h) := \lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} \frac{1}{Z_\Lambda(\beta, h)} \sum_{\sigma} \sigma_j e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)}$$

Il più semplice modello di Ising è noto come *modello a prossimi vicini e campo magnetico costante*. Esso è definito dalle condizioni

$$h_i = h \quad \forall i \in \Lambda \quad ; \quad J_{ij} = J \quad \text{se } |i - j| = 1, \quad 0 \quad \text{altrimenti}$$

Sotto queste assunzioni è possibile calcolare esattamente la funzione di partizione nel caso $d = 1$ ed il modello è detto esattamente risolubile. Nel caso $d = 2$ il modello è esattamente risolto soltanto per $h = 0$.

L'interesse suscitato dal modello di Ising è dovuto al fatto che esso consente una corretta descrizione qualitativa delle transizioni di fase ferromagnetiche.

2.6 Modello di Ising unidimensionale

Consideriamo un modello di Ising unidimensionale formato da N spin con Hamiltoniana (campo esterno zero)

$$H_N(\sigma) = -J \sum_{i=-N}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1}$$

Il modello ad una dimensione è esattamente risolubile, nel senso che è possibile ottenere esplicitamente l'energia libera come funzione della temperatura nel limite di volume infinito. Per calcolare l'energia libera, riscriviamo la funzione di partizione usando la relazione

$$\exp[\beta J \sigma_i \sigma_{i+1}] = \cosh \beta J + \sigma_i \sigma_{i+1} \sinh \beta J$$

Si ha

$$Z_N(\beta) = (\cosh \beta J)^{2N} \sum_{\underline{\sigma}} \prod_{i=-N}^{N-1} [1 + \sigma_i \sigma_{i+1} \tanh \beta J] \quad (2.6.1)$$

Sviluppando i prodotti si ottengono termini della forma

$$(\tanh \beta J)^K \sigma_{i_1} \sigma_{i_1+1} \sigma_{i_2} \sigma_{i_2+1} \cdots \sigma_{i_k} \sigma_{i_k+1} \quad (2.6.2)$$

$i_1 \cdots i_k$ è una k -pla di siti del reticolo. I termini del tipo (2.6.2) quando si somma sulle configurazioni si annullano tutti tranne il termine con $K = 0$ che è uguale ad 1. Si ha quindi per la funzione di partizione

$$Z_N(\beta) = 2^{2N+1} (\cosh \beta J)^{2N}$$

e per l'energia libera

$$f(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} f_N(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2N}{2N+1} \log(2 \cosh \beta J) = \log(2 \cosh \beta J)$$

L'energia libera è analitica in β e non c'è transizione di fase per β finito. Per calcolare la magnetizzazione $\langle \sigma_j \rangle$ nel sito j il conto è analogo, con la differenza che bisogna valutare invece di (2.6.2) le somme sulle configurazioni di

$$(\tanh \beta J)^K \sigma_j \sigma_{i_1} \sigma_{i_1+1} \sigma_{i_2} \sigma_{i_2+1} \cdots \sigma_{i_k} \sigma_{i_k+1} \quad (2.6.3)$$

che sono tutte nulle. Si ha quindi $\langle \sigma_j \rangle = 0$ per ogni j .

Consideriamo una differente misura a volume finito ottenuta fissando uguali a $+1$ tutti gli spin all'esterno della catena di N spin. Oltre agli usuali termini nell'Hamiltoniana appaiono anche due termini di interazione dello spin in $-N$ e dello spin nel sito N con l'esterno, che appaiono come termini di campo esterno sugli spin del contorno, cioè

$$-H_N(\sigma) = J \sum_{i=-N}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + J \sigma_{-N} + J \sigma_N$$

Rifacendo il conto precedente per l'energia libera danno contributo diverso da zero il termine per $K = 0$ e anche il termine per $K = N - 1$ in cui appaiono anche σ_{-N} e σ_N

$$(\tanh \beta J)^{2N+2} \underbrace{(\sigma_{-N-1} \sigma_{-N})}_{+1} (\sigma_1 \sigma_2) (\sigma_2 \sigma_3) \cdots (\sigma_{N-1} \sigma_N) (\sigma_N \underbrace{\sigma_{N+1}}_{+1}) = (\tanh \beta J)^{2N+2} \quad (2.6.4)$$

$$f(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} f_N(\beta)$$

$$\left[\frac{2N+2}{2N+1} \log(2 \cosh \beta J) + \frac{1}{2N+1} \log(1 + (\tan h \beta J)^{2N+2}) \right] = \log(2 \cosh \beta J) \quad (2.6.5)$$

Questo significa che l'energia libera associata alle due Hamiltoniane è la stessa perchè differiscono solo per termini di superficie che vanno a zero divisi per il volume.

Invece se si fa il calcolo per la magnetizzazione si vede che $m_j = \langle \sigma_j \rangle$ può risentire delle condizioni al contorno, ma solo a temperatura zero. Fissiamo per semplicità $j = 0$ (per la trasl-invarianza dell'Hamiltoniana $\langle \sigma_j \rangle = m$ è indipendente da j). Contribuiscono ad m_0 a volume finito i termini del tipo

$$(\tan h \beta J)^N \sigma_0 \sigma_1 \sigma_{j+1} \sigma_{j+2} \cdots \sigma_{N-1} \sigma_N \sigma_N \quad (2.6.6)$$

e

$$(\tan h \beta J)^N \sigma_{-N} \sigma_{-N+1} \sigma_{-N+2} \sigma_{-N+2} \sigma_{-N+3} \cdots \sigma_{-1} \sigma_0 \sigma_0 \quad (2.6.7)$$

si ha

$$\langle \sigma_j \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2(\tan h \beta J)^N}{1 + \tan h \beta J^{2N+2}}$$

che è uguale a zero se $\beta \neq \infty$ ed è uguale a 1 per $T = 0$. Se si rifà il calcolo fissando tutti gli spin esterni uguali a -1 si ottiene $m = -1$ per $T = 0$.

In conclusione ad una dimensione la transizione di fase appare solo a temperatura nulla. Ci sono piú stati di equilibrio, diversi perchè danno differenti valori ad m . Si ottengono come limite di volume infinito da misure di Gibbs a volume finito con differenti condizioni al contorno.

È importante studiare l'andamento delle funzioni di correlazione a due punti, per stabilire in quale misura gli spin del modello siano correlati. Consideriamo i siti k e $k+1$. Risulta

$$\langle \sigma_k \sigma_{k+1} \rangle_N(\beta) = \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\sigma} \sigma_k \sigma_{k+1} e^{\beta J \sum_{i=-N}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1}} \quad (2.6.8)$$

Per effettuare il calcolo della (2.6.8) introduciamo la seguente notazione. Definiamo legame (*bond*) una coppia di siti adiacenti:

$$b_i := (i, i+1) \quad , \quad (i, i+1) := (i+1, i) \quad (2.6.9)$$

La variabile di legame b_i è definita in modo naturale come

$$\sigma_{b_i} := \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (2.6.10)$$

In termini di variabili di legame la funzione di correlazione (2.6.8) può scriversi nella forma

$$\langle \sigma_k \sigma_{k+1} \rangle_N(\beta) = \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\sigma} \sigma_{b_k} e^{\beta J \sum_b \sigma_b} \quad (2.6.11)$$

Si osservi che assegnata la configurazione σ , sono automaticamente assegnati tutti i legami reticolari. Il viceversa non è vero: ad ogni configurazione di legami corrispondono due configurazioni di spin. Tuttavia, assegnato lo spin in un dato sito e tutti i legami anche la configurazione di spin risulta determinata. Ne segue che

$$\langle \sigma_k \sigma_{k+1} \rangle_N(\beta) = \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\sigma_0 = \pm 1} \sum_{\omega} \sigma_{b_k} \prod_b e^{\beta J \sigma_b} = \frac{2}{Z_N(\beta)} \sum_{\omega} \sigma_{b_k} \prod_b e^{\beta J \sigma_b} \quad (2.6.12)$$

dove

$$\omega := \left\{ \{ \sigma_{b_i} \} : i \in [-N + 1, N - 1] \right\} \quad (2.6.13)$$

è l'insieme delle configurazioni di legame. La misura ottenuta è una misura prodotto. L'espressione (2.6.12) si fattorizza nel prodotto di somme:

$$\langle \sigma_k \sigma_{k+1} \rangle_N (\beta) = \frac{\sum_{\sigma_{b_k} = \pm 1} \sigma_{b_k} e^{\beta J \sigma_{b_k}}}{\sum_{\sigma_{b_k} = \pm 1} e^{\beta J \sigma_{b_k}}} = \tanh(\beta J) \quad (2.6.14)$$

Per calcolare la funzione di correlazione a due punti i e j non adiacenti si osserva che

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} \dots \sigma_{j-1} \sigma_{j-1} \sigma_j = \prod_{k=i}^{j-1} \sigma_k \sigma_{k+1} \quad (2.6.15)$$

Poichè la misura di Ising espressa in termini delle variabili di legame è una misura prodotto, l'attesa del prodotto diventa il prodotto delle attese

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_N (\beta) = \langle \prod_{k=i}^{j-1} \sigma_{b_k} \rangle_N (\beta) = \prod_{k=i}^{j-1} \langle \sigma_{b_k} \rangle_N (\beta) = \tanh(\beta J)^{|j-i|} \quad (2.6.16)$$

Ne segue che

$$\forall \beta \geq 0 \quad \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_N (\beta) \rightarrow 0 \quad \text{per } |i - j| \rightarrow \infty \quad (2.6.17)$$

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_N (+\infty) = 1 \quad \forall i, j \quad (2.6.18)$$

La funzione di correlazione decade a zero con la distanza tra i siti tranne che a temperatura zero.

Osservazione 2.6.1. *Nel limite termodinamico i siti $-N - 1, N + 1$ si allontanano infinitamente, ed i modelli con b.c. \pm sono fisicamente identici a quello con b.c. libere. Quest'ultimo è simmetrico sotto la trasformazione di spin-flip, in quanto $H_N(\sigma) = H_N(-\sigma)$. Dunque ci si aspetterebbe che nel limite termodinamico le informazioni sulle b.c. siano perdute. Ciò è sempre vero per β finito. Invece a $T = 0$, cioè nello stato fondamentale, il modello esibisce rottura spontanea della simmetria, poichè sono possibili due valori $m_j = \pm 1$ per la magnetizzazione.*

2.7 Funzioni di correlazione.

Esiste una relazione generale che lega le funzioni di correlazione e l'energia libera. Definiamo le funzioni di correlazione connesse partendo da quella a due punti:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_C = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (2.7.1)$$

Le altre si definiscono ricorsivamente come

$$\langle \prod_{k=1}^n \sigma_k \rangle = \sum_P \prod_l \langle \prod_{i \in \Delta_l} \sigma_i \rangle_C \quad (2.7.2)$$

dove la somma è presa su tutte le partizioni degli n spin nei sottinsiemi Δ_l .

Se l'energia libera è analitica si possono costruire le funzioni di correlazione connesse come derivate di f . Per ispezione diretta, derivando il logaritmo della funzione di partizione a volume finito, si vede che

$$\beta \langle \sigma_i \rangle_\Lambda = \frac{\partial}{\partial h_i} \log Z_\Lambda(\beta, h)$$

dove h è un campo magnetico esterno $h = \{h_i\}_{i \in \mathbb{Z}^d}$. Analogamente si prova

$$\beta^2 \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda, C} = \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} \log Z_\Lambda(\beta, h)$$

In generale si ha che

$$\langle \prod_{k=1}^n \sigma_k \rangle_{\Lambda, C} = \frac{1}{\beta^n} \prod_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial h_k} \log Z_\Lambda(h) \quad (2.7.3)$$

Sviluppando $\log Z$ in serie di Taylor nel campo magnetico si ottiene

$$\log Z(\beta, h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\beta^k}{k!} \sum_{i_1} \cdots \sum_{i_k} \langle \sigma_{i_1} \cdots \sigma_{i_k} \rangle_C h_{i_1} \cdots h_{i_k}$$

Di conseguenza la funzione di partizione Z si può scrivere come l'esponenziale di una serie in cui appaiono solo le funzioni di correlazione connesse.

Nel caso omogeneo $h_i = h$, $i = 1 \dots N$, rifacendo il conto precedente si ottiene

$$\beta \sum_i \langle \sigma_i \rangle_\Lambda = \frac{\partial}{\partial h} \log Z_\Lambda(h)$$

$$m = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\Lambda} \sum_i \langle \sigma_i \rangle_\Lambda$$

si ha

$$\beta m = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\Lambda} \frac{\partial}{\partial h} \log Z(h) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial h} f_\Lambda(\beta, h)$$

Scambiando il limite con la derivata si ottiene la usuale relazione termodinamica. Se f non è analitica queste relazioni valgono solo a volume finito, perchè non si può più scambiare il limite con la derivata. Infatti quando c'è transizione di fase le funzioni di correlazioni possono dipendere dalle condizioni al contorno mentre l'energia libera è indipendente da esse.

Osserviamo che la energia libera può diventare non analitica (ad es. in h) solo a volume infinito. Infatti, la funzione di partizione si scrive come un polinomio in $z = e^{\beta h}$ con coefficienti positivi

$$Z(\beta, h) = \sum_{M=-M_{max}}^{-M_{max}} z^M \sum_{\sigma: \sum_i \sigma_i = M} e^{\beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j}$$

e quindi non può avere zeri sull'asse reale. Di conseguenza $\log Z_\Lambda$ è analitica in h per ogni volume finito e la transizione di fase può comparire solo nel limite termodinamico.

Da quello che abbiamo detto segue che anche alcune grandezze termodinamiche, quali energia interna, calore specifico e suscettività, essendo derivate dell'energia libera, si possono esprimere in termini delle funzioni di correlazione. Come esempio consideriamo la suscettività definita come

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 f}{\partial h^2}$$

dove stiamo considerando una Hamiltoniana trasl-invariante. Si ha

$$\begin{aligned}
\chi &= \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i \in \Lambda} \frac{\partial \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda}}{\partial h} = \beta \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i, j \in \Lambda} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_C \\
&= \beta \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \left[\sum_{j \in \Lambda} \langle \sigma_0 \sigma_j \rangle_C + 0 \left(\frac{1}{|\Lambda|} \right) \right]
\end{aligned} \tag{2.7.4}$$

dove la seconda eguaglianza è stata ottenuta usando la trasl-invarianza. Quindi nel limite di volume infinito

$$\chi = \beta \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} \langle \sigma_0 \sigma_j \rangle_C$$

Da questa relazione si vede anche che la suscettività può essere infinita quando la funzione a due punti connessa non decade abbastanza velocemente con la distanza. Ci si aspetta che la funzione di correlazione connessa decada esponenzialmente e per questo si introduce la lunghezza di correlazione ξ definita da

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_C \approx e^{-\frac{|i-j|}{\xi}}$$

La suscettività diverge se il decadimento non è esponenziale ma a potenza e questo comporta che ξ diventa infinita. Ma la divergenza di χ implica la divergenza della derivata seconda dell'energia libera rispetto ad h : si dice in tal caso che si è in presenza di una transizione di fase del secondo ordine. In conclusione, questa transizione di fase è caratterizzata a livello microscopico dalla divergenza della lunghezza di correlazione.

2.8 Argomento energia-entropia.

Un argomento euristico per capire se c'è la possibilità di una transizione di fase è basato su considerazioni di bilancio tra l'energia e l'entropia. Uno stato di equilibrio deve minimizzare l'energia libera $\psi = e - Ts(\rho, e)$ ($\psi = -\beta f$), cosa che avviene minimizzando l'energia e massimizzando l'entropia in modo che ad una fissata temperatura l'energia libera è minima. Ad esempio a temperatura zero lo stato che rende minima l'energia libera è quello che rende minima l'energia (tutti gli spin allineati), e in questo caso l'entropia è minima (minimo disordine). Aumentando la temperatura si potranno realizzare anche configurazioni diverse da questa, con degli spin non allineati, cioè dei legami avranno valore -1 . Consideriamo il caso del modello di Ising unidimensionale in campo esterno nullo. Per vedere quali sono gli insiemi di configurazioni più probabili al variare della temperatura confrontiamo due gruppi corrispondenti a diverse energie e valutiamo la differenza in energia libera:

- A) le configurazioni di una catena di N spin tali che gli spin sono allineati
- B) le configurazioni tali che un solo legame ha valore -1 .

La probabilità di un gruppo di configurazioni Ω_A è data da

$$\frac{1}{Z} \sum_{\sigma \in \Omega_A} \exp -\beta H(\sigma)$$

Per grandi N il numeratore ha l'andamento asintotico

$$\exp -N\beta\psi(A)$$

dove $\psi(A)$ è l'energia libera associata all'insieme Ω_A definita come

$$\psi(A) = -\beta \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \sum_{\sigma \in \Omega_A} \exp -\beta H(\sigma)$$

Il rapporto tra le probabilità di Ω_A e Ω_B ha quindi l'andamento asintotico

$$\exp -N\beta(\psi(A) - \psi(B))$$

che è minore (maggiore) di 1 se $\psi(A) - \psi(B)$ è positiva (negativa). Si ha che $N\psi(A) = -J(N-1) - T \log 2$ e $N\psi(B) = -J(N-3) + 2J - T \log 2N$. La differenza in energia passando da A) a B) è $-4J$ e la differenza in entropia è $\log N$ e quindi la differenza in energia libera è

$$N\psi(A) - N\psi(B) = -4J + T \log N$$

che è positiva per N grande e $T \neq 0$ e quindi l'insieme Ω_B ha probabilità più grande e il sistema favorisce queste configurazioni più disordinate all'aumentare della temperatura. Siccome ψ non cambia più segno al variare di T vuol dire che non c'è un gruppo di configurazioni disordinate preferite e non c'è una transizione ordine-disordine (tranne che a $T = 0$).

Nel caso del modello bidimensionale lo stesso argomento dà risposte differenti. Scegliamo come gruppo A) lo stesso di prima e come gruppo B) le configurazioni tali che esiste una linea chiusa che circonda l'origine di lunghezza K che separa una regione di spin + da una di spin -. La variazione di energia è $-2KJ$. La variazione di entropia è più difficile da valutare e possiamo solo stimarla. Dobbiamo valutare il numero di modi in cui si può disegnare una linea chiusa di lunghezza K , per ognuno di essi ci sono due configurazioni possibili (spin positivi dentro o fuori). Questo numero si stima dicendo che se partendo da un punto si comincia a tracciare una linea si hanno $2d-1$ possibilità per disegnare il primo segmento. Quindi per tracciare una linea lunga K ci sono $(2d-1)^K$ modi. Il punto di partenza a sua volta può essere preso in circa $K(d-1)$ modi (stima dell'area del circuito chiuso). In definitiva la differenza di entropia è stimata da $K(d-1)(2d-1)^K$ e la differenza di energia libera è

$$N[\psi(A) - \psi(B)] = -2KJ + TK \log(2d-1).$$

Di conseguenza, per temperature minori di $2j/\log(2d-1)$ la variazione di energia libera è negativa e le configurazioni ordinate sono favorite, mentre per temperature maggiori il sistema preferisce uno stato disordinato. Dobbiamo perciò aspettarci una transizione ordine-disordine guidata dalla temperatura.

Capitolo 3

Misure di Probabilità a Volume Infinito

L'analisi del modello di Ising unidimensionale mostra che nel limite di volume infinito, a temperatura zero, la media della magnetizzazione ha valori diversi quando calcolata usando misure di Gibbs a volume finito che differiscono per le condizioni al contorno. Questo significa che le corrispondenti misure di probabilità a volume infinito sono diverse. Finora è stato esaminato solo il limite di volume infinito per i potenziali termodinamici, ma ora vogliamo informazioni anche sui valori medi delle osservabili in questo limite e in generale serve capire che cosa si intende per misure di probabilità a volume infinito. A questo fine occorre dare una nozione di convergenza per le misure. Cominciamo con l'introdurre nello spazio delle configurazioni Ω una topologia. Consideriamo solo gas reticolari con al più una particella per sito, quindi una configurazione $\omega \in \Omega$ è $\omega \equiv \underline{\tau}$, $\tau = 0, 1$ o $\omega \equiv \underline{\sigma}$, $\sigma = \pm 1$ nel linguaggio di spin. Una configurazione può anche essere descritta da un sottinsieme del reticolo, considerato ad es. come l'insieme dei siti occupati. Sia $X \in \mathbb{Z}^d$ una configurazione del sistema; diciamo che X_n converge a X se e solo se per ogni Λ in \mathbb{Z}^d si ha che $X_n \cap \Lambda = X \cap \Lambda$ per n grande. Lo spazio topologico che così è costruito è compatto.

Questa nozione di convergenza corrisponde alla topologia prodotto: poichè Ω è un insieme prodotto degli insiemi $\{0, 1\}$ è dotato di una topologia naturale, la topologia prodotto delle topologie discrete su $\{0, 1\}$ (0 e 1 sono insiemi aperti). La base di aperti nella topologia prodotta è data dagli insiemi:

fissata una configurazione $\bar{\omega}_X$ per i siti in $X \subset \mathbb{Z}^d$, A_X è detto insieme cilindrico di base X

$$A_X = \{\omega \in \Omega : \omega|_X = \bar{\omega}_X\}$$

dove $\omega|_X$ è la configurazione ristretta ai siti in X .

Tale topologia è metrizzabile in termini della metrica d definita da

$$d(\omega_i, \omega_j) = \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \frac{1}{2^{|x|}} d_x(\omega_i, \omega_j)$$

con $d_x(\omega_i, \omega_j) = 1$ se $\omega_i(x) \neq \omega_j(x)$ ed è zero altrimenti. Quindi $d(\omega_i, \omega_j) = \frac{1}{2^{|x|}}$ se le due configurazioni coincidono in un cubo di centro l'origine e lato $|x|$ e sono diverse (diverse significa che ci sono dei siti in cui non coincidono) al di fuori.

Compattezza

Per il teorema di Tychonoff lo spazio topologico Ω è compatto.

Una funzione che dipende solo dal valore della configurazione in Λ è detta cilindrica di base Λ . Si vede facilmente che le funzioni cilindriche sono continue, cioè $f(X_n) \rightarrow f(X)$ per $X_n \rightarrow X$.

Le funzioni cilindriche formano un'algebra che contiene l'identità e separa i punti quindi per il teorema di Stone-Weierstrass sono dense nello spazio delle funzioni continue su Ω .

Per il teorema di rappresentazione di Riesz, le misure di probabilità su Ω sono in corrispondenza biunivoca con i funzionali lineari positivi normalizzati sullo spazio delle funzioni continue su Ω , la corrispondenza è definita associando alla misura μ il funzionale valore di aspettazione $\int f d\mu$. In questo modo lo stato di equilibrio di un sistema è rappresentato dal funzionale valore medio.

Se siamo interessati ad avere informazioni solo in un volume finito, possiamo indurre dalla misura a volume infinito μ misure a volume finito nel seguente modo

$$\mu_\Lambda(X) \equiv \mu(Y \in \mathbb{Z}^d : \Lambda \cap Y = X), \quad X \in \Lambda$$

Altrimenti detto, μ_Λ , la proiezione di μ su un volume finito, assegna ad una configurazione $X \in \Lambda$ la misura dell'insieme delle configurazioni che su Λ coincidono con X . Si ha anche $\langle f \rangle_\mu = \langle f \rangle_{\mu_\Lambda}$ per una f cilindrica di base Λ . La famiglia di misure μ_Λ è una famiglia consistente, cioè

$$\mu_{\Lambda'}(X) \equiv \mu(Y \in \Lambda : \Lambda' \cap Y = X), \quad X \in \Lambda'$$

per $\Lambda' \subset \Lambda$.

Osservazione. Le misure di Gibbs con condizioni al contorno a volume finito non sono una famiglia consistente di misure.

Data una successione di misure μ_n diciamo che μ_n converge a μ se per ogni funzione cilindrica $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\mu_n} = \langle f \rangle_\mu$.

La topologia sullo spazio delle misure a volume infinito indotta da questa nozione di convergenza si chiama topologia debole* (o vaga). L'insieme delle misure coincide con la sfera unitaria nello spazio duale dello spazio di Banach delle funzioni continue su un compatto cioè lo spazio dei funzionali lineari positivi. Per il teorema di Banach-Alaoglu tale sfera unitaria è compatta nella topologia debole*. L'insieme delle misure di probabilità è compatto in questa topologia. Quindi una qualunque successione di misure di probabilità ammette un'estratta convergente.

Sia μ_Λ una misura di Gibbs a volume finito Λ , ad esempio la misura canonica associata ad una Hamiltoniana $H = \sum_{(i,j)} \phi(|i-j|) \tau_i \tau_j$

$$\mu_\Lambda(X) = (Z_\Lambda)^{-1} \exp[-\beta H_\Lambda(X)]$$

Sia Λ_n una successione di volumi e μ_{Λ_n} la successione di misure. Per quanto detto sopra il limite $\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_{\Lambda_n}$ esiste sempre per sottosuccessioni e definisce una misura a volume infinito. Un'altra misura a volume infinito può essere costruita fissando una condizione al contorno, cioè fissando la configurazione fuori di Λ a essere uguale ad Y , $Y \in \Lambda^c$, dove Λ^c è il complemento di Λ . Se l'interazione è a range finito, la condizione al contorno appare come un termine di campo esterno h sugli spin che sono sul bordo di Λ . Il bordo $\partial\Lambda$ è per definizione l'insieme dei siti di Λ interagenti con i siti esterni a Λ . La misura a volume finito è

$$\mu_\Lambda^Y = (Z_\Lambda)^{-1} \sum_{\tau \in \Lambda} \exp[-\beta \sum_{(i,j) \in \Lambda} \phi(|i-j|) \tau_i \tau_j + \sum_{i \in \partial\Lambda} h_i(Y) \tau_i]$$

Per ogni fissata condizione al contorno Y si ottiene così prendendo il limite termodinamico una misura a volume infinito. Si pone il problema di vedere qual'è la relazione tra queste misure che in principio possono essere diverse l'una dall'altra, cioè ci serve un modo per caratterizzare l'insieme delle misure a volume infinito che corrispondono a stati di equilibrio del sistema. Caratterizzeremo gli stati di equilibrio come soluzioni di un set di equazioni lineari nelle misure di probabilità dette DLR (Dobrushin-Lanford-Ruelle).

3.1 Equazioni DLR

Il punto di partenza è un'identità basata sulla nozione di probabilità condizionata. Sia $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ e μ_Λ la misura di Gibbs a volume finito. Sia X una configurazione in (sottoinsieme di) $M \subset \Lambda$ e Y una configurazione in (sottoinsieme di) Λ/M e A_X il sottoinsieme di configurazioni in Λ coincidenti con X in M e B_Y definito in modo analogo

$$A_X = \{Z \subset \mathbb{Z}^d : Z \cap M = X\}, \quad B_Y = \{Z \subset \mathbb{Z}^d : Z \cap M/\Lambda = Y\}$$

Vale l'identità

$$\mu_\Lambda(A_X) = \sum_{Y \subset \Lambda/M} \mu_\Lambda(A_X|B_Y)\mu_\Lambda(B_Y)$$

Valutiamo $\mu_\Lambda(A_X|B_Y)$. Posto $\beta H_\Lambda(Z) = U(Z)$ dividiamo l'energia in Λ in tre parti: l'energia relativa a M quella relativa a Λ/M e quella relativa all'interazione tra siti in M e quelli in Λ/M . Per $Z = X \cup Y$ si ha

$$U(Z) = U(X) + U(Y) + W(X|Y)$$

Ad esempio nel modello di ising

$$J\beta \sum_{(i,j) \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j = J\beta \left[\sum_{(i,j) \in M} \sigma_i \sigma_j + \sum_{(i,j) \in \Lambda/M} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i \in M, j \in \Lambda/M: |i-j|=1} \sigma_i \sigma_j \right]$$

Per definizione di probabilità condizionata si ha

$$\begin{aligned} \mu_\Lambda(A_X|B_Y) &= \frac{\mu_\Lambda(A_X \cap B_Y)}{\mu_\Lambda(B_Y)} \\ &= \frac{\exp -[U(X) + U(Y) + W(X|Y)]}{\sum_{R \in M} \exp -[U(R) + U(Y) + W(R|Y)]} \\ &= \frac{\exp -[U(X) + W(X|Y)]}{\sum_{R \in M} \exp -[U(R) + W(R|Y)]} \equiv q_\Lambda(X|Y) \end{aligned}$$

Osserviamo che se il potenziale è a range finito il limite per $\Lambda \rightarrow \infty$ di $q_\Lambda(X|Y)$ esiste finito (e lo indichiamo con $q(X|Y)$). Infatti la dipendenza da Λ è solo nei termini $W(X|Y)$ e $W(R|Y)$ che sono finiti se c'è range finito perchè solo i siti in Λ/M che sono a distanza da M pari al range danno contributo. Indichiamo con M_e i siti in Λ/M che interagiscono con i siti in M . Chiamiamo $q(X|Y)$ probabilità condizionali (a volume infinito).

$$\mu_\Lambda(A_X) = \sum_{Y \in M_e} q_\Lambda(X|Y)\mu_\Lambda(B_Y)$$

Passando al limite $\Lambda \rightarrow \infty$

$$\mu(A_X) = \sum_{Y \in M_e} q(X|Y)\mu(B_Y) \tag{3.1.1}$$

Definiamo misure DLR relativi ad una Hamiltoniana H le misure a volume infinito le cui probabilità condizionali sono date da q .

Mostriamo che esistono altre misure a volume finito diverse dalla gran-canonica che hanno le stesse probabilità condizionali a volume infinito. Data la misura gran-canonica in Λ consideriamo la misura condizionata $\mu_\Lambda(\cdot|Z)$ con $Z \subset M_e$ e $\Lambda = M \cup M_e$. Detta X una configurazione in M si ha

$$\mu_\Lambda(A_X|Z) = \frac{\exp -[U(X) + W(X|Z)]}{\sum_{R \in M_e} \exp -[U(R) + W(R|Z)]}$$

Si è così ottenuta una misura su M , $\mu_M^Z(\cdot)$, con un termine di campo esterno $W(X|Z)$ sui siti del bordo di M (il bordo ha uno spessore pari al range del potenziale). Costruiamo ora le $q(X|Y)$ per queste misure.

Chiamiamo $X \subset D \subset M$, $Z \subset M_e$ e $Y \subset M/D$ gli insiemi in figura

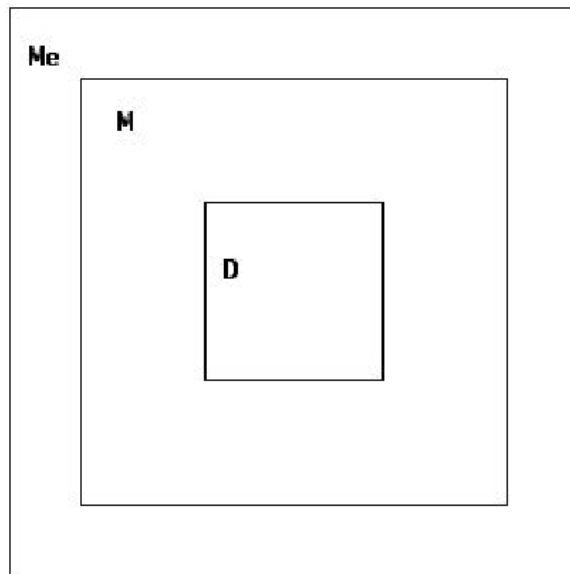


Figura 3.1

Allora

$$\begin{aligned} \mu_M^Z(A_X|B_Y) &= \frac{\mu_\Lambda(A_X \cap C_Z \cap B_Y)}{\mu_\Lambda(C_Z \cap B_Y)} \\ &= \frac{\exp -[U(X) + U(Y) + W(X|Y) + W(X|Z)]}{\sum_{R \in D} \exp -[U(R) + U(Y) + W(R|Y) + W(R|Z)]} \\ &= \frac{\exp -[U(X) + W(X|Y)]}{\sum_{R \in D} \exp -[U(R) + W(R|Y)]} \equiv q_\Lambda(X|Y) \end{aligned}$$

se Λ è sufficientemente grande in modo che la distanza tra i siti in D e quelli in M/D è maggiore del range del potenziale.

Passando al limite $M \rightarrow \infty$ si vede che le $q(X|Y)$ per le misure condizionate coincidono con quelle della misura gran-canonica. La domanda naturale è se anche le misure coincidono nel limite. Tutte le misure ottenute come limite dalle misure condizionali a volume finito verificano le stesse relazioni.

Le relazioni (3.1.1) al variare di M, X, Y possono essere viste come un insieme di infinite equazioni nelle misure di probabilità, nel senso che assegnati le probabilità condizionate $q(X|Y)$ si cerca la misura che soddisfi le relazioni (3.1.1).

Le probabilità condizionali sono determinate da una Hamiltoniana includendo anche i parametri β e μ , cioè $H(\beta, \mu, \tau) = \sum_i \tau_i \mu \beta + \beta \sum_{i,j} \phi_{ij} \tau_i \tau_j$ e quindi le misure soluzioni delle DLR sono associate a questa Hamiltoniana. Chiameremo stati di Gibbs tali soluzioni.

Poichè le equazioni DLR sono lineari una misura combinazione lineare di misure soluzioni è a sua volta una soluzione. In particolare devono essere combinazioni lineari convesse perchè siamo interessati a misure di probabilità (condizione di normalizzazione). Inoltre una misura limite di misure di Gibbs è una misura di Gibbs. Riassumendo tutte le combinazioni convesse e i limiti di misure di Gibbs sono misure di Gibbs. Infine per costruzione le misure ottenute come limite termodinamico da misure a volume finito (come spiegato prima) sono misure di Gibbs. Il seguente teorema ci dice come sono fatti gli stati di Gibbs.

Teorema 3.1.1. *L'insieme di tutti gli stati di Gibbs (per una data Hamiltoniana) è la sfera convessa e chiusa nella topologia debole* delle misure ottenute come limite di volume infinito delle misure di probabilità di volume finito della forma $\mu_\Lambda^Y, Y \in \mathbb{Z}^d/M$.*

Inoltre si ha che la proiezione su un volume finito M di una misura μ DLR si può rappresentare come una combinazione lineare delle misure condizionate $(\mu)_M^Y$ con pesi $\mu(Y)$. Infatti per μ soluzione delle DLR e f cilindrica di base M si ha

$$\langle f \rangle_{\mu_1} = \sum_X f(X) \mu_1(X) = \sum_X f(X) \sum_{Y \in M_e} q(X|Y) \mu(Y) \quad (3.1.2)$$

Interpretando $q(X|Y)$, $X \subset M$, come la misura μ in M condizionata ad Y : $q(X|Y) = (\mu)_M^Y(X)$, si ha

$$\langle f \rangle_{\mu_1} = \sum_{Y \in M_e} \mu(Y) \langle f \rangle_{\mu_1^Y}$$

Le equazioni DLR possono avere anche più di una soluzione. Esaminiamo le conseguenze della non-unicità. Supponiamo che esistono due misure μ_1 e μ_2 diverse, cioè esiste qualche osservabile cilindrica f di base M ad esempio per cui si ha

$$\langle f \rangle_{\mu_1} \geq 1, \quad \langle f \rangle_{\mu_2} \leq 0 \quad (3.1.3)$$

Si può provare che per ogni Λ che contiene M esistono Y_1 e Y_2 tali che

$$\langle f \rangle_{\mu_1^{Y_1}} \geq 1, \quad \langle f \rangle_{\mu_2^{Y_2}} \leq 0 \quad (3.1.4)$$

Infatti da (3.1.3) e (3.1.2) si ha che esistono Y_1 e Y_2 tali che la (3.1.4) vale.

Questo risultato dice che le condizioni al contorno determinano un cambiamento della attesa di un'osservabile locale. Il valore medio di tale osservabile localizzata ad esempio in una regione intorno all'origine risente dell'effetto del campo esterno sul contorno comunque lontano sia il contorno, come accade nel modello di Ising $d = 1$ per la magnetizzazione a $T = 0$.

3.2 Misure trasl-invarianti e principio variazionale.

Consideriamo una particolare classe di misure, le misure trasl-invarianti.

Sia T_x , $x \in \mathbb{Z}^d$ il gruppo delle traslazioni discrete sul reticolo. Una misura di probabilità su Ω è detta invariante per traslazione se $\mu(T_x A) = \mu(A)$ per ogni insieme di configurazioni di Ω .

Esempio di misura non trasl-invariante. Consideriamo una misura di probabilità che sia concentrata sulla seguente configurazione: tutti gli spin nel semispazio positivo del reticolo sono positivi e nell'altra metà sono negativi. L'insieme delle configurazioni che danno valore 1 nel punto x ha valore 1 se x è nel semispazio positivo e 0 se x è nel semispazio negativo.

Consideriamo l'insieme delle misure di probabilità trasl-invarianti. Introduciamo un funzionale energia libera su questo insieme e faremo vedere che gli stati di equilibrio del sistema sono descritti dalle misure di probabilità che minimizzano questo funzionale.

Funzionale entropia

Definiamo l'entropia di una misura di probabilità su Ω in termini del limite delle entropie delle proiezioni di μ come

$$s(\mu) \equiv - \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\Lambda} \langle \log \mu_\Lambda \rangle_{\mu_\Lambda}$$

Funzionale energia

Per semplicità consideriamo gas reticolari con al più una particella per sito. L'energia in un volume finito per unità di volume associato ad un potenziale ϕ è $U/\Lambda = \frac{1}{2\Lambda} \sum_{i,j \in \Lambda} \phi(|i-j|) n_i n_j$. Poiché il potenziale dipende dalla distanza tra i punti, possiamo riscrivere $U/\Lambda = \sum_{x,k} \phi(k) n_{T_x 0} n_{T_x k}$. Il valore medio rispetto ad una misura trasl-invariante, nel limite di volume infinito, è dato da

$$\langle \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \phi(k) n_0 n_k \rangle$$

e la somma su x diviso il volume scompare nel limite.

Definiamo energia della misura μ il funzionale

$$e(\mu) \equiv \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \phi(k) \langle n_0 n_k \rangle_\mu.$$

Se il potenziale è a range finito, si avrà solo la somma su un numero finito di termini, tutti i siti che interagiscono con l'origine.

Dato un potenziale ϕ , indichiamo il funzionale energia $e(\mu, \phi)$. Inoltre sia ϕ_N un potenziale tale che $\sum \phi_N = N$, (potenziale chimico), allora $e(\mu, \phi_N) = \rho$, dove ρ è la densità.

Principio variazionale

Il principio variazionale per l'entropia è dato sotto senza dimostrazione. Qui è dato un argomento a volume finito ma grande. Consideriamo delle misure di probabilità a volume finito con densità g_Λ rispetto alla misura di Lebesgue, cioè tale che, per ogni osservabile f , $\int d\mu_\Lambda f = \int dx g_\Lambda(x) f(x)$. Queste misure devono essere tali che, fissata una Hamiltoniana H ,

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int d\mu_\Lambda \frac{H_\Lambda}{\Lambda} = e, \quad \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int d\mu_\Lambda \frac{N_\Lambda}{\Lambda} = \rho$$

per fissate energia e densità e, ρ . Sia infine \bar{g}_Λ la densità della misura canonica trasl-invariante a volume finito di parametri termodinamici ρ e β , tale che il suo limite di volume infinito è la misura corrispondente ad energia e e densità ρ . Si ha che

Teorema 3.2.1. *Sia $s(g_\Lambda)$ l'entropia di g_Λ a volume finito, $s(g_\Lambda) = -\frac{1}{\Lambda} \int_\Lambda g_\Lambda(x) \log g_\Lambda(x)$. Allora prendendo g_Λ nella classe delle misure descritte prima si ha*

$$s(g_\Lambda) \leq s(\bar{g}_\Lambda) + o\left(\frac{1}{\Lambda}\right)$$

e la disuguaglianza è stretta per $g_\Lambda \neq \bar{g}_\Lambda$.

Consideriamo l'entropia

$$s(g_\Lambda) = -\frac{1}{\Lambda} \int dx g_\Lambda(x) \log g_\Lambda(x) = -\frac{1}{\Lambda} \int dx g_\Lambda \log \frac{g_\Lambda}{\bar{g}_\Lambda} - \frac{1}{\Lambda} \int dx g_\Lambda \log \bar{g}_\Lambda$$

Il primo termine è l'opposto dell'entropia relativa di g_Λ rispetto a \bar{g}_Λ e si indica con $s(g_\Lambda|\bar{g}_\Lambda)$. Il secondo diventa

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\Lambda} \int dx g_\Lambda \log \bar{g}_\Lambda &= \int dx g_\Lambda \left[\beta \frac{1}{\Lambda} H_\Lambda + \frac{1}{\Lambda} \log Z \right] \\ &= \beta e + f(\beta, \rho) + 0\left(\frac{1}{\Lambda}\right) = s(e, \rho) + 0\left(\frac{1}{\Lambda}\right) \end{aligned}$$

dove f è l'energia libera a volume infinito. Notiamo che $s(\bar{g}) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} s(\bar{g}_\Lambda) = s(e, \rho)$.

$$s(g_\Lambda|\bar{g}_\Lambda) = \int dx \bar{g}_\Lambda \left[\frac{g_\Lambda}{\bar{g}_\Lambda} \log \frac{g_\Lambda}{\bar{g}_\Lambda} - \frac{g_\Lambda}{\bar{g}_\Lambda} + 1 \right]$$

dove è stato usato che g_Λ e \bar{g}_Λ hanno integrale 1.

La funzione $x \log x - x + 1 > 0$ ed è zero se e solo se $x = 1$. Quindi $s(g_\Lambda|\bar{g}_\Lambda) \geq 0$ per ogni Λ e la disuguaglianza è vera anche nel limite

$$s(g) \leq s(\bar{g})$$

Notare che l'uguaglianza si ha solo per $g = \bar{g}$.

Quello che segue è un principio variazionale che seleziona tra tutte le misure di probabilità le misure di Gibbs come quelle che rendono massima l'entropia.

Teorema 3.2.2. *Fissato un potenziale ϕ , sia \mathcal{G} la classe di misure di probabilità a volume infinito (tali cioè che $\int d\mu = 1$) trasl-invarianti tali che $e(\mu, \phi) = x$, $e(\mu, \phi_N) = y$. Allora*

$$\sup_{\mu \in \mathcal{G}} s(\mu) = s(x, y)$$

Questo principio variazionale seleziona la misura canonica fra tutte le misure trasl-invarianti con fissato valore dell'energia e della densità come quella che massimizza l'entropia. Inoltre il principio variazionale permette di caratterizzare tutti gli stati di equilibrio invarianti come gli stati di massima entropia consistente con fissata densità media e energia media.

Osservazione: Esiste un analogo teorema basato sulla massimizzazione del funzionale pressione: $p(\mu) = s(\mu) - \beta e(\mu, \Phi)$, $\Phi = (\phi, \phi_N)$.

Teorema 3.2.3. *Il funzionale $p(\mu)$ è dotato di massimo e il suo massimo coincide con la pressione a volume infinito (moltiplicata per β , $\beta p(z, \beta)$).*

Notare che la dipendenza di $p(\mu)$ dalla attività è nel potenziale ϕ_N .

L'insieme di questi stati è descritto nel seguente teorema.

Teorema 3.2.4. *L'insieme degli stati di equilibrio per un dato potenziale Φ coincide con l'insieme delle misure DLR (per quell'Hamiltoniana) trasl-invarianti.*

Siccome l'insieme degli stati di equilibrio invarianti è convesso, ci sono degli stati estremali. Si ricorda che un insieme convesso A è per definizione tale che per ogni elemento $a \in A$ esistono due elementi $b, c \in A$ e $\alpha \in [0, 1]$ tali che $a = \alpha b + (1 - \alpha)c$. Un elemento estremo a è tale che non esistono due elementi $b, c \in A$ e $\alpha \neq 0, 1$: $a = \alpha b + (1 - \alpha)c$. Questi stati estremali sono importanti e risultano coincidere con gli stati puri (contrapposti agli stati miscela). Infatti fissata una misura dell'insieme si considera il sistema dinamico (Ω, T, μ) costituito dallo spazio delle configurazioni a volume infinito, dal gruppo delle traslazioni T , dalla misura μ (che è invariante per traslazione). Diremo ergodica una misura trasl-invariante se l'associato sistema dinamico è ergodico.

Teorema 3.2.5. *Uno stato trasl-invariante è estremo se e solo se è ergodico.*

Dimostrazione. Proviamo prima che l'ergodicità implica l'estremalità. Per assurdo supponiamo che μ non sia estremo. Allora esistono due misure μ_1 e μ_2 tali che

$$\mu = \alpha\mu_1 + (1 - \alpha)\mu_2$$

con $\alpha \neq 0, 1$. Poiché le due misure sono diverse esisterà un sottinsieme invariante, X , dello spazio delle configurazioni, tale che $\mu_1(X) = c_1 \neq \mu_2(X) = c_2$. Ma allora $\mu(X) = \alpha c_1 + (1 - \alpha)c_2 \neq 0, 1$. Questo è contro l'ipotesi perché μ è ergodica. Notare che esiste sempre un X invariante che distingue le due misure. Infatti, esiste un Y , in genere non-invariante, tale che $\mu_1(Y) \neq \mu_2(Y)$. Dato Y non-invariante, si costruisce un insieme invariante mediando sulle traslazioni.

Viceversa, per provare che uno stato estremo è ergodico, supponiamo per assurdo che non è ergodico. È quindi possibile trovare un insieme invariante X tale che $\mu(X) = \alpha \neq 0, 1$. Dato un insieme A scriviamo la sua misura come

$$\mu(A) = \mu(A \cap X) + \mu(A \cap X^c) = \alpha\mu(A|X) + (1 - \alpha)\mu(A|X^c)$$

dove X^c è l'insieme complementare di X ed ha misura $1 - \alpha$. Osserviamo ora che $\mu(\cdot|X)$ e $\mu(\cdot|X^c)$ definiscono due misure sullo spazio delle configurazioni, trasl-invarianti perché costruite attraverso condizionamenti ad insiemi trasl-invarianti. Abbiamo così scritto la misura μ come combinazione convessa di due misure di equilibrio (perché ottenute attraverso condizionamenti da una misura di equilibrio) diverse con coefficiente $\alpha \neq 0, 1$, e questo contraddice l'ipotesi. \square

Uno stato estremo corrisponde ad uno stato puro ed uno stato non-estremo ad una miscela. Costruiamo, data una osservabile f , una osservabile invariante per traslazione in Λ prendendo la media sulle traslazioni di f : $\hat{f}_\Lambda(x) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{a \in \Lambda} f(\tau_a x)$. Questa è un'osservabile intensiva. La sua fluttuazione rispetto ad una misura μ estremo,

$$\langle \hat{f}_\Lambda(x)^2 \rangle_\mu - \langle \hat{f}_\Lambda(x) \rangle_\mu^2$$

tende a zero per Λ che tende all'infinito. Infatti per la trasl-invarianza della misura μ si ha

$$\langle \hat{f}_\Lambda(x)^2 \rangle_\mu = \frac{1}{|\Lambda|} \int \sum_{a \in \Lambda} f(\tau_a x) f(x) d\mu + o\left(\frac{1}{|\Lambda|}\right)$$

Per l'ergodicità si ha

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \int \sum_{a \in \Lambda} f(\tau_a x) f(x) d\mu = \left[\int f(x) d\mu \right]^2 = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \langle \hat{f}_\Lambda(x) \rangle_\mu^2$$

dove l'ultima eguaglianza è vera di nuovo per la trasl-invarianza di μ . In conclusione in uno stato ergodico la fluttuazione di una generica osservabile intensiva va a zero nel limite termodinamico, che è esattamente quello che deve succedere in una fase pura. In una miscela, ad esempio di liquido e gas, invece la densità media dipende dalla configurazione. In tale situazione la legge dei grandi numeri non è più valida. Se una misura μ è sovrapposizione convessa di altre due μ_1 e μ_2 , $\mu = \alpha\mu_1 + (1 - \alpha)\mu_2$, si ha che una osservabile intensiva $\hat{f}_\Lambda(x) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{a \in \Lambda} f(\tau_a x)$ non tende più ad una variabile certa, ma ad una variabile stocastica che assume valore $\langle \hat{f}_\Lambda(x) \rangle_{\mu_1}$ con probabilità α e valore $\langle \hat{f}_\Lambda(x) \rangle_{\mu_2}$ con probabilità $1 - \alpha$

In realtà si dimostra di più sugli stati estremali: vale una proprietà cosiddetta di clustering, che è una proprietà di decadimento delle funzioni di correlazioni. Usando per semplicità le variabili di spin, siano A e B due insiemi di spin sul reticolo e $\sigma_A = \prod_{i \in A} \sigma_i$, $\sigma_B = \prod_{i \in B} \sigma_i$. Si ha clustering se

$$\lim_{d(A,B) \rightarrow \infty} \langle \sigma_A \sigma_B \rangle = \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle$$

In altri termini si ha clustering se allontanando un insieme da un altro le correlazioni decadono. Si può riformulare questa proprietà in termini della nozione di mixing per il sistema dinamico formato dalla misura (che è invariante per traslazione), dallo spazio delle configurazioni, dal gruppo delle traslazioni T . Fissato l'insieme A si allontana B da A usando il gruppo delle traslazioni.

Riassumendo, lo studio degli stati di equilibrio a volume infinito permette di dare una descrizione microscopica delle transizioni di fase del primo ordine. Abbiamo così due definizioni di transizione di fase:

Definizione termodinamica (non analiticità dell'energia libera)

Diciamo che il modello esibisce una transizione di fase del primo ordine ai parametri termodinamici (β_c, h_c) se l'energia libera $f(\beta, h)$ ha una derivata prima discontinua per tale valore dei parametri.

Definizione microscopica (instabilità rispetto alle condizioni al bordo)

Diciamo che il modello esibisce una transizione di fase ai parametri termodinamici (β_c, h_c) se esistono due differenti b.c. W'_Λ e W''_Λ tali che, per ogni $i \in \mathbb{Z}^d$, risulti

$$\lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle'_{\Lambda}(\beta_c, h_c) \neq \lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle''_{\Lambda}(\beta_c, h_c)$$

Il significato della definizione data è chiaro: se la magnetizzazione a volume infinito dipende ai parametri termodinamici (β, h) dalle b.c., significa che per tali valori dei parametri il modello è influenzato pesantemente dalle condizioni esterne, nonostante queste esercitino la loro azione soltanto sul bordo della regione occupata dagli spin.

Nel caso del modello di Ising è stato dimostrato da Lebowitz, Martin-Loef (1972) che le due definizioni sono equivalenti.

Capitolo 4

Teoria di Campo Medio per il Modello di Ising

4.1 Formulazione variazionale

La teoria di campo medio è una teoria approssimata per lo studio delle transizioni di fase nel modello di Ising. Poichè in $d = 1$ il modello è esattamente risolubile per qualunque valore del campo magnetico esterno¹ ed in $d = 2$ il modello è esattamente risolubile ad $h = 0$ la teoria di campo medio si rivela utile nello studio del modello in $d \geq 3$. Il confronto con i risultati esatti permette inoltre di stabilire la bontà delle approssimazioni. Un modo alquanto intuitivo di descrivere l'idea di base della teoria è il seguente. La hamiltoniana del modello di Ising con interazione a prossimi vicini, campo magnetico uniforme e b.c. libere in una regione $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ è

$$H_\Lambda(\sigma) = -h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i - \frac{J}{2} \sum_{(i,j) \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j \quad (4.1.1)$$

dove con la notazione (i, j) si intendono le coppie di i e j prossimi vicini. Il fattore $\frac{1}{2}$ serve perchè sommando su tutte le (i, j) ogni coppia viene considerata due volte.

L'approssimazione della teoria di campo medio consiste nel modificare la hamiltoniana (4.1.1) ammettendo che ogni spin del modello interagisca non con gli spin prossimi vicini, ma con il valor medio degli spin prossimi vicini, cioè con la magnetizzazione. La hamiltoniana di campo medio è data da

$$H_\Lambda(\sigma) = -h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i - \frac{J}{2} \sum_{(i,j) \in \Lambda} \sigma_i m_j \quad (4.1.2)$$

dove

$$m_j = \langle \sigma_j \rangle_{c.m.} \quad (4.1.3)$$

e la magnetizzazione è calcolata rispetto alla misura di campo medio. L'equazione (4.1.3) è interpretata come un'equazione di consistenza le cui soluzioni forniscono i valori della magnetizzazione permessi all'equilibrio. Questo procedimento permette di conoscere di fatto se, per dati valori dei parametri termodinamici (β, h) , lo stato d'equilibrio sia unico oppure se siano

¹Si veda il prossimo capitolo per la soluzione ad $h \neq 0$.

possibili più valori per la magnetizzazione. Questo è la formulazione originale della teoria di campo medio. Una formulazione alternativa è quella variazionale.

Si consideri l'insieme delle misure trasl-invarianti definite su \mathbb{Z}^d . Definiamo i seguenti funzionali:

$$\phi[\mu] := e[\mu] - Ts[\mu] \quad \text{energia libera} \quad (4.1.4)$$

$$e[\mu] := \langle -h\sigma_0 - \frac{1}{2}J \sum_j \sigma_0\sigma_j \rangle_\mu \quad \text{energia} \quad (4.1.5)$$

$$s[\mu] := - \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \langle \log \mu_\Lambda \rangle_{\mu_\Lambda} \quad \text{entropia} \quad (4.1.6)$$

μ_Λ denota la restrizione della misura μ and un sottinsieme Λ di \mathbb{Z}^d .

Il principio variazionale afferma che nella classe delle misure trasl-invarianti esiste una misura $\bar{\mu}$ che minimizza il funzionale energia libera, e che il funzionale energia libera calcolato su tale misura coincide con l'energia libera termodinamica. Utilizzando il principio variazionale si potrebbe provare a cercare la misura d'equilibrio per il modello di Ising. L'idea della teoria di campo medio consiste nel cercare di minimizzare il funzionale ϕ non sulla classe delle misure trasl-invarianti, ma su una sua sottoclasse. Naturalmente la misura d'equilibrio ottenuta in questo modo non coincide con la vera misura d'equilibrio (quella citata nel principio variazionale). La sottoclasse delle misure trasl-invarianti considerata nella teoria di campo medio è quella delle misure prodotto dipendenti da un parametro reale. Si considera cioè la famiglia di misure

$$\mu_p := \prod_{i \in \Lambda} \frac{e^{p\sigma_i}}{Z_i} \quad p \in R \quad (4.1.7)$$

dove

$$Z_i = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{p\sigma_i} \quad (4.1.8)$$

Le misura (4.1.7) sono dette prodotto in quanto le funzioni di correlazione a più siti sono fattorizzate rispetto a tali misure. Per esempio

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\mu_p} = \sum_{\sigma} \sigma_i \sigma_j \prod_{k \in \Lambda} \frac{e^{p\sigma_k}}{Z_k} = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i \frac{e^{p\sigma_i}}{Z_i} \sum_{\sigma_j = \pm 1} \sigma_j \frac{e^{p\sigma_j}}{Z_j} = \langle \sigma_i \rangle_{\mu_p} \langle \sigma_j \rangle_{\mu_p} \quad (4.1.9)$$

Il parametro p è legato fisicamente alla magnetizzazione. Infatti

$$m_j = \langle \sigma_j \rangle_{\mu_p} = \sum_{\sigma_j = \pm 1} \sigma_j \frac{e^{p\sigma_j}}{Z_j} = \frac{e^p - e^{-p}}{e^p + e^{-p}} = \tanh p \quad (4.1.10)$$

Dalla (4.1.10) si deduce che la magnetizzazione m è uniforme nella classe delle misure prodotto considerata. Procediamo alla minimizzazione del funzionale ϕ . A tale scopo è necessario calcolare i funzionali energia ed entropia sulla misura (4.1.7). Risulta

$$e[\mu_p] = -hm - \frac{Jm^2}{2} \sum_{j:|j|=1} 1 \quad (4.1.11)$$

Poichè risulta

$$\sum_{j:|j|=1} 1 = 2d \quad (4.1.12)$$

possiamo scrivere

$$e[\mu_p] = -hm - dJm^2 \quad (4.1.13)$$

Analogamente

$$s[\mu_p] = -\frac{1}{|\Lambda|} \langle \log \prod_{i \in \Lambda} \frac{e^{p\sigma_i}}{Z_i} \rangle_{\mu_p} = \quad (4.1.14)$$

$$= -\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i \in \Lambda} \langle \log \frac{e^{p\sigma_i}}{Z_i} \rangle_{\mu_p} = -\frac{1}{|\Lambda|} mp \sum_{i \in \Lambda} 1 + \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i \in \Lambda} \langle \log Z_i \rangle_{\mu_p} \quad (4.1.15)$$

Del resto ²

$$Z_i = 2 \cosh p \quad \Rightarrow \quad \langle \log Z_i \rangle_{\mu_p} = \log(2 \cosh p) \quad (4.1.16)$$

e quindi

$$s[\mu_p] = -mp + \log(2 \cosh p) \quad (4.1.17)$$

In definitiva

$$\phi[\mu_p] = -hm - dJm^2 + Tmp - T \log(2 \cosh p) \quad (4.1.18)$$

Nel seguito utilizzeremo la notazione $\phi[\mu_p] = \phi(p)$. Per minimizzare $\phi(p)$ osserviamo che la (4.1.10) stabilisce una corrispondenza biunivoca tra p ed m . Imponiamo allora le condizioni

$$\frac{d\phi}{dm} = 0 \quad \frac{d^2\phi}{dm^2} > 0 \quad (4.1.19)$$

$$\frac{d\phi}{dm} = -h - 2dJm + Tp + Tm \frac{dp}{dm} - \frac{T}{\cosh p} \frac{d}{dp} (\cosh p) \frac{dp}{dm} = \quad (4.1.20)$$

$$= -h - 2dJm + Tp + Tm \frac{dp}{dm} - T \tanh p \frac{dp}{dm} = \quad (4.1.21)$$

$$= -h - 2dJm + T \operatorname{arctanh} m = 0 \quad (4.1.22)$$

Ponendo $\beta = T^{-1}$ si ottiene

$$m = \tanh(\beta h + 2\beta dJm) \quad (4.1.23)$$

Le soluzioni dell'equazione (4.1.23) forniscono i valori della magnetizzazione che rendono stazionario il funzionale energia libera.

4.2 Equazione di consistenza

Cominciamo a studiare il caso $h = 0$. La (4.1.23) si riduce all'equazione

$$m = \tanh(2\beta dJm) \quad (4.2.1)$$

Poniamo

$$x = 2\beta dJm \quad \Rightarrow \quad m = \frac{x}{2\beta dJ} \quad (4.2.2)$$

L'equazione da risolvere si scrive nella forma

$$\tanh x = \frac{x}{2\beta dJ} \quad (4.2.3)$$

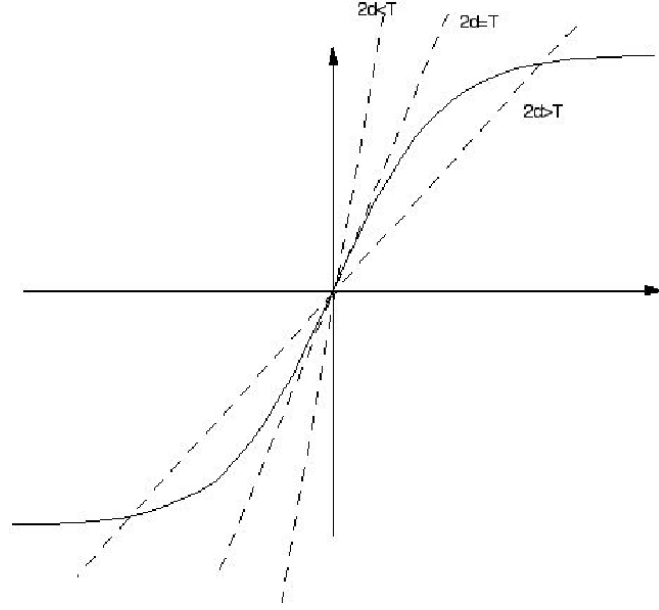


Figura 4.1: Soluzione per via grafica dell'equazione di consistenza.

Questa equazione si risolve graficamente. Il numero delle soluzioni dipende dal coefficiente angolare $1/2\beta dJ$. Consideriamo il grafico riportato di seguito. Nel caso $\frac{1}{2\beta dJ} \geq 1$ si trova una sola intersezione in $m = 0$.

Nel caso $\frac{1}{2\beta dJ} < 1$ si trovano tre intersezioni in $m = 0, \pm m_s$.

Poniamo

$$\beta_c = \frac{1}{2dJ} \quad (4.2.4)$$

Studiamo ora la derivata seconda del funzionale energia libera per stabilire quali sono i valori d'intersezione della magnetizzazione che producono misure d'equilibrio. Ricordiamo l'identità²:

$$\frac{d}{dm} \operatorname{arctanh} m = \frac{d}{dm} \frac{1}{2} \log \frac{1+m}{1-m} = \frac{1}{1-m^2}.$$

Risulta

$$\frac{d^2\phi}{dm^2} = -2dJ + \frac{T}{1-m^2} = \frac{1}{\beta} \left(-2\beta dJ + \frac{1}{1-m^2} \right) \quad (4.2.5)$$

$$\text{se } \beta < \beta_c \quad \text{risulta} \quad \frac{d^2\phi}{dm^2} > 0 \quad \text{per } m = 0$$

Dunque per temperature sufficientemente alte e campo magnetico nullo, si ha un'unica distribuzione di probabilità all'equilibrio, corrispondente ad una magnetizzazione nulla.

$$\text{se } \beta = \beta_c \quad \text{risulta} \quad \frac{d^2\phi}{dm^2} = 0 \quad \text{per } m = 0$$

In questo caso non è possibile dire se l'energia libera abbia un minimo in corrispondenza di una magnetizzazione nulla. Per poter affermare ciò si dovrebbero studiare le derivate di ordine superiore. Questo confermerebbe che l'energia libera ha un minimo in $m = 0$ e $\beta = \beta_c$, cioè l'equilibrio esiste ed è unico.

²La definizione di energia libera usata qui è una funzione $\phi(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} f(\beta, h)$, con f definita nei capitoli precedenti.

$$\text{se } \beta > \beta_c \quad \text{risulta} \quad \frac{d^2\phi}{dm^2} < 0 \quad \text{per } m = 0$$

Dunque a temperature basse l'equilibrio del modello non è più caratterizzato da una magnetizzazione nulla. Per studiare le soluzioni rimanenti, cioè $\beta > \beta_c$ e $m = \pm m_s$, scriviamo l'equazione di consistenza nella forma

$$2\beta dJm = \operatorname{arctanh} m \quad (4.2.6)$$

e consideriamone le soluzioni grafiche.

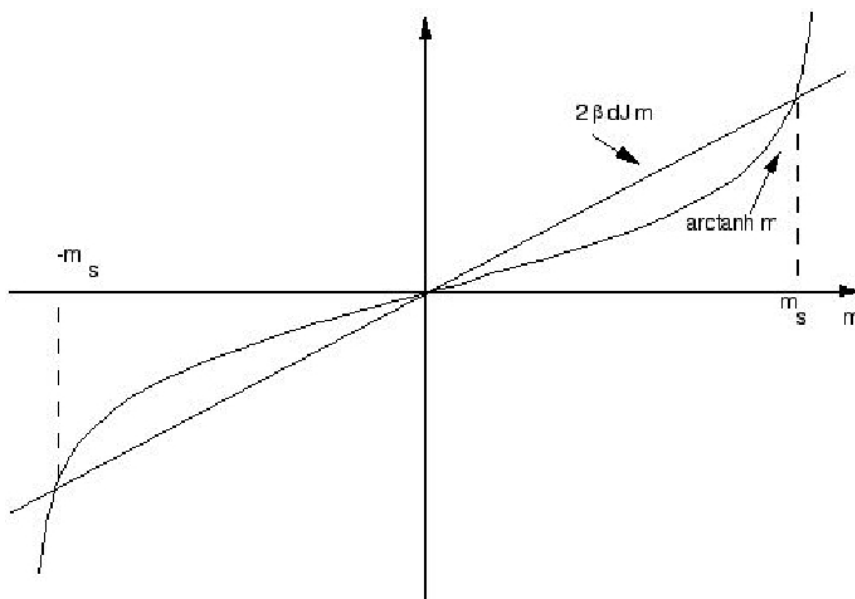


Figura 4.2: Massimi e minimi dell'energia libera dall'equazione di consistenza.

Dal grafico si riconosce che la derivata della funzione $\operatorname{arctanh} m$ nei punti d'intersezione $m = \pm m_s$ è maggiore della pendenza della retta $2\beta dJm$; e poichè risulta

$$\frac{d^2\phi}{dm^2} = \frac{1}{\beta} \left(-2\beta dJ + \frac{d}{dm} \operatorname{arctanh} m \right) > 0 \quad (4.2.7)$$

la distribuzione di probabilità associata a $\beta > \beta_c$ ed $m = \pm m_s$ è d'equilibrio. Abbiamo ottenuto la cosiddetta energia libera di Helmholtz $\phi(\beta, m)$. In figura (4.3) è rappresentata la funzione $\phi(m)$ ad alta e bassa temperatura. Per chiarezza indichiamo l'energia libera di Helmholtz con $\tilde{\phi}(\beta, m)$. $\tilde{\phi}(\beta, m)$ è legata all'energia libera $\phi(\beta, h)$ tramite trasformata di Legendre:

$$\tilde{\phi}(\beta, m) - hm = \phi(\beta, h); \quad \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial m} = h$$

da cui $\frac{d^2\tilde{\phi}}{dm^2} = \frac{\partial h}{\partial m} = \chi^{-1}$.

Possiamo capire la relazione nel seguente modo:

$$\begin{aligned} Z(\beta, h) &= \sum_{\sigma} \exp\left\{ \beta h \sum_i \sigma_i + J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j \right\} = \sum_m e^{\beta h N m} \sum_{\sigma: \sum_i \sigma_i = N m} e^{\beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j} \\ &= \sum_m \exp\{ \beta N [hm - \tilde{\phi}(\beta, m)] \} \approx \exp\{ N f(\beta, h) \} = \exp\{ -N \beta \phi(\beta, h) \} \end{aligned}$$

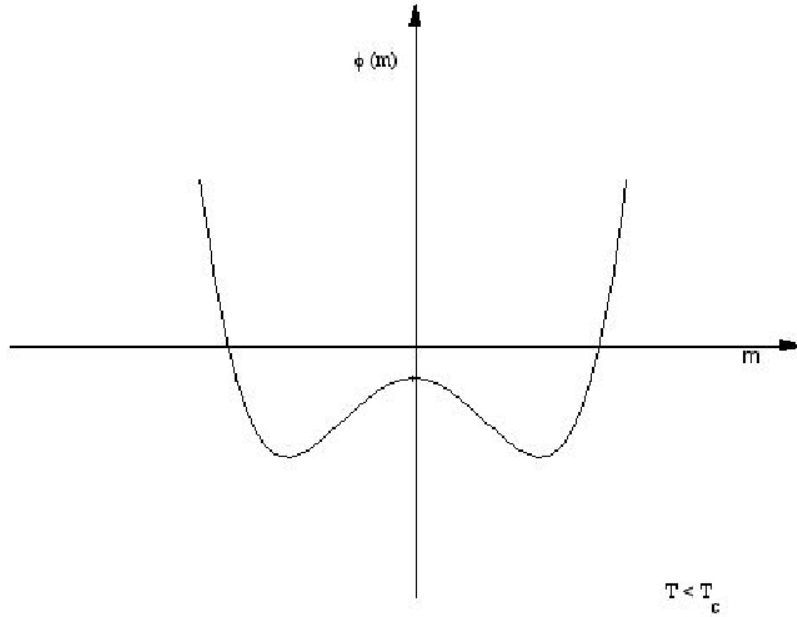


Figura 4.3: Energia libera prevista dalla teoria di campo medio.

Uno dei problemi della teoria di campo medio è il fatto che per $\beta > \beta_c$ c'è un intorno dell'origine dove la funzione $\phi(m)$ è concava. In questo intorno la suscettività magnetica $\chi^{-1} = \phi''(m)$ è negativa, e questo non è fisicamente corretto. Questa difficoltà è naturalmente legata al fatto che la teoria di campo medio è soltanto un'approssimazione. Del resto questa approssimazione è buona, in quanto prevede che a temperature basse lo stato d'equilibrio del modello non sia unico.

Ora vogliamo studiare la magnetizzazione come funzione di β . Consideriamo dapprima gli andamenti asintotici per $\beta \gg \beta_c$ e $\beta \ll \beta_c$. Consideriamo a tal fine l'equazione

$$m = \tanh(2\beta dJm) \quad (4.2.8)$$

Studiamo dapprima il caso $\beta \gg \beta_c$. Dalla fig. (4.1) si riconosce che in questo caso la retta $2\beta dJm$ è molto inclinata verso la verticale, sicché le magnetizzazioni all'equilibrio sono molto prossime a ± 1 . Siamo interessati a conoscere in quale modo tendono a ± 1 . Risulta

$$m_s = \frac{1 - e^{-4\beta dJm_s}}{1 + e^{-4\beta dJm_s}} \simeq \frac{1 - e^{-4\beta dJ}}{1 + e^{-4\beta dJ}} \sim 1 - e^{-4\beta dJ} \quad \text{se } \beta \gg \beta_c \quad (4.2.9)$$

Quindi m_s tende a 1 esponenzialmente in β .

Nel caso $\beta \ll \beta_c$, già sappiamo che la magnetizzazione all'equilibrio è nulla. Rimane quindi da studiare la magnetizzazione nell'intorno del punto critico. Per $\beta = \beta_c + \epsilon$ risulta $|m| \ll 1$. In questo caso possiamo sviluppare in serie di Taylor il secondo membro della (4.2.8) e risolvere rispetto ad m .

$$m \simeq (2\beta dJ)m - \frac{(2\beta dJ)^3}{3}m^3 \quad (4.2.10)$$

per cui

$$m^2 \simeq \frac{3}{(2\beta dJ)^3}(2\beta dJ - 1) \sim (\beta - \beta_c) \quad (4.2.11)$$

In definitiva

$$m \sim (\beta - \beta_c)^{1/2} \quad (4.2.12)$$

Possiamo ora rappresentare la magnetizzazione come funzione di β in Fig 4.4.

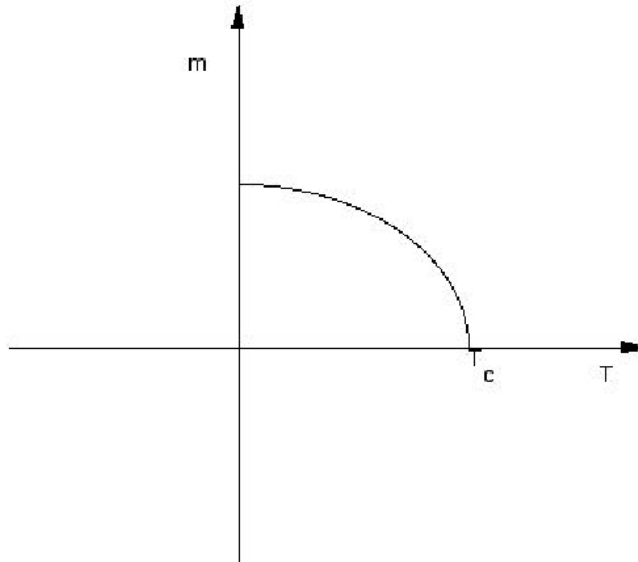


Figura 4.4: Andamento della magnetizzazione in prossimità di β_c e per grandi β .

Dalla (4.1.13) si riconosce che a campo magnetico nullo l'energia si comporta proporzionalmente al quadrato della magnetizzazione. In virtù della (4.2.12) possiamo scrivere

$$e \sim (\beta - \beta_c) \quad \text{per } \beta > \beta_c \quad (4.2.13)$$

A temperature maggiori della temperatura critica la magnetizzazione è nulla e quindi anche l'energia. Il calore specifico si ottiene derivando l'energia rispetto a β ,

$$C = \frac{\partial e}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial e}{\partial \beta}.$$

Dal comportamento dell'energia si deduce che il calore specifico è discontinuo sul punto critico.

Rimane da studiare l'equazione di consistenza nel caso $h \neq 0$. Poniamo

$$x = 2\beta dJm + h\beta \quad \Rightarrow \quad m = \frac{x - h\beta}{2\beta dJ} \quad (4.2.14)$$

L'equazione di consistenza si può ora scrivere nella forma

$$\frac{x - h\beta}{2\beta dJ} = \tanh x \quad (4.2.15)$$

Studiamo graficamente le soluzioni di questa equazione per $h > 0$ e $|h| \ll 1$: Come nel caso $h = 0$, esiste β_c^* tale che dobbiamo distinguere due casi

- $\beta \leq \beta_c$: in questo caso c'è un'unica intersezione, corrispondente ad un punto di minimo per $\phi(m)$ (da verificare)
- $\beta > \beta_c$: in questo caso ci sono tre intersezioni, una è punto di minimo locale per $\phi(m)$, una è un punto di minimo assoluto, e la terza è un punto di massimo

L'andamento di ϕ in funzione di m è il seguente

Osserviamo che se $|h| \gg 1$ c'è una sola intersezione, e intuitivamente ci si aspetta che essa corrisponda ad uno stato d'equilibrio in cui tutti gli spin sono orientati parallelamente al campo h . L'andamento di m come funzione di h è descritto dai seguenti due grafici

Nel caso $\beta > \beta_c$ esiste magnetizzazione spontanea. Del resto, per $h < 0$ l'equazione di consistenza ammette soluzioni negative. La teoria, cioè prevede l'esistenza di stati metastabili.

Ora vogliamo studiare la suscettività magnetica χ . A tale scopo ricordiamo la formula

$$\frac{d}{dx} \tanh x = 1 - \tanh^2 x \quad (4.2.16)$$

Risulta dunque

$$\chi = \frac{dm}{dh} = (1 - m^2) \left(2\beta dJ \frac{dm}{dh} + \beta \right) \quad (4.2.17)$$

da cui

$$\chi[1 - 2\beta dJ(1 - m^2)] = (1 - m^2)\beta \quad (4.2.18)$$

La (4.2.17) può scriversi quindi nella forma

$$\chi = \frac{(1 - m^2)\beta}{1 - 2\beta dJ(1 - m^2)} = \frac{1}{\frac{1}{\beta(1 - m^2)} - 2dJ} = \left(\frac{1}{\beta(1 - m^2)} - \frac{1}{\beta_c} \right)^{-1} \quad (4.2.19)$$

Per quanto detto precedentemente sappiamo che per $\beta = \beta_c$ ed $h = 0$ risulta $m = 0$. Se ci poniamo nella condizione $\beta < \beta_c$ ed $h = 0$, in prossimità di β_c si ottiene

$$\chi(\beta, h = 0) \sim \left(\frac{1}{\beta} - \frac{1}{\beta_c} \right)^{-1} \quad (4.2.20)$$

Dunque la suscettività magnetica ad $h = 0$ diverge in $\beta = \beta_c$.

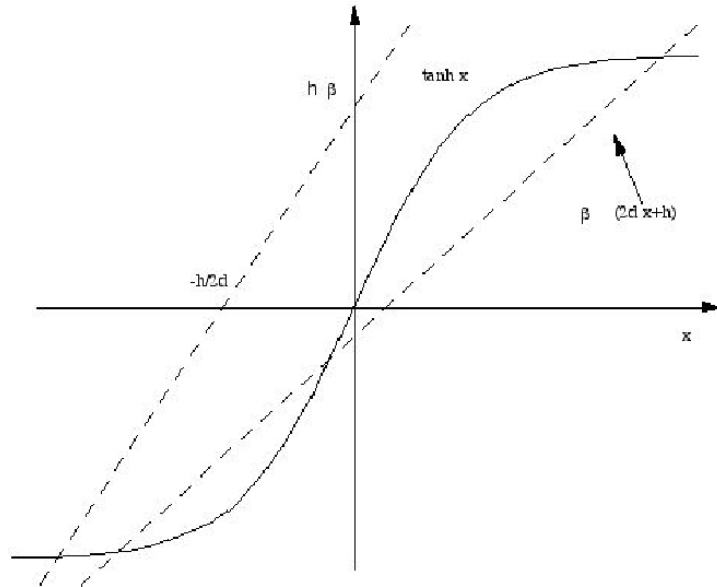


Figura 4.5: Grafico dell'equazione di consistenza per $h \neq 0$.

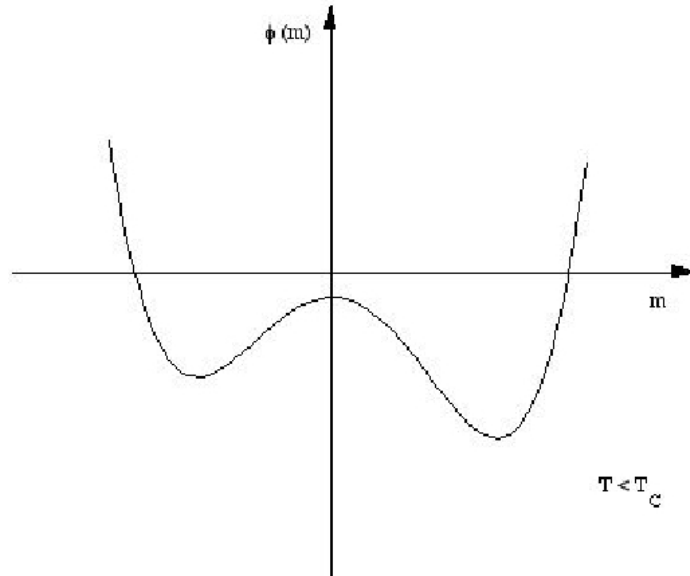


Figura 4.6: Energia libera per $h \neq 0$, $h \ll 1$

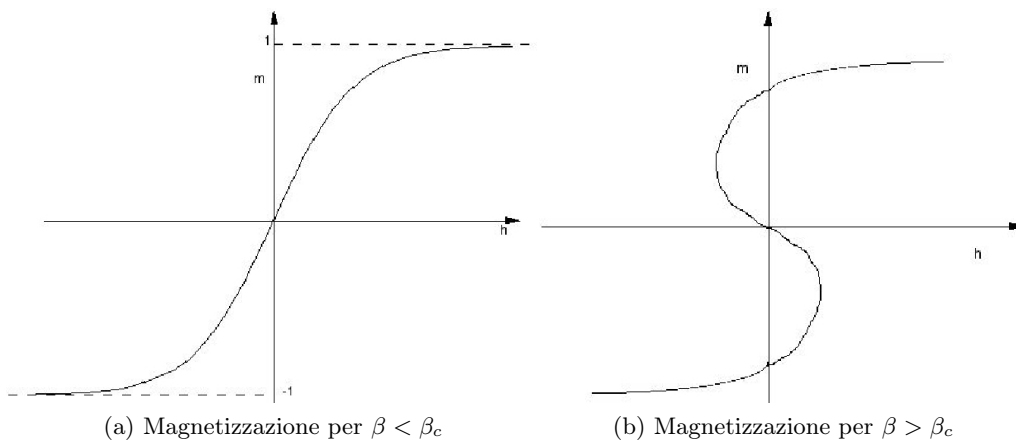


Figura 4.7: Diverso andamento di m in funzione di h a differenti β .

4.3 Teoria di van der Waals.

Consideriamo un sistema di N particelle in una dimensione, interagenti attraverso un potenziale a coppie. Il potenziale è costituito di una parte attrattiva a lunga distanza ϕ e una parte di hard core di range 1. Sia Z_N la funzione di partizione per questo sistema unidimensionale di sfere dure interagenti contenuto in un volume $\Lambda = L$

$$Z_N = \frac{1}{N!} \int \cdots \int dq_1 \dots dq_N \prod_{ij} \chi(|q_i - q_j|) \exp\{-\beta \sum_{ij} \phi(|q_i - q_j|)\}$$

dove $\chi = 0$ se $q < 1$ ed è uguale a 1 se $q > 1$. L'approssimazione di campo medio consiste in questo caso nel sostituire all'energia totale di interazione di una particella con le altre, che dipende dalla configurazione, il valore che si ottiene considerando le particelle distribuite uniformemente con il valore medio della densità ρ

$$\sum_j \phi(|q_i - q_j|) \approx \rho \int dr \phi(r) := -\alpha\rho, \alpha > 0$$

Si ha

$$Z_N(\rho, \beta) \approx \frac{1}{N!} \exp\left\{\frac{\beta\alpha N\rho}{2}\right\} \int \cdots \int dq_1 \dots dq_N \Pi_{ij} \chi(|q_i - q_j|)$$

Per calcolare l'integrale osserviamo che l'integrale è uguale a $N!$ volte l'integrale sulla regione

$$0 < q_1 < q_2 < \cdots < q_N < L.$$

Inoltre il prodotto di funzioni a scalino equivale a restringere la regione di integrazione a

$$0 \leq q_1 < q_2 - 1, 1 < q_2 < q_3 - 1, \dots, (N-1) < q_N \leq L$$

Cambiando variabile $r_j = q_j - (j-1)$ e ponendo $\ell = L - (N-1)$ si ha

$$Z_N(\rho, \beta) \approx \exp\left\{\frac{\beta\alpha N\rho}{2}\right\} \int_0^\ell dr_N \int_0^{r_N} dr_{N-1} \cdots \int_0^{r_2} dr_1 = \frac{\ell^N}{N!}$$

L'ultima eguaglianza si giustifica così: si può cambiare la regione di integrazione scegliendo un qualunque r_j e facendolo variare da 0 a ℓ e gli altri varieranno di conseguenza. Quindi se si integrano tutte le variabili tra 0 a ℓ si ottiene $N!$ volte l'integrale di partenza. In conclusione,

$$Z_N(\rho, \beta) \approx \frac{(|\Lambda| - (N-1)v_0)^N}{N!} \exp\left\{\frac{\beta\alpha N\rho}{2}\right\}$$

dove $v_0 = 1$ rappresenta il volume occupato da una particella. Siccome l'approssimazione di campo medio non dovrebbe risentire della dimensione, si assume la stessa espressione per la funzione di partizione anche a dimensione maggiore di uno. Nel limite termodinamico si ha per l'energia libera f

$$f(\beta, \rho) = \lim_{N, |\Lambda| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_\Lambda(\rho, \beta) = 1 + \frac{\beta\alpha\rho}{2} + \log(v - v_0)$$

Il Limite è preso in modo che il rapporto $N/V = \rho$ è fisso. Per la pressione si ha

$$\beta p = \frac{\partial f}{\partial v} = (v - v_0)^{-1} - \frac{1}{2}\beta\alpha\rho^2$$

Questa è l'equazione di stato di van der Waals, dove $\rho_0 = v_0^{-1}$ è la cosiddetta densità di massimo impacchettamento. Per p e T fissati l'equazione ha 3 soluzioni v . Le isoterme nel piano p, v appaiono come linee non convesse con una parte che corrisponde a compressibilità negativa. La costruzione di Maxwell permette di correggere questo problema e corrisponde a prendere l'involuppo convesso dell'energia libera. Il punto critico è definito come il punto in cui le 3 soluzioni coincidono e questo permette di calcolare il volume, temperatura e pressione critiche.

4.4 Modello 1/N e potenziale di Kac

In questa sezione intendiamo discutere un secondo possibile modo di ottenere l'equazione di consistenza per la magnetizzazione. L'approccio che descriveremo è noto come modello 1/N. Esso è equivalente alla formulazione variazionale ed è fra i metodi esistenti quello che riproduce

più intuitivamente le idee illustrate nell'Introduzione. Il punto di partenza del modello $1/N$ consiste nel modificare la hamiltoniana di Ising nel modo seguente: si suppone che interagiscano tutti gli spin presenti nella regione Λ e che l'intensità dell'interazione sia uniforme ed inversamente proporzionale al numero degli spin. Posto $|\Lambda| = N$, la hamiltoniana del modello $1/N$ è

$$H_\Lambda(\sigma) = -h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i - \frac{J\alpha}{2N} \sum_{i,j \in \Lambda: i \neq j} \sigma_i \sigma_j \quad (4.4.1)$$

Intuitivamente ci si aspetta che la hamiltoniana (4.4.1) produca i risultati esaminati nella sezione 5.1 poichè risulta

$$\frac{1}{N} \sum_{i \neq j} \sigma_i \sigma_j = \sum_i \sigma_i \left(\frac{1}{N} \sum_{j: j \neq i} \sigma_j \right) \simeq \sum_i \sigma_i m(\sigma) \quad (4.4.2)$$

dove $m(\sigma)$ è il valor medio dello spin nella configurazione σ , la magnetizzazione. Il vantaggio della hamiltoniana (4.4.1) è il fatto che la funzione di partizione corrispondente è esattamente risolubile. Per ricavare la soluzione esatta, cominciamo a scrivere la (4.4.1) in una forma più opportuna. Risulta

$$\sum_{i \neq j} = \sum_{i,j} - \sum_{i=j} \quad (4.4.3)$$

Dalla (4.4.3) segue che

$$\sum_{i \neq j} \sigma_i \sigma_j = \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=j} \sigma_i \sigma_j = \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 - N \quad (4.4.4)$$

e quindi

$$H_\Lambda(\sigma) = -h \sum_i \sigma_i - \frac{J\alpha}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 + \frac{J\alpha}{2} \quad (4.4.5)$$

La funzione di partizione da calcolare è quindi

$$Z_\Lambda(\beta, h) = \sum_\sigma e^{\beta h \sum_i \sigma_i + \frac{\beta J\alpha}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 - \frac{\beta J\alpha}{2}} = \quad (4.4.6)$$

$$= e^{-\frac{\beta J\alpha}{2}} \sum_\sigma e^{\beta h \sum_i \sigma_i} e^{\frac{\beta J\alpha}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2} \quad (4.4.7)$$

A tale scopo sfruttiamo l'identità

$$e^{a/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{a}x} \quad \forall a \in R^+ \quad (4.4.8)$$

Ponendo

$$a = \frac{\beta J\alpha}{N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 \quad (4.4.9)$$

si trova

$$e^{\frac{\beta J\alpha}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{\frac{\beta J\alpha}{N}} x \sum_i \sigma_i} \quad (4.4.10)$$

Sostituendo la (4.4.10) nella (4.4.7) si ottiene

$$Z_{\Lambda}(\beta, h) = e^{-\frac{\beta J \alpha}{2}} \sum_{\sigma} e^{\beta h \sum_i \sigma_i} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2} + x \sqrt{\frac{\beta J \alpha}{N}} \sum_i \sigma_i} = \quad (4.4.11)$$

$$= \frac{e^{-\frac{\beta J \alpha}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \sum_{\sigma} e^{\left(\beta h + x \sqrt{\frac{\beta J \alpha}{N}}\right) \sum_i \sigma_i} \quad (4.4.12)$$

La somma in ultimo membro della (4.4.12) si calcola esattamente:

$$\sum_{\sigma} e^{\left(\beta h + x \sqrt{\frac{\beta J \alpha}{N}}\right) \sum_i \sigma_i} = 2^N \cosh^N \left(\beta h + x \sqrt{\frac{\beta J \alpha}{N}} \right) \quad (4.4.13)$$

Si ottiene quindi

$$Z_{\Lambda}(\beta, h) = \frac{2^N}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\beta J \alpha}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \cosh^N \left(\beta h + x \sqrt{\frac{\beta J \alpha}{N}} \right) \quad (4.4.14)$$

Ponendo

$$z := \frac{x}{\sqrt{\beta J \alpha N}} \quad \Rightarrow \quad dx = \sqrt{\beta J \alpha N} dz \quad (4.4.15)$$

la funzione di partizione assume la forma

$$Z_{\Lambda}(\beta, h) = \frac{2^N}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\beta J \alpha N} e^{-\frac{\beta J \alpha}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-\frac{\beta J \alpha N}{2} z^2} \cosh^N \left(\beta h + \beta J \alpha z \right) = \quad (4.4.16)$$

$$= 2^N \sqrt{\frac{\beta J \alpha N}{2\pi}} e^{-\frac{\beta J \alpha}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{Ng(z)} \quad (4.4.17)$$

dove

$$g(z) = -\frac{\beta J \alpha}{2} z^2 + \log \cosh \left(\beta h + \beta J \alpha z \right) \quad (4.4.18)$$

Prendendo il logaritmo di ambo i membri della (4.4.17) e dividendo per N si ottiene

$$\frac{1}{N} \log Z_{\Lambda}(\beta, h) = \log 2 + \frac{1}{2N} \log \left(\frac{\beta J \alpha N}{2\pi} \right) - \frac{\beta J \alpha}{2N} + \frac{1}{N} \log \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{Ng(z)} \quad (4.4.19)$$

Nel limite $N \rightarrow \infty$ della (4.4.19) si ottiene l'energia libera. Utilizzando il metodo del punto di sella si ottiene

$$f(\beta, h) = \log 2 + \max_z g(z) \quad (4.4.20)$$

Per ricavare l'energia libera deriviamo $f(z)$ rispetto a z ed imponiamo che la derivata sia nulla. Si trova in questo modo l'equazione

$$z = \tanh(\beta h + \beta J \alpha z) \quad (4.4.21)$$

È possibile dimostrare che la variabile z coincide con la magnetizzazione.

$$\begin{aligned} \beta m = \frac{\partial f}{\partial h} &= -\beta J \alpha z \frac{dz}{dh} + \beta \tanh \left(\beta h + \beta J \alpha z \right) + \beta J \alpha \tanh \left(\beta h + \beta J \alpha z \right) \frac{dz}{dh} \\ &= \beta \tanh \left(\beta h + \beta J \alpha z \right) = \beta z \end{aligned} \quad (4.4.22)$$

In questo modo l'equazione (4.4.21) coincide con l'equazione di consistenza trovata nella sezione (4.1.1) se si sceglie $\alpha = 2d$. Infatti, questo equivale ad approssimare $\sum_j J_{0j}\sigma_j$ con $m \sum_j J_{0j} = m2dJ$.

Va notato che in questo modello la funzione di correlazione connessa $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c$ non è nulla ma tende a zero per N che va all'infinito.

Il modello $1/N$ per la teoria di campo medio è equivalente alla formulazione variazionale e pertanto presenta lo stesso problema: la suscettività magnetica è negativa per $\beta > \beta_c$ ed m in un intorno di $m = 0$. Il vantaggio del modello $1/N$ sta nel fatto che è possibile riconoscere l'origine di questa difficoltà. Precisamente si deve osservare che nel modello $1/N$ l'intensità dell'interazione tra gli spin tende ad annullarsi nel limite termodinamico, essendo inversamente proporzionale al numero degli spin. Vogliamo accennare ad un metodo, elaborato da Lebowitz e Penrose (1972) che permette di eliminare questa difficoltà. Lavoriamo momentaneamente nel linguaggio dei gas di particelle. Dato un potenziale

$$\phi(|x|) = \begin{cases} 1 & \text{se } |x| \leq 1 \text{ ed } x \neq 0 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (4.4.23)$$

si definisce *potenziale di Kac* il seguente potenziale

$$\phi^\gamma(|i-j|) := \gamma^d \phi(\gamma|i-j|) \quad (4.4.24)$$

Come si vede il potenziale di Kac ha range pari a γ^{-1} ed intensità pari a γ^d . Nel limite $\gamma \rightarrow 0$ il potenziale si trasforma in un potenziale di range infinito e di intensità nulla. Nel linguaggio dei sistemi di spin, data un'interazione

$$J_{ij} := J(|i-j|) = \begin{cases} J & \text{se } |i-j| \leq 1 \text{ ed } i \neq j \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (4.4.25)$$

si introduce l'interazione di Kac

$$J_{ij}^\gamma := \gamma^d J(\gamma|i-j|) \quad (4.4.26)$$

Il metodo di Lebowitz e Penrose consiste nel modificare la hamiltoniana del modello $1/N$ nel modo seguente

$$H'_\Lambda(\sigma) = -h \sum_i \sigma_i - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij}^\gamma \sigma_i \sigma_j \quad (4.4.27)$$

È possibile calcolare la funzione di partizione a volume finito corrispondente alla hamiltoniana (4.4.27). Eseguendo il limite termodinamico $|\Lambda| \rightarrow \infty$ e quindi il limite $\gamma \rightarrow 0$ (si osservi che l'ordine delle operazioni è cruciale), ci si aspetta a priori di riprodurre i risultati del modello $1/N$. In realtà quello che si ottiene è un'energia libera $\phi(m)$ a $\beta > \beta_c$ data dall'involuppo convesso della energia libera con doppia buca, dove per involuppo convesso di una funzione f si intende la più grande funzione convessa che non supera f .

La teoria non prevede l'esistenza degli stati metastabili, e questo è corretto per una teoria delle transizioni di fasi nell'ambito della Meccanica Statistica dell'equilibrio.

Tornando all'equazione di stato di van der Waals, se usiamo l'energia libera invece della pressione come potenziale termodinamico, otteniamo una espressione

$$f(\beta, v) = 1 + \frac{\alpha\beta\rho}{2} + \log(v - v_0).$$

La pressione e l'energia libera sono legate dalla relazione

$$\beta p = \frac{\partial f}{\partial v}$$

Il tratto con doppia "bozza" nel grafico di p in funzione di v corrisponde ad una zona nel grafico di f in funzione di v di non convessità. Imporre la regola di Maxwell delle aree uguali e' equivalente a prendere l'inviluppo convesso della f . Infatti, siano v e v' i volumi specifici corrispondenti alle fasi liquida e gassosa di un isoterma ($\beta > \beta_c$) nel piano p, v . Imporre la regola di Maxwell per trovare la retta $p = p_0$ che interseca la curva nel punto v_0 in modo da ottenere due aree uguali significa scrivere

$$\begin{aligned} \int_{v_0}^v \frac{\partial f}{\partial v} - p_0(v - v_0) &= \int_{v_0}^{v'} \frac{\partial f}{\partial v} - p_0(v' - v_0) \\ f(v) - f(v_0) - p_0(v - v_0) &= p_0(v_0 - v') + f(v') - f(v_0) \\ f(v) - f(v') &= p_0(v - v') \end{aligned}$$

Ma l'ultima relazione e' esattamente la retta di pendenza p_0 nel grafico f, v che costituisce l'inviluppo convesso di f .

4.5 Correzioni alla teoria di campo medio

Un modo differente per ricavare l'equazione di consistenza fa uso della seguente identità, valida in generale per un modello di Ising a campo magnetico non uniforme ed interazione a prossimi vicini non uniforme

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z_\Lambda} \sum_{\sigma} \sigma_i e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)} = \quad (4.5.1)$$

$$= \frac{1}{Z_\Lambda} \sum_{\sigma} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)} \frac{\sum_{\sigma_i=\pm 1} \sigma_i e^{-\beta H_\Lambda(\sigma_i, \tilde{\sigma})}}{\sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma_i, \tilde{\sigma})}} = \quad (4.5.2)$$

$$= \frac{1}{Z_\Lambda} \sum_{\sigma} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)} \tanh\left(\beta h_i + \beta \sum_{k:|i-k|=1} J_{ik} \sigma_k\right) = \quad (4.5.3)$$

$$= \langle \tanh\left(\beta h_i + \beta \sum_{k:|i-k|=1} J_{ik} \sigma_k\right) \rangle \quad (4.5.4)$$

dove $\tilde{\sigma}$ è la restrizione di σ all'insieme $\Lambda - \{i\}$ e la somma che compare dentro la media è sui siti prossimi vicini ad i , che sono in generale in numero di $2d$. La dimostrazione della (4.5.4) è semplice. La prima uguaglianza è la definizione della magnetizzazione. Per dimostrare la seconda uguaglianza basta scrivere nella seconda riga

$$\sum_{\sigma} = \sum_{\tilde{\sigma}} \sum_{\sigma_i=\pm 1} \quad (4.5.5)$$

La somma su σ_i si cancella allora a numeratore e a denominatore, e si ottiene la magnetizzazione nel sito i . Per dimostrare la terza uguaglianza basta eseguire esplicitamente le somme su σ_i , mettere in evidenza e semplificare tutti i termini che non dipendono da i . Riscriviamo il risultato (4.5.4):

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \tanh\left(\beta h_i + \beta \sum_{k:|i-k|=1} J_{ik} \sigma_k\right) \rangle \quad (4.5.6)$$

Un altro modo equivalente è usare che l'attesa dell'attesa condizionata è uguale all'attesa:

$$\langle \sigma_i \rangle = E \left[E[\sigma_i | \sigma_j = \bar{\sigma}_j, |i-j|=1] \right]$$

$$E[\sigma_i | \sigma_j = \bar{\sigma}_j, |i-j|=1] = \frac{\sum_{\underline{\hat{\sigma}}} e^{\beta H(\hat{\sigma})} \sum_{\sigma_i=\pm 1} \sigma_i \sum_i \exp\{\beta h_i \sigma_i + \beta \sum_{|i-j|=1} \sigma_i \bar{\sigma}_j\}}{\sum_{\underline{\hat{\sigma}}} e^{\beta H(\hat{\sigma})} \sum_{\sigma_i=\pm 1} \sum_i \exp\{\beta h_i \sigma_i + \beta \sum_{|i-j|=1} \sigma_i \bar{\sigma}_j\}}$$

Il termine $\sum_{\underline{\hat{\sigma}}} e^{\beta H(\hat{\sigma})}$ si semplifica fra numeratore e denominatore e il risultato è la funzione di $\bar{\sigma}_j$

$$\tanh \left(\beta h_i + \beta \sum_{k:|i-k|=1} J_{ik} \bar{\sigma}_k \right)$$

Prendendone l'attesa si ottiene la (4.5.7).

L'approssimazione più rozza che si può fare nella (4.5.6) è quella di portare a secondo membro il valore d'aspettazione dentro l'argomento della funzione tanh, ottenendo così l'equazione

$$m_i = \tanh \left(\beta h_i + \beta \sum_{k:|i-k|=1} J_{ik} m_k \right) \quad (4.5.7)$$

cioè un'equazione di consistenza di campo medio generalizzata al caso in cui le interazioni ed il campo magnetico esterno non siano uniformi. Una approssimazione più raffinata si ottiene nel modo seguente

Osservazione 4.5.1. *Sia data una funzione $f(\sigma_i)$ dipendente dallo spin nel sito i . Vale l'identità*

$$f(\sigma_i) = A + B\sigma_i \quad (4.5.8)$$

dove

$$A = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i=\pm 1} f(\sigma_i) \quad B = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i=\pm 1} \sigma_i f(\sigma_i) \quad (4.5.9)$$

Per ottenere l'espressione di A basta sommare ambo i membri della (4.5.8) su σ_i ed osservare che il termine proporzionale a B si cancella. Per ottenere l'espressione di B basta moltiplicare ambo i membri della (4.5.8) per σ_i e quindi sommare su σ_i : questa volta si cancella il termine proporzionale ad A .

Analogamente, data una funzione $f(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$, vale l'identità

$$f(\sigma_1, \dots, \sigma_k) = A + \sum_{j_1=1}^k B_{j_1} \sigma_{j_1} + \sum_{j_1, j_2=1}^k C_{j_1 j_2} \sigma_{j_1} \sigma_{j_2} + \dots + \sum_{j_1, j_2, \dots, j_k=1}^k L_{j_1 \dots j_k} \sigma_{j_1} \dots \sigma_{j_k} \quad (4.5.10)$$

I coefficienti dell'espansione (4.5.10) devono essere determinati in modo analogo a quanto visto nel caso $k=1$.

Nel caso dell'equazione (4.5.6), a secondo membro compare una funzione degli spin nei siti prossimi vicini ad i . È possibile utilizzare l'identità (4.5.10). Per esempio nel caso $d=1$, $h=0$ ed interazione uniforme si ottiene

$$\tanh[\beta J(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})] = A + B\sigma_{i-1} + C\sigma_{i+1} + D\sigma_{i-1}\sigma_{i+1} \quad (4.5.11)$$

Nel caso $d = 2$ i siti prossimi ad un dato sito sono quattro. Numerando quelli relativi al sito i arbitrariamente ed osservando che la funzione $\tanh x$ è dispari in x è facile dimostrare che nel caso $h = 0$ ed interazione uniforme risulta

$$\tanh\left(\beta J \sum_{j=1}^4 \sigma_j\right) = \sum_{j=1}^4 B_j \sigma_j + \sum_{j_1, j_2, j_3=1}^4 D_{j_1 j_2 j_3} \sigma_{j_1} \sigma_{j_2} \sigma_{j_3} \quad (4.5.12)$$

È inoltre possibile verificare che i coefficienti che compaiono nella (4.5.12) non dipendono dagli indici di sito, per cui

$$\tanh\left(\beta J \sum_{j=1}^4 \sigma_j\right) = B \sum_{j=1}^4 \sigma_j + C \sum_{j_1, j_2, j_3=1}^4 \sigma_{j_1} \sigma_{j_2} \sigma_{j_3} \quad (4.5.13)$$

Se si fa l'approssimazione che la distribuzione di probabilità sia tale da fattorizzare le funzioni di correlazione e che la magnetizzazione sia uniforme, possiamo scrivere

$$m = B'm + C'm^3 \quad (4.5.14)$$

Se si procede a risolvere l'equazione (4.5.13) con i corretti coefficienti B' e C' e si confrontano i risultati con quelli ottenuti dalla soluzione esatta di Onsager, si riconosce che l'approssimazione (4.5.14) è migliore di quella prodotta dalla formulazione variazionale.

4.5.1 Funzioni di correlazione

Nel modello di Ising a campo magnetico costante, interazione a prossimi vicini e b.c. libere vale la seguente relazione

$$\chi_\Lambda(\beta, h) := \frac{\partial^2 f}{\partial h^2}(\beta, h) = \frac{\beta^2}{|\Lambda|} \sum_{i, j \in \Lambda} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c(\beta, h) \quad (4.5.15)$$

dove

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c(\beta, h) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_\Lambda(\beta, h) - \langle \sigma_i \rangle_\Lambda(\beta, h) \langle \sigma_j \rangle_\Lambda(\beta, h) \quad (4.5.16)$$

è la funzione di correlazione connessa a due punti. La dimostrazione della (4.5.15) è immediata a partire dalla hamiltoniana del modello di Ising. Nel caso della teoria di campo medio la (4.5.15) non vale. Infatti, come abbiamo visto, nella formulazione variazionale le funzioni di correlazione sono fattorizzate. Questo implica che le funzioni di correlazione connesse sono identicamente nulle. Si pongono due problemi:

- (a) quale è il risultato giusto per la suscettività nella teoria di campo medio?
- (b) Perché la (4.5.15) non vale nella teoria di campo medio?

La risposta ad entrambe le domande va cercata nel fatto che nella teoria di campo medio si utilizza una misura diversa dalla misura di Ising. Per quanto riguarda la questione (b) ricordiamo che la formulazione variazionale della teoria di campo medio si basa sull'approssimazione di minimizzare il funzionale energia libera su una classe di misure ristretta rispetto alla classe per cui vale tale principio. Per questo motivo, detta μ_I la misura reale di Ising, e posto

$$f_{c.m.} = \min_{\mu_p} \{\phi[\mu_p]\} \quad \text{energia libera di campo medio} \quad (4.5.17)$$

$$f_I = \phi[\mu_I] \quad \text{energia libera di Ising} \quad (4.5.18)$$

risulta

$$f_I \leq f_{c.m.} \quad (4.5.19)$$

per cui, essendo diverse le energie libere, in generale saranno diverse anche le loro derivate. Il problema è capire in quale misura la differenza delle energie libere si trasmette sulle funzioni di correlazione connesse. A tale scopo si consideri nello spazio delle misure trasl-invarianti la norma

$$\|\mu - \mu'\| := \sup_f |\langle f \rangle_\mu - \langle f \rangle_{\mu'}| \quad f \text{ continua} \quad (4.5.20)$$

Ora è possibile espandere il funzionale ϕ in serie di Taylor attorno alla misura μ_I :

$$\phi[\mu] \equiv \phi[\mu_I] + \frac{\delta\phi}{\delta\mu} \Big|_{\mu=\mu_I} (\mu - \mu_I) + \frac{\delta^2\phi}{\delta\mu^2} \Big|_{\mu=\mu_I} (\mu - \mu_I)^2 + \dots \quad (4.5.21)$$

La precedente espressione va intesa nel senso delle derivate di Frechet. Il simbolo $\frac{\delta\phi}{\delta\mu}$ e' l'operatore lineare A tale che

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\|\phi(x+h) - \phi(x) - Ah\|}{\|h\|} = O(1)$$

Se esiste allora ϕ è detto Frechét-differenziabile in x , o semplicemente differenziabile in x . Inoltre, A è chiamata la derivata (di Frechét) di ϕ in x . Analogamente sono definite le derivate di ordine più alto. Nella (4.5.21) il termine al prim'ordine è zero a causa del fatto che μ_I rende minimo il funzionale ϕ . Ne segue che se

$$\|\mu - \mu_I\| \sim \epsilon \quad (4.5.22)$$

in virtù della (4.5.21) si ha

$$\|\phi[\mu] - \phi[\mu_I]\| \leq \epsilon^2 \quad (4.5.23)$$

ed in virtù della (4.5.20) si ha

$$\langle f \rangle_\mu - \langle f \rangle_{\mu_I} \sim \epsilon \quad (4.5.24)$$

Le (4.5.23) e (4.5.24) ci dicono in che modo le differenze di energia libera si trasmettono sulle funzioni di correlazione.

La formula (4.5.7) costituisce il punto di partenza nella discussione delle correzioni alla teoria di campo medio. Lo scopo che ci poniamo è calcolare le funzioni di correlazione connesse a due punti. Utilizziamo perciò la formula (2.7.3):

$$\beta \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c = \frac{\partial m_i}{\partial h_j} \quad (4.5.25)$$

Consideriamo la (4.5.7). Se $|h| \ll 1$ e $\beta \leq \beta_c$, la magnetizzazione $|m| \ll 1$, sicchè possiamo sviluppare la tanh in serie di Taylor e conservare soltanto il termine lineare:

$$m_i = \beta h_i + \beta \sum_k J_{ik} m_k \quad (4.5.26)$$

dove si intende che $J_{ik} = 0$ se k non è prossimo vicino ad i . Dividendo ambo i membri per β e definendo

$$A_{ik} = \left(-J + \frac{1}{\beta} \right)_{ik}^{-1} \quad (4.5.27)$$

la (4.1.17) si può scrivere nella forma compatta

$$m = Ah \quad (4.5.28)$$

derivando le diverse componenti della (4.5.28) rispetto alle componenti del campo magnetico si riconosce che le funzioni di correlazione a due punti sono date dagli elementi della matrice A . Per studiare la (4.5.28) sviluppiamo A_{ik} in serie di Fourier

$$A_{jk} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{[0,2\pi]^d} d\theta_j d\theta_k G(\theta_j, \theta_k) e^{i(j \cdot \theta_j + k \cdot \theta_k)} \quad (4.5.29)$$

Poichè per interazioni trasl-invarianti A_{jk} dipende soltanto da $j - k$, risulta

$$A_{jk} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{[0,2\pi]^d} d\theta G(\theta) e^{i(j-k) \cdot \theta} \quad (4.5.30)$$

Posto $B = A^{-1}$ risulta

$$B_{jk} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{[0,2\pi]^d} d\theta B(\theta) e^{i(j-k) \cdot \theta} \quad (4.5.31)$$

Dalla teoria delle serie di Fourier sul reticolo risulta

$$G(\theta) = \frac{1}{B(\theta)} \quad (4.5.32)$$

Inoltre

$$B(\theta) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} B_{0n} e^{-in \cdot \theta} = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} e^{-in \cdot \theta} \left(-J_{0n} + \frac{\delta_{0n}}{\beta} \right) \quad (4.5.33)$$

Assumendo che

$$J_{0n} = \begin{cases} J & \text{se } |n| = 1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (4.5.34)$$

si ottiene

$$B(\theta) = - \sum_{|n|=1} J e^{-in \cdot \theta} + \frac{1}{\beta} \quad (4.5.35)$$

Essendo

$$n \cdot \theta = \sum_{i=1}^d n_i \theta_i \quad (4.5.36)$$

risulta

$$B(\theta) = - \sum_{k=1}^d 2J \cos \theta_k + \frac{1}{\beta} \quad (4.5.37)$$

In definitiva

$$A_{jk} = \frac{\beta}{(2\pi)^d} \int d\theta e^{i(j-k) \cdot \theta} \frac{1}{1 - 2J\beta \sum_{k=1}^d \cos \theta_k} \quad (4.5.38)$$

Se $\beta = \beta_c$, si riconosce che il contributo maggiore all'integrale viene dato in un intorno dell'origine. Pertanto bisogna studiare l'integrale (4.5.38) per $|\theta| \ll 1$. Sviluppando $\cos \theta_k$ in serie di Taylor si ottiene

$$A_{jk} = \frac{\beta}{(2\pi)^d} \int d\theta e^{i(j-k) \cdot \theta} \frac{1}{1 - 2\beta dJ + \beta J |\theta|^2} \quad (4.5.39)$$

(per $\beta < \beta_c$ si ha $1 - 2\beta dJ > 0$). Se $\beta \neq \beta_c$ risulta

$$A_{jk} \sim \frac{\text{cost } e^{-\sqrt{1-2\beta dJ} |j-k|}}{\sqrt{1 - 2\beta dJ}} \quad (4.5.40)$$

In questo caso si riconosce che le funzioni di correlazione a due punti decadono esponenzialmente con lunghezza di correlazione pari a

$$\xi = (1 - 2\beta dJ)^{-1/2} \quad (4.5.41)$$

Se $\beta = \beta_c$ si ottiene

$$A_{jk} \sim \frac{1}{J(2\pi)^d} \int_{|\theta| < 1} d\theta e^{i(j-k)\cdot\theta} \frac{1}{|\theta|^2} \quad (4.5.42)$$

Iniziamo l'analisi dal caso $d = 3$ ed estendiamo l'integrale all'intervallo $(0, +\infty)$, perchè il contributo maggiore all'integrale è dato dall'intorno dell'origine. Adottando coordinate polari per θ , e prendendo $(j - k)$ lungo la direzione z nel θ spazio, possiamo scrivere

$$A_{0k} = \frac{1}{J(2\pi)^d} \int_{-1}^1 d(\cos \phi) \int_0^\infty dr \frac{e^{i|k|r \cos \phi}}{r^2} r^2 \quad (4.5.43)$$

Effettuando l'integrale in $\cos \phi$ si ottiene

$$\begin{aligned} &= C \frac{1}{|k|} \int_0^\infty dr \frac{\sin kr}{r} = C \frac{1}{|k|} \frac{1}{2} \text{Im} \int_{-\infty}^\infty dr \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= C \frac{1}{|k|} \frac{1}{2} \text{Im} [\pi i \text{Res}(\frac{e^{ikr}}{r} \Big|_{z=0})] = C \frac{1}{|k|} \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

Il calcolo e' simile a quello della trasformata di Fourier della funzione di Green del Laplaciano. Analogo calcolo in $d = 1, 2$ mostra che l'integrale diverge nell'origine (in $d = 2$ l'integrale diverge logicamente) e l'andamento delle funzioni di correlazione è manifestamente sbagliato. In questo caso la teoria non fa previsioni corrette.

Per $d \geq 3$ l'integrale converge e possiamo scrivere

$$A_{jk} \sim \frac{1}{|j - k|^{d-2}} \quad (4.5.44)$$

Per quanto riguarda la suscettività magnetica, sfruttando l'invarianza per traslazione (valida nel limite termodinamico) risulta

$$\chi \sim \sum_{r=0}^\infty r^{d-1} r^{-d+2} \quad (4.5.45)$$

e quindi la suscettività diverge per ogni valore di d .

Esaminiamo ora il calore specifico. Avendo definito la densità di energia come

$$e = -J \sum_{|k|=1} \langle \sigma_0 \sigma_k \rangle$$

si ha

$$C = \frac{de}{dT} = -\frac{2J\beta^2}{(2\pi)^d} \int d\theta \frac{(\sum_{k=1}^d \cos \theta_k)^2}{[1 - 2J\beta \sum_{k=1}^d \cos \theta_k]^2}$$

Come prima studiamo l'integrale per $|\theta| \ll 1$. Sviluppando $\cos \theta_k$ in serie di Taylor si ottiene per θ in un intorno dell'origine B di raggio R

$$C = \frac{2\beta^2}{2\pi^d} \int_B d\theta \frac{d^2}{[1 - 2\beta dJ + \beta J|\theta|^2]^2}$$

$$\begin{aligned}
&= cost \int_0^R dr \frac{r^{d-1}}{[1 - 2\beta dJ + r^2]^2} \\
&= cost(1 - 2d\beta J)^{\frac{d-4}{2}} \int_0^{R^2} dy \frac{y^{d-1}}{[1 + y^2]^2}
\end{aligned}$$

Se $D > 4$ l'integrale è finito. Se $d = 4$ l'integrale diverge logicamente. Se $d < 4$ diverge come $(1 - 2d\beta J)^{\frac{d-4}{2}}$.

Questo risultato differisce da quello ottenuto valutando il calore specifico in termini dell'energia libera che prevedeva discontinuità di C in ogni dimensione al punto critico.

Capitolo 5

Modello di Ising - Risultati

5.1 Teoria di Lee-Yang delle transizioni di fase.

È possibile studiare il problema delle transizioni di fase utilizzando il formalismo della Meccanica Statistica dell'equilibrio. La teoria che vogliamo illustrare è stata elaborata nel 1953 da Lee e Yang, e, a suo tempo, sembrava essere molto promettente. In realtà dopo il lavoro di Lee e Yang non sono stati ottenuti risultati importanti in questa direzione e il filone di ricerca legato a tale teoria è stato sostanzialmente abbandonato. La teoria viene prima discussa per un sistema di particelle sul continuo e poi per il modello di Ising.

Un modo di manifestarsi di una transizioni di fase è attraverso la discontinuità o la divergenza di qualche derivata della pressione o di un altro potenziale termodinamico. Esaminiamo il problema delle regioni di non-analicità delle funzioni termodinamiche nel piano complesso dei parametri.

Fissiamo anzitutto la notazione. Si consideri un sistema di N particelle di massa m confinate in una regione $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ ed interagenti mediante un potenziale a coppie $\phi(x)$. L'evoluzione temporale del sistema è governata dalla hamiltoniana

$$H(q_1, p_1, \dots, q_N, p_N) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|q_i - q_j|) \quad (5.1.1)$$

Supponiamo che il potenziale ϕ sia caratterizzato dalle seguenti proprietà

$$\phi(x) = +\infty \quad \text{se} \quad x < a \quad (5.1.2)$$

$$-\epsilon < \phi(x) < 0 \quad \text{se} \quad a < x < x_0 \quad (5.1.3)$$

$$\phi(x) = 0 \quad \text{se} \quad x > x_0 \quad (5.1.4)$$

L'andamento del potenziale ϕ è descritto nella Fig. 3. Ogni molecola può essere rappresentata come una sfera rigida di diametro a che attrae le altre molecole quando queste si trovano in sua vicinanza. Consideriamo la funzione di partizione gran-canonica

$$\Xi(z, \Lambda, \beta) := \sum_{N=0}^{+\infty} z^N Z(N, \Lambda, \beta) \quad (5.1.5)$$

dove

$$Z(N, \Lambda, \beta) := \frac{1}{N!} \int_{\mathbb{R}^{dN}} dq_1 \dots dq_N \exp \left\{ -\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|q_i - q_j|) \right\} \quad (5.1.6)$$

è la funzione di partizione canonica e dove

$$Z(0, \Lambda, \beta) := 0 \quad (5.1.7)$$

Il potenziale termodinamico gran-canonicò è la pressione P definita dalla relazione

$$P(z, \Lambda, \beta) := \frac{1}{\beta|\Lambda|} \log \Xi(z, \Lambda, \beta) \quad (5.1.8)$$

L'idea di base della teoria è la seguente. Supponiamo che $|\Lambda| < +\infty$. In tal caso la serie (5.1.5) è in realtà una somma finita. Per convincersi di ciò basta osservare che se, fissato il volume, si considera un numero N di particelle troppo elevato, qualunque sia la configurazione delle particelle, ci sarà sempre una coppia di particelle i, j tale che $|q_i - q_j| < a$, e quindi l'integrale che definisce $Z(N, \Lambda, \beta)$ è nullo. Detto quindi $N_m(\Lambda)$ il numero massimo di particelle compatibili con Λ , risulta

$$Z(N, \Lambda, \beta) = 0 \quad \text{se } N > N_m(\Lambda) \quad (5.1.9)$$

$$\Xi(z, \Lambda, \beta) = \sum_{N=1}^{N_m(\Lambda)} z^N Z(N, \Lambda, \beta) \quad (5.1.10)$$

Ne segue che, essendo $Z(n, \Lambda, \beta) > 0$ per ogni $N \leq N_m(\Lambda)$, allora la funzione di partizione gran-canonica non possiede zeri per $z \in R^+$ e quindi

$$P(z, \Lambda, \beta) \text{ è una funzione analitica di } z \in R^+ \quad (5.1.11)$$

Il fatto che la funzione di partizione gran-canonica non possiede zeri nel semiasse reale positivo delle z significa che, considerata come una funzione della variabile complessa z , gli zeri della funzione $\Xi(z, \Lambda, \beta)$ sono distribuiti nel piano complesso z ma non si trovano lungo il semiasse reale positivo. Dunque nell'ipotesi di volume finito il sistema non manifesta transizioni di fase. Ne segue che il solo limite in cui si possono rivelare punti di non analiticità, corrispondenti a transizioni di fase, è il limite $|\Lambda| \rightarrow \infty$. In tale limite $N_m(\Lambda) \rightarrow \infty$ e la $\Xi(z, \Lambda, \beta)$ diventa realmente una serie.

Per studiare $\Xi(z, \Lambda, \beta)$ nel limite termodinamico $\Lambda \rightarrow R^d$, conviene prolungare analiticamente $\Xi(z, \Lambda, T)$ sul piano complesso z . In tal caso il teorema fondamentale dell'algebra garantisce che, per Λ finito, $\Xi(z, \Lambda, \beta)$ ha esattamente $N_m(\Lambda)$ zeri. Questi zeri sono distribuiti sul piano complesso z , ma non toccano mai l'asse reale positivo.

Il numero degli zeri aumenta e gli zeri stessi si spostano al crescere di $|\Lambda|$, per cui può succedere che nel limite $|\Lambda| \rightarrow \infty$ tali zeri si vadano a disporre in modo sempre più definito lungo una linea che taglia l'asse reale positivo in un punto z_0 , come in Fig. 6; il punto z_0 è in tal caso un punto di non analiticità per il limite termodinamico di $P(z, \Lambda, \beta)$. È chiaro che è stato possibile rivelare z_0 e comprendere realmente quello che succede soltanto estendendo analiticamente Ξ , cioè interpretando z come variabile complessa. È chiaro che, in virtù di quanto detto, uno si aspetta che, se R è una regione del piano complesso z che interseca l'asse reale positivo in un certo intervallo D e se succede che in R non ci sono zeri di Ξ per nessun valore di $|\Lambda|$, questo debba succedere anche nel limite $\Lambda \rightarrow R^d$. In tal caso si può escludere che in D ci siano punti di non analiticità di P e quindi transizioni di fase. Questa è l'idea principale del lavoro di Lee-Yang. Naturalmente, affinché questa analisi abbia senso, sarà necessario che la P sia ben definita nel limite $\Lambda \rightarrow R^d$, cioè nel limite termodinamico. Le idee esposte sono precisate matematicamente nel seguente

Teorema 5.1.1 (di Lee-Yang). *Sia C una regione limitata e semplicemente connessa nel piano complesso z contenente un segmento D dell'asse z reale positivo. Supponiamo che*

1. $p = \lim_{n \rightarrow \infty} p_{\Lambda_n}$ esista finito in D .
2. la successione p_{Λ_n} è uniformemente limitata in C .
3. la funzione di partizione Q_{Λ} non ha zeri in C per ogni Λ .

Allora p può essere estesa ad una funzione analitica all'interno di C . Inoltre p_{Λ_n} converge uniformemente a p in ogni regione C' chiusa in C .

Che cosa succede se al crescere di n gli zeri di Ξ si accumulano attorno ad un punto z_0 che sta sul piano complesso z ? Il teorema di Lee-Yang ci dice che nel limite $n \rightarrow \infty$ il limite di $P(z, \Lambda_n, \beta)$ è continuo in z_0 . Del resto potrebbe succedere che il limite della derivata prima di P rispetto a z sia discontinuo in z_0 , e ciò corrisponderebbe ad una transizione di fase del prim'ordine. Oppure potrebbe succedere che P e la sua derivata prima sono continue in z_0 nel limite termodinamico, mentre la derivata seconda di P è discontinua. In questo caso ci si troverebbe in presenza di una transizione di fase del second'ordine. Una transizione di ordine n si presenterebbe se la derivata $n - ma$ di P fosse discontinua, con le derivate di ordine più basso continue.

Modello di Ising.

Analiticità dell'energia libera nel campo magnetico h . Lo studio degli zeri nel piano complesso h mostra che gli zeri si possono trovare solo per $|z| = |e^{\beta h}| = 1$, cioè $h = 0$. Inoltre gli zeri si accumulano in modo da formare una linea con densità positiva intorno all'asse reale e la tangente a tale linea è ortogonale all'asse reale. Questo fatto implica che la derivata della magnetizzazione m (che è connessa alla derivata dell'energia libera rispetto ad h) è discontinua. Per vederlo si può interpretare l'energia libera, che è un polinomio di ordine n in z della forma

$$f = \text{const} \sum_{k=1}^n [\log |z - z_k| - \log |z_k|]$$

come il potenziale q di un campo E generato da una linea di cariche z_k che interseca il semiasse reale positivo in z_0 . La magnetizzazione m è la componente sull'asse reale del campo. Per il teorema di Gauss il flusso relativo ad un circuito chiuso che circonda la linea di cariche è diverso da zero ed è dato da $(E_2 - E_1) \cdot n$, dove n è la normale alla linea. Quindi il campo E è discontinuo.

Risultati per il modello di Ising.

Teorema 5.1.2. *L'energia libera è analitica nella regione del piano complesso $|Imh| < |Reh|$.*

Si fa vedere che se $|Imh| \leq Reh$ ($h \geq 0$) allora

$$0 < Z_{\Lambda}(h = 0) \leq Z_{\Lambda}(Reh - |Imh|) \leq |Z_{\Lambda}(h)|$$

per ogni Λ . La prima diseuguaglianza è ovvia perchè la funzione di partizione è strettamente positiva come funzione di variabile reale. Bisogna provare le altre due diseuguaglianze. Osserviamo che per riflessione di h in $-h$, poichè la funzione di partizione è invariante si ha anche

$$0 < Z_{\Lambda}(h = 0) \leq Z_{\Lambda}(-Reh - |Imh|) \leq |Z_{\Lambda}(h)|$$

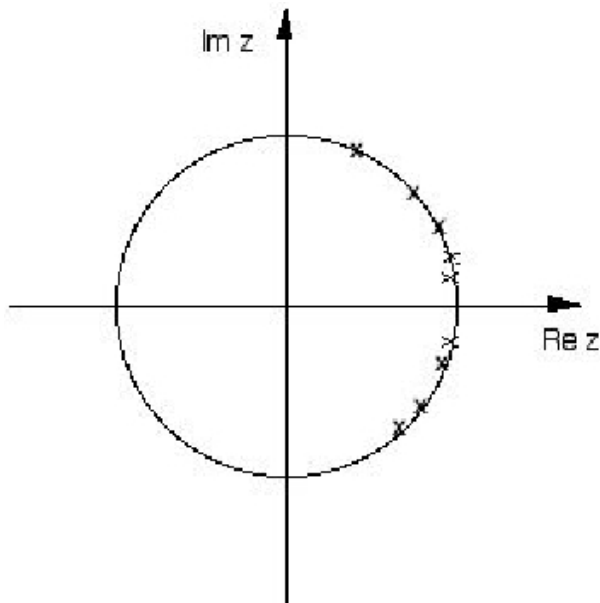


Figura 5.1

per h negativo e quindi si estende la regione priva di zeri a $|Imh| \leq -Reh$.

Per la prova introduciamo la nozione di funzione definita positiva. Consideriamo una funzione su $[0, 2\pi]^N$ $f(\theta_1 \dots \theta_N)$. f è detta definita positiva se i suoi coefficienti di Fourier sono non-negativi. Per costruzione si ha anche $f - g$ è definita positiva se $\hat{f}_k \geq \hat{g}_k$ per ogni k . Questo introduce un ordine nell'insieme delle funzioni definite positive.

L'insieme delle funzioni definite positive è un cono moltiplicativo convesso, cioè è chiuso rispetto alle operazioni di somma, prodotto, coniugazione complessa e moltiplicazione per costanti reali positive ed anche chiuso per esponenziazione. Inoltre tali operazioni (compreso l'esponenziale) preservano l'ordine.

Consideriamo un modello in cui ad ogni sito del reticolo viene associata una nuova variabile di spin σ' . In ogni sito ci sono due spin σ e σ' che non interagiscono tra loro. Gli spin σ' interagiscono a prossimi vicini come nel modello di Ising. La Hamiltoniana del nuovo modello è data da $H(\sigma) + H(\sigma')$. Si ha che

$$|Z_\Lambda(h)|^2 = \sum_{\underline{\sigma}} \sum_{\underline{\sigma}' } \exp[\beta J \sum_{(i,j)} (\sigma_i \sigma_j + \sigma'_i \sigma'_j) + \beta \sum_i (h^* \sigma_i + h \sigma'_i)]$$

Vogliamo mostrare che $G(h; \sigma, \sigma') := e^{-\beta(H+H')}$ come funzione di σ e σ' ha una serie di Fourier con coefficienti che sono positivi se $|Imh| \leq Reh$.

Introduciamo le variabili $(\sigma'_i + \sigma_i)/2 = t_i = \cos \theta_i$ e $(\sigma_i - \sigma'_i)/2 = q_i = \sin \theta_i$. Una configurazione è assegnata dando per ogni sito una variabile θ che assume i valori $0, \pi, \pm\pi/2$. Per passare alla serie di Fourier bisogna individuare le armoniche sferiche in questo caso. Poichè θ può assumere solo 4 valori, si ha che $e^{in\theta} = e^{i(n+4)\theta}$ e quindi basta usare solo 4 armoniche $e^{ik\theta}$ corrispondenti ai valori $k = 0, \pm 1, 2$. Per l'esponente nella funzione di partizione si ha

$$(\sigma_i \sigma_j + \sigma'_i \sigma'_j) = 2 \cos(\theta_i - \theta_j)$$

$$(h^* \sigma_j + h \sigma'_j) = (Reh - Imh)e^{i\theta_j} + (Reh + Imh)e^{-i\theta_j}$$

L'esponente può essere letto come una funzione definita positiva se $|Imh| < Reh$. Se adesso consideriamo il caso di campo magnetico zero, i coefficienti di Fourier di $\exp\{ \}$ nella precedente

formula saranno piú piccoli di quelli calcolati con $h > 0$. Ora osserviamo che $|Z_\Lambda(h)|^2$ è il coefficiente di Fourier di indice 0 della funzione $G(h)$ perchè è la somma sulle configurazioni θ di $G(h)$ e quindi si ha $|Z_\Lambda(h=0)|^2 \leq |Z_\Lambda(h)|^2$, per h non-negativo. Inoltre consideriamo una Z corrispondente ad un campo magnetico reale $h' = (Reh - |Imh|)$. Si ha in tal caso

$$(h'^* \sigma_i + h' \sigma'_i) = (Reh - |Imh|)(e^{i\theta} + e^{-i\theta})$$

Poichè $0 \leq Reh - |Imh| \leq Reh \pm Imh$ e l'esponenziale conserva l'ordine si hanno le relazioni d'ordine

$$G(h=0) \leq G(Reh - |Imh|) \leq G(h)$$

Tali relazioni d'ordine per definizione di funzioni definite positive implicano le disequaglianze

$$Z_\Lambda(h=0)^2 \leq Z_\Lambda(Reh - |Imh|)^2 \leq |Z_\Lambda(h)|^2$$

Per il teorema di Lee-Yang l'energia libera del modello di Ising risulta analitica all'interno della regione $|Imh| \leq |Reh|$ e quindi per h reali per ogni $h \neq 0$.

L'approccio di Lee-Yang alla teoria delle transizioni di fase è stato utile nello studio della analiticità nell'attività (o campo magnetico). L'analogo studio delle proprietà di analiticità nella temperatura è molto piú complicato e non ci sono risultati rilevanti.

5.2 Matrice di trasferimento

Il modello di ising ad una dimensione con campo esterno diverso da zero non si riesce a risolvere col metodo usato ad $h = 0$. Per $h \neq 0$ si usa il metodo detto della matrice di trasferimento. Consideriamo ora la catena di spin $\Lambda = \{1, 2, \dots, N\}$. Supponiamo che $h \neq 0$ ed imponiamo b.c. periodiche, cioè identifichiamo lo spin nel sito $N + 1$ con quello nel sito 1. La hamiltoniana del modello è

$$H_N(\sigma) = -h \sum_{i=1}^N \sigma_i - J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (5.2.1)$$

La funzione di partizione è data dalla formula

$$Z_N(\beta, h) = \sum_{\sigma} e^{\beta h \sum_{i=1}^N \sigma_i + \beta J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}} \quad (5.2.2)$$

Per calcolare la (5.2.2) utilizziamo l'ipotesi sulle b.c. e riscriviamo la funzione di partizione nella forma equivalente

$$Z_N(\beta, h) = \sum_{\sigma} \prod_{i=1}^N \left(e^{\frac{\beta h}{2} \sigma_i} e^{\beta J \sigma_i \sigma_{i+1}} e^{\frac{\beta h}{2} \sigma_{i+1}} \right) \quad (5.2.3)$$

Definiamo la matrice di trasferimento T :

$$T_{\sigma_i \sigma_{i+1}} := \exp \left(\frac{\beta h}{2} \sigma_i + \beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2} \sigma_{i+1} \right) \quad (5.2.4)$$

La matrice di trasferimento ha dimensioni 2×2 ed è simmetrica. È semplice scrivere esplicitamente i suoi elementi:

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta h + \beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{-\beta h + \beta J} \end{pmatrix} \quad (5.2.5)$$

La (5.2.3) può ora scriversi nella forma

$$Z_N(\beta, h) = \sum_{\sigma} \prod_{i=1}^N T_{\sigma_i \sigma_{i+1}} = \sum_{\sigma} T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} \dots T_{\sigma_N \sigma_1} \quad (5.2.6)$$

Si riconosce nella (5.2.6) l'espansione di una traccia, e precisamente

$$Z_N(\beta, h) = \text{Tr}(T^N) \quad (5.2.7)$$

Detti λ_+ e λ_- gli autovalori di T , allora

$$Z_N(\beta, h) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (5.2.8)$$

Se $\lambda_+ > \lambda_-$ (non c'è degenerazione: se ci fosse la matrice sarebbe proporzionale all'identità in qualunque base vettoriale), possiamo mettere in evidenza λ_+ ed ottenere

$$Z_N(\beta, h) = \lambda_+^N \left(1 + \frac{\lambda_-^N}{\lambda_+^N} \right) \quad (5.2.9)$$

L'energia libera è data semplicemente da

$$f(\beta, h) = \log \lambda_+ \quad (5.2.10)$$

Diagonalizzando la matrice T si può verificare che

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm (e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J})^{\frac{1}{2}} \quad (5.2.11)$$

Le formule (5.2.10)-(5.2.11) costituiscono la soluzione esatta del modello. L'energia libera è una funzione analitica per ogni valore finito dei parametri β ed h ; nel modello unidimensionale non c'è transizione di fase. Studiamo l'andamento delle funzioni di correlazione a due punti. Consideriamo dunque due siti i e j . Supponiamo $i < j$. Risulta

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_N(\beta, h) = \frac{1}{Z_N(\beta, h)} \sum_{\sigma} \sigma_i \sigma_j \prod_{i=1}^N T_{\sigma_i \sigma_{i+1}} \quad (5.2.12)$$

$$= \frac{1}{Z_N(\beta, h)} \sum_{\sigma_i, \sigma_j = \pm 1} \sigma_i T_{\sigma_i \sigma_j}^{j-i} \sigma_j T_{\sigma_j \sigma_i}^{N-j+i} \quad (5.2.13)$$

dove T_{ab}^n denota l'elemento di indice (a, b) dell' n -ma potenza della matrice T . Indicando con ϕ_{\pm} gli autovettori della matrice di trasferimento e sfruttando il teorema di decomposizione spettrale, possiamo scrivere

$$T_{ab}^n = \sum_{j=\pm} \lambda_j^n \phi_j(a) \phi_j(b) \quad (5.2.14)$$

In particolare, nel caso in cui $h = 0$, risulta

$$\lambda_+ = 2 \cosh(\beta J) \quad ; \quad \lambda_- = 2 \sinh(\beta J) \quad (5.2.15)$$

$$\phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (5.2.16)$$

Quindi

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_N &= \frac{1}{(\lambda_+^N + \lambda_-^N)} \sum_{\sigma_i, \sigma_j = \pm 1} \sum_{k, n = \pm} \lambda_n^{j-i} \lambda_k^{N-j+i} \phi_k(\sigma_i) \phi_n(\sigma_i) \sigma_i \phi_k(\sigma_j) \phi_n(\sigma_j) \sigma_j \\
&= \frac{1}{1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N} \sum_{k, n = \pm} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_+}\right)^{j-i} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_+}\right)^{N-j+i} (\phi_k, \sigma \phi_n)^2
\end{aligned} \tag{5.2.17}$$

dove

$$(\phi_k, \sigma \phi_n) = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \phi_k(\sigma_i) \phi_n(\sigma_i) \sigma_i \tag{5.2.18}$$

Considerando che, per i e j fissati (in assenza di degenerazione)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_+}\right)^{N-j+i} = \delta_{n,+} \tag{5.2.19}$$

e che

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N = 0 \tag{5.2.20}$$

possiamo scrivere

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle(\beta, h) = \sum_{k = \pm} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_+}\right)^{j-i} (\phi_k, \sigma \phi_+)^2 \tag{5.2.21}$$

Nel caso in cui $h = 0$, risulta

$$(\phi_k, \sigma \phi_+) = \delta_{k,-} \tag{5.2.22}$$

per cui

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle(\beta, 0) = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{j-i} = [\tanh(\beta J)]^{j-i} \tag{5.2.23}$$

Dalla (5.2.23) si riconosce che

$$\lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle(\beta, 0) = 0 \quad \forall \beta > 0 \tag{5.2.24}$$

Dunque gli spin del modello molto distanti tra loro sono scorrelati ad ogni temperatura diversa dallo zero assoluto. Allo zero assoluto gli spin assumono tutti lo stesso valore.

5.3 Caso bidimensionale e dualità

In due dimensioni il modello di Ising è esattamente risolubile soltanto per $h = 0$. Nel caso $h \neq 0$ è necessario elaborare strumenti matematici che permettano, pur in assenza di una soluzione esatta, di rivelare l'esistenza di transizioni di fase, conoscere il punto critico, etc. I metodi che studieremo nel seguito sono sostanzialmente due: le espansioni perturbative e le disuguaglianze.

Dato $L \in \mathbb{N}$ consideriamo un quadrato $\Lambda = L \times L$ bidimensionale. Se il campo magnetico esterno è nullo, l'interazione a prossimi vicini e le condizioni al bordo libere, la hamiltoniana del modello è

$$H_\Lambda(\sigma) = -J \sum_{(i,j) \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j \tag{5.3.1}$$

dove il simbolo (i, j) con $i < j$ indica che i siti i e j sono prossimi vicini (nel caso si usi la convenzione (i, j) simmetrico occorre mettere $1/2$ davanti la $\sum_{(i,j)}$). La funzione di partizione a temperatura β è

$$Z_\Lambda(\beta, 0) = \sum_{\sigma} e^{\beta J \sum_{(i,j) \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j} \quad (5.3.2)$$

Per calcolare la funzione di partizione proviamo ad utilizzare le stesse tecniche del caso unidimensionale:

$$Z_\Lambda(\beta, 0) = \sum_{\sigma} \prod_{(i,j) \in \Lambda} e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} = [\cosh(\beta J)]^{N_b} \sum_{\sigma} \prod_{(i,j) \in \Lambda} [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(\beta J)] \quad (5.3.3)$$

dove N_b denota il numero delle coppie (i, j) , cioè dei legami in Λ . Si può dimostrare facilmente che, nel caso di b.c. libere, risulta

$$N_b = 2L(L - 1) \quad (5.3.4)$$

Sviluppando il prodotto nella (5.3.3) si ottiene una somma di termini della forma

$$\sum_{\sigma} \sigma_{i_1} \sigma_{j_1} \sigma_{i_2} \sigma_{j_2} \dots \sigma_{i_k} \sigma_{j_k} [\tanh(\beta J)]^k \quad (5.3.5)$$

dei quali sopravvivono soltanto quello corrispondente a $k = 0$ e quelli per i quali il prodotto delle σ è identicamente uguale ad uno. Se sul reticolo Λ si disegnano i legami, cioè dei segmenti unitari tra i siti i_n e j_n , in corrispondenza di ogni termine del tipo (5.3.5) si ottiene un circuito, e si riconosce che i termini per i quali il prodotto delle σ è identicamente uguale ad uno sono quelli che danno origine ad un circuito chiuso. Allo scopo di formalizzare questo concetto, dato un circuito $C \subset \Lambda$, definiamo

$$\partial C := \{i \in C : \text{da } i \text{ parte un numero dispari di legami} \} \quad (5.3.6)$$

I circuiti chiusi sono formalmente quelli per cui $\partial C = \emptyset$. Se il termine (5.3.5) genera un circuito chiuso, esso dà un contributo alla funzione di partizione pari a $2^{|\Lambda|} [\tanh(\beta J)]^{|\mathcal{C}|}$. Ne segue che la funzione di partizione può essere scritta nella forma

$$Z_\Lambda(\beta, 0) = 2^{|\Lambda|} [\cosh(\beta J)]^{N_b} \sum_{C \subset \Lambda: \partial C = \emptyset} [\tanh(\beta J)]^{|\mathcal{C}|} \quad (5.3.7)$$

La somma (5.3.7) a sua volta può essere calcolata come

$$Z_\Lambda(\beta, 0) = 2^{|\Lambda|} [\cosh(\beta J)]^{N_b} \sum_{k=0}^{\infty} [\tanh(\beta J)]^k N_C(k) \quad (5.3.8)$$

dove $N_C(k)$ definisce il numero dei circuiti chiusi $C \subset \Lambda$ di lunghezza $|C| = k$. Le funzioni di correlazione si calcolano nello stesso modo. Per esempio per la funzione di correlazione a due punti, relativa ai siti i e j , eseguendo calcoli analoghi a quelli visti, possiamo scrivere

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_\Lambda (\beta, 0) = \frac{\sum_{C \subset \Lambda: \partial C = \{i,j\}} [\tanh(\beta J)]^{|\mathcal{C}|}}{\sum_{C \subset \Lambda: \partial C = \emptyset} [\tanh(\beta J)]^{|\mathcal{C}|}} \quad (5.3.9)$$

Il calcolo dei coefficienti $N_C(k)$ è un problema combinatorio irrisolto. Tali coefficienti possono tuttavia essere stimati, anche se in generale gli errori (percentuali) commessi nelle stime sono grandi. Dunque la strada intrapresa non conduce alla risoluzione del modello. Tuttavia, dalla formula (5.3.8), ci si aspetta che nel limite in cui $\beta \ll 1$ i circuiti molto lunghi diano un

contributo trascurabile, in modo che la stima della (5.3.8) si riduce alla stima dei coefficienti $N_C(k)$ per circuiti *corti*. La (5.3.8) è la formula di partenza per lo studio delle espansioni ad alta temperatura.

Un modo alternativo per calcolare la funzione di partizione (5.3.2) ha origine dall'osservare che

$$\sum_{(i,j) \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j = N_b^+(\sigma) - N_b^-(\sigma) \quad (5.3.10)$$

dove $N_b^\pm(\sigma)$ indica il numero dei legami di segno \pm presenti nella configurazione σ , cioè il numero delle coppie $(i, j) \in \Lambda$ per le quali $\sigma_i \sigma_j = \pm 1$. Osservando che

$$N_b = N_b^+(\sigma) + N_b^-(\sigma) \quad (5.3.11)$$

la funzione di partizione può essere scritta nella forma

$$Z_\Lambda(\beta, 0) = e^{\beta J N_b} \sum_{\sigma} e^{-2\beta J N_b^-(\sigma)} \quad (5.3.12)$$

Un modo diverso di riarrangiare la somma (5.3.12) è il seguente. Per ogni coppia di siti prossimi vicini (i, j) con legame negativo, si tracci sul piano Z^2 tra i siti i e j un segmento di lunghezza unitaria ortogonale alla congiungente tali siti. Se si esegue questa operazione per ogni coppia di siti prossimi vicini, si riconosce che ad ogni configurazione σ in Λ è associato un insieme di contorni, alcuni dei quali aperti (precisamente quelli che hanno lati che separano siti $(i, j) \in \partial\Lambda$ prossimi vicini con legame negativo), i quali separano le regioni in cui gli spin hanno valore $+1$ da quelle in cui essi hanno valore -1 . Viceversa assegnato un insieme di contorni dello stesso tipo di quelli ottenibili col procedimento descritto, a tale insieme corrispondono due configurazioni di spin, legate l'una all'altra da una trasformazione di *spin-flip*. Se avessimo lavorato ad un modello di Ising con b.c. \pm questo problema non si sarebbe presentato. Inoltre in questo caso tutti i contorni sarebbero chiusi. Detto

$$\Gamma(\sigma) = \{\gamma_1, \dots, \gamma_k, \lambda_1, \dots, \lambda_h\} \quad (5.3.13)$$

la famiglia di contorni associati ad una data configurazione di spin σ , γ_i il singolo contorno chiuso di questa famiglia e λ_i il singolo contorno aperto, è chiaro che, per costruzione, risulta

$$N_b^-(\sigma) = \sum_i |\gamma_i| + |\lambda_i| \quad i : \gamma_i, \lambda_i \in \Gamma(\sigma) \quad (5.3.14)$$

Definendo

$$|\Gamma(\sigma)| := \sum_i |\gamma_i| + |\lambda_i| \quad (5.3.15)$$

possiamo scrivere la (5.3.12) nella forma

$$Z_\Lambda(\beta, 0) = 2e^{\beta J N_b} \sum_{\Gamma} e^{-2\beta J |\Gamma|} \quad (5.3.16)$$

che, indicando con $C_\Gamma(k)$ il numero delle famiglie di contorni Γ di lunghezza $|\Gamma| = k$, si può ancora scrivere come

$$Z_\Lambda(\beta, 0) = 2e^{\beta J N_b} \sum_{k=0}^{\infty} C_\Gamma(k) e^{-2\beta J k} \quad (5.3.17)$$

Lo studio dei contorni è tanto complicato quanto quello dei circuiti, cosicchè neppure questo secondo metodo ci permette di arrivare alla soluzione del modello. Tuttavia dalla formula

(5.3.17) si riconosce che nel limite $\beta \gg 1$ le famiglie di contorni per cui $k \gg 1$ danno contributo trascurabile. La stima della (5.3.16) si riduce allora alla stima dei coefficienti $C_\Gamma(k)$ per famiglie di contorni *corte*. La (5.3.17) è il punto di partenza per lo studio delle espansioni a bassa temperatura.

Esiste un modo per collegare le descrizioni del modello basate sui circuiti e sui contorni. A tale scopo si consideri la seguente trasformazione, detta trasformazione di dualità. Si consideri un modello di Ising su $\Lambda = L \times L$ a temperatura β e campo esterno $h = 0$ con b.c. \pm . Data una famiglia di contorni chiusi Γ ad essa è associata una ed una sola configurazione σ . Si costruisca il reticolo \mathbb{Z}_*^2 i cui siti sono spostati di mezzo passo reticolare in direzione orizzontale e verticale rispetto ai siti in \mathbb{Z}^2 . Tale reticolo è detto *duale di \mathbb{Z}^2* . Sia $\Lambda^* \in \mathbb{Z}^2$ il quadrato di lato $L + 1$ ottenuto spostando Λ , includendo anche i siti del contorno, di mezzo passo reticolare in ogni direzione. I contorni su Λ possono essere interpretati come circuiti chiusi su Λ^* . Ne segue che

$$Z_\Lambda^\pm(\beta, 0) = e^{\beta J N_b(\pm)} \sum_{\Gamma} e^{-2\beta J |\Gamma|} = e^{\beta J N_b(\pm)} \sum_{C \subset \Lambda^* : \partial C = \emptyset} e^{-2\beta J |C|} \quad (5.3.18)$$

dove, in questo caso $N_b(\pm)$ denota il numero dei legami su Λ con b.c. \pm . Definendo la temperatura β^* mediante la relazione

$$\tanh(\beta^* J) = e^{-2\beta J} \quad (5.3.19)$$

si ottiene

$$Z_\Lambda^\pm(\beta, 0) = \frac{e^{\beta J N_b(\pm)}}{2^{|\Lambda^*|} [\cosh(\beta^* J)]^{N_b^*}} Z_{\Lambda^*}(\beta^*, 0) \quad (5.3.20)$$

dove si deve sottolineare che la funzione di partizione a primo membro si riferisce ad un modello di Ising con b.c. \pm , mentre quella a secondo membro si riferisce ad un modello con b.c. libere. Essendo

$$N_b(\pm) = N_b^* = 2L(L + 1); \quad |\Lambda^*| = (L + 1)(L + 1) \quad (5.3.21)$$

si ricava facilmente la relazione limite

$$f(\beta, 0) = \log \left(\frac{e^{2\beta J}}{2 [\cosh(\beta^* J)]^2} \right) + f(\beta^*, 0) \quad (5.3.22)$$

Nella (5.3.22) si è utilizzata la proprietà secondo cui l'energia libera non dipende dalle b.c. Interrompiamo quindi momentaneamente l'analisi per dimostrare tale proprietà.

Proposizione 5.3.1. *L'energia libera non dipende dalle condizioni al bordo.*

Dimostrazione. La dimostrazione di questa proposizione è semplice e si basa sulla disuguaglianza banale

$$e^x \leq e^{|x|} \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (5.3.23)$$

Consideriamo due modelli di Ising d -dimensionali con parametri β, h, Λ e b.c. rispettivamente libere e \pm . Risulta

$$\frac{Z_\Lambda(\beta, h)}{Z_\Lambda^\pm(\beta, h)} = \frac{\sum_{\sigma} e^{\beta h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i + \beta J \sum_{(i,j) \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j}}{\sum_{\sigma} e^{\beta h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i + \beta J \sum_{(i,j) \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j \pm \beta J \sum_{i \in \partial \Lambda} \sigma_i}} \leq e^{\beta J \max_{\sigma} |\sum_{i \in \partial \Lambda} \sigma_i|} \quad (5.3.24)$$

Inoltre

$$e^{\beta J \max_{\sigma} |\sum_{i \in \partial \Lambda} \sigma_i|} = e^{\beta J |\partial \Lambda|} \quad (5.3.25)$$

Quindi

$$f(\beta, h) \leq f^\pm(\beta, h) \quad (5.3.26)$$

Se la regione Λ è tale che

$$\lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} \frac{|\partial\Lambda|}{|\Lambda|} = 0 \quad (5.3.27)$$

condizione verificata, per esempio nel caso in cui Λ è un rettangolo d -dimensionale. Scambiando Z_Λ con Z_Λ^\pm si riconosce che la (5.3.25) continua ancora a valere, e ciò implica che il segno \leq nella (5.3.26) può essere sostituito con \geq . Ne deriva l'uguaglianza delle energie libere. \square

La (5.3.22) si interpreta riconoscendo che, se il modello esibisce una transizione di fase alla temperatura β (definizione II), esso ne esibisce un'altra alla temperatura β^* legata a β dalla (5.3.19). Imponendo, come suggerisce la teoria di campo medio, che il modello esibisca un'unica transizione di fase, alla temperatura β_c , si ottiene l'equazione

$$\tanh(\beta_c J) = e^{-2\beta_c J} \quad (5.3.28)$$

È possibile risolvere analiticamente la (5.3.28). A tale scopo basta osservare che

$$\tanh(\beta J) = \frac{e^{\beta J} - e^{-\beta J}}{e^{\beta J} + e^{-\beta J}} = \frac{1}{e^{2\beta J}} \frac{e^{2\beta J} - 1}{e^{-2\beta J} + 1} \quad (5.3.29)$$

e dunque la (5.3.28) si riduce all'equazione

$$\sinh(2\beta_c J) = 1 \quad (5.3.30)$$

che ha come soluzione

$$\beta_c J = 0.44 \quad (5.3.31)$$

La (5.3.31) costituisce un risultato esatto se riusciamo a provare che il modello esibisce un unico punto critico. Il valore trovato deve essere confrontato con quello previsto dalla teoria di campo medio

$$\beta_c J = \frac{1}{2d} = \frac{1}{4} \quad (d = 2) \quad (5.3.32)$$

Le funzioni di correlazione si trasformano per dualità nel modo seguente.

Consideriamo prima la funzione di correlazione $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ per spin prossimi vicini, $|i - j| = 1$. Il punto di partenza è la rappresentazione (5.3.9) in termini di circuiti che diventa in termini di contorni

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_\Lambda(\beta) = \frac{\sum_{\Gamma: \partial\Gamma = (i^*, j^*)} e^{-2\beta^* J |\Gamma|}}{\sum_{\Gamma} e^{-2\beta^* J |\Gamma|}} \quad (5.3.33)$$

dove (i^*, j^*) è il legame perpendicolare a (i, j) . Osserviamo ora che il numeratore può essere letto come la funzione di partizione $Z_{\Lambda^*}^-$ sul reticolo duale relativa ad una Hamiltoniana con J_{ij} positivo per tutte le coppie diverse da (i^*, j^*) e negativo per la coppia (i^*, j^*) . Il precedente rapporto può essere riscritto come

$$\frac{Z_{\Lambda^*}^-}{Z_{\Lambda^*}} = \langle e^{-2\beta^* \sigma_{i^*, j^*}} \rangle_{\Lambda^*}(\beta^*)$$

In definitiva, ricordando esplicitamente la dipendenza dalle condizioni al contorno,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_\Lambda(\beta) = \langle e^{-2\beta^* \sigma_{i^*, j^*}} \rangle_{\Lambda^*}^\pm(\beta^*)$$

Al punto di autodualità $\bar{\beta} : \bar{\beta} = \bar{\beta}^*$ se lo stato è unico si ha

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \sqrt{2} - \langle \sigma_{i^*} \sigma_{j^*} \rangle$$

perchè $\sinh 2\bar{\beta} = 1$ e $\cosh 2\bar{\beta} = \sqrt{2}$ da cui $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e questo permette di calcolare esattamente l'energia interna.

La trasformazione di dualità si generalizza ad una funzione di correlazione per siti non prossimi vicini usando l'identità $\sigma_i \sigma_j = \prod_{k=i}^{j-1} \sigma_{k,k+1}$.

Vogliamo concludere con la seguente osservazione. Il metodo di risoluzione che fa uso dei circuiti può essere applicato senza alcuna modifica al modello di Ising per $d > 2$. Il metodo che fa uso dei contorni deve essere leggermente modificato. Infatti in un modello tridimensionale non ha più senso separare le regioni contenenti spin positivi da quelle contenenti spin negativi mediante contorni. In questo caso si dovranno utilizzare superfici. In questo modo si riesce a ripetere la procedura vista nel caso bidimensionale. Tuttavia per $d > 2$ si perde la possibilità di legare i due metodi di risoluzione come abbiamo visto nell'equazione (12.6.33). Per questo motivo il modello in due dimensioni è detto *autoduale* ed è possibile individuare con esattezza il valore di β_c .

5.4 Argomento di Peierls

Il modello di Ising bidimensionale esibisce transizioni di fase. La soluzione esatta per $h = 0$, dovuta ad Onsager, consente di studiare tale fenomeno analiticamente. In questa sezione vogliamo mostrare che è possibile convincersi dell'esistenza di transizioni di fase (definizione I) anche senza conoscere la soluzione esatta. L'analisi che svolgeremo è nota come *argomento di Peierls* (1936).

Consideriamo modelli di Ising con b.c. \pm . Vale anzitutto il seguente risultato:

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda}^+(\beta, h) = - \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda}^-(\beta, -h) \quad (5.4.1)$$

Dimostriamo la (5.4.1). Risulta

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda}^+(\beta, h) = \frac{1}{Z_{\Lambda}^+(\beta, h)} \sum_{\sigma} \sigma_i e^{\beta h \sum_i \sigma_i + \beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + \beta J \sum_{i \in \partial \Lambda} \sigma_i} = \quad (5.4.2)$$

$$= - \frac{1}{Z_{\Lambda}^+(\beta, h)} \sum_{\sigma} (-\sigma_i) \times \quad (5.4.3)$$

$$\times e^{-\beta h \sum_i (-\sigma_i) + \beta J \sum_{(i,j)} (-\sigma_i)(-\sigma_j) - \beta J \sum_{i \in \partial \Lambda} (-\sigma_i)} \quad (5.4.4)$$

Definendo $\sigma' := -\sigma$ ed osservando che la somma (5.4.4) è su tutte le configurazioni, si trova

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda}^+(\beta, h) = - \frac{1}{Z_{\Lambda}^+(\beta, h)} \sum_{\sigma'} \sigma'_i e^{-\beta h \sum_i \sigma'_i + \beta J \sum_{(i,j)} \sigma'_i \sigma'_j - \beta J \sum_{i \in \partial \Lambda} \sigma'_i} = - \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda}^-(\beta, -h) \quad (5.4.5)$$

Ripetendo lo stesso ragionamento sulla funzione di partizione si ottiene

$$Z_{\Lambda}^+(\beta, h) = Z_{\Lambda}^-(\beta, -h) \quad (5.4.6)$$

e la (5.4.1) è dimostrata. Da tale relazione si deduce che per $h = 0$ l'unica possibilità affinché non si manifesti una transizione di fase è (def. I) che la magnetizzazione sia nulla con b.c. \pm . L'argomento di Peierls prova che, se β è sufficientemente grande, ciò non avviene.

Discutiamo in dettaglio l'argomento di Peierls. Consideriamo un modello di Ising con $h = 0$ e b.c. $+$. Risulta

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda}^+(\beta, 0) = 1 - 2p_{\Lambda}^+(\sigma_i = -1) \quad (5.4.7)$$

dove $p_{\Lambda}^+(\sigma_i = -1)$ denota la probabilità che nelle condizioni fissate lo spin nel sito i abbia valore $\sigma_i = -1$. Utilizziamo la descrizione del modello che fa uso dei contorni. È chiaro che se risulta $\sigma_i = -1$ in una data configurazione, necessariamente esiste un contorno che circonda σ_i . Il contrario non è vero, come si può facilmente capire considerando la configurazione in cui $\sigma_i = 1$ e $\sigma_j = -1$ dove $|j - i| = 1$. Usiamo nel seguito la notazione $\gamma \circ i$ per indicare che il contorno γ circonda il sito i . Dato allora $\gamma \circ i$, definiamo

$$A_{\gamma} := \{\Gamma : \gamma \in \Gamma\} \quad (5.4.8)$$

A_{γ} è quindi l'insieme delle famiglie di contorni contenenti γ . In virtù di quanto detto possiamo scrivere

$$p_{\Lambda}^+(\sigma_i = -1) \leq p_{\Lambda}^+\left(\bigcup_{\gamma \circ i} A_{\gamma}\right) \quad (5.4.9)$$

Inoltre

$$p_{\Lambda}^+(A_{\gamma}) = \frac{\sum_{\Gamma: \gamma \in \Gamma} e^{-2\beta J|\Gamma|}}{\sum_{\Gamma} e^{-2\beta J|\Gamma|}} \quad (5.4.10)$$

Consideriamo ora la seguente definizione. Data una famiglia di contorni Γ , diciamo che essa è compatibile con $\gamma \circ i$ se $\Gamma \cup \gamma$ definisce una differente configurazione di spin rispetto a quella associata a Γ . Ne segue che

$$p_{\Lambda}^+(A_{\gamma}) = e^{-2\beta J|\gamma|} \frac{\sum_{\Gamma \text{ comp } \gamma} e^{-2\beta J|\Gamma|}}{\sum_{\Gamma} e^{-2\beta J|\Gamma|}} \leq e^{-2\beta J|\gamma|} \quad (5.4.11)$$

In definitiva risulta

$$p_{\Lambda}^+(\sigma_i = -1) \leq \sum_{\gamma \circ i} e^{-2\beta J|\gamma|} \quad (5.4.12)$$

Definendo $N_i(k)$ come il numero dei contorni $\gamma \circ i$ di lunghezza $|\gamma| = k$, possiamo scrivere

$$p_{\Lambda}^+(\sigma_i = -1) \leq \sum_{k=0}^{\infty} N_i(k) e^{-2\beta Jk} \quad (5.4.13)$$

Una possibile stima per i coefficienti $N_i(k)$ è la seguente

$$N_i(k) \leq (2d - 1)^k k^d \quad d = \text{n.ro di dimensioni} \quad (5.4.14)$$

Da essa si ricava

$$p_{\Lambda}^+(\sigma_i = -1) \leq \sum_{k \geq 4} 3^k k^2 e^{-2\beta Jk} \quad (5.4.15)$$

La serie (5.4.15) converge rapidamente per $\beta \gg 1$ ed assume un valore arbitrariamente piccolo in questo limite. Dalla relazione (5.4.7) si riconosce che quanto più β è grande, tanto più la magnetizzazione nel sito i si approssima ad uno. In ogni caso per $\beta \gg 1$ essa è diversa

da zero, e questo prova l'esistenza di una transizione di fase (def. I). Si ha, per β tale che $0 > 2 \log k - k\alpha < -k\alpha$ e $-\alpha = \log 3 - 2\beta J$

$$\begin{aligned} p_{\Lambda}^+(\sigma_i = -1) &\leq \sum_{k \geq 4}^{\infty} \exp\{2 \log k + k(\log 3 - 2\beta J)\} \\ &\leq \sum_{k \geq 1}^{\infty} \exp\{-k\alpha\} \end{aligned}$$

Se

$$\sum_{k \geq 1}^{\infty} \exp\{-k\alpha\} = \frac{e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}} < \frac{1}{2}$$

allora $m > 0$. Quindi per $J\beta > \log 3 = 1.09$ si ha $m > 0$.

5.5 Soluzione di Onsager

Il procedimento per ottenere la soluzione esatta del modello di Ising in due dimensioni fa uso della matrice di trasferimento. Discutiamo in dettaglio tale procedimento. Consideriamo un rettangolo $\Lambda = M \times N \subset \mathbb{Z}^2$. Imponiamo b.c. periodiche :

$$\sigma_{M+1,j} = \sigma_{1,j} \quad \forall j = 1, \dots, N \quad ; \quad \sigma_{i,N+1} = \sigma_{i,1} \quad \forall i = 1, \dots, M \quad (5.5.1)$$

Se il campo magnetico esterno è nullo e l'interazione è a siti prossimi vicini, la hamiltoniana del modello è

$$H_{\Lambda}(\sigma) = -J \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1} - J \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} \quad (5.5.2)$$

La funzione di partizione è data dalla relazione

$$Z_{\Lambda}(\beta, 0) = \sum_{\sigma} \prod_{i=1}^M T_{\sigma_i \sigma_{i+1}} \quad (5.5.3)$$

dove

$$T_{\sigma_i \sigma_{i+1}} := \exp\left(\frac{\beta J}{2} \sum_{j=1}^N \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1} + \beta J \sum_{j=1}^N \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \frac{\beta J}{2} \sum_{j=1}^N \sigma_{i+1,j} \sigma_{i+1,j+1}\right) \quad (5.5.4)$$

è l'elemento di posto $\sigma_i \sigma_{i+1}$ della matrice di trasferimento T e

$$\sigma_i := \{\sigma_{i,1}, \dots, \sigma_{i,N}\} \quad (5.5.5)$$

Dalla (5.5.5) risulta chiaro che la matrice T ha dimensioni $2^N \times 2^N$. Inoltre dalla (5.5.3) risulta

$$Z_{\Lambda}(\beta, 0) = \text{Tr}(T^M) = \sum_{j=1}^{2^N} \lambda_j^M \quad (5.5.6)$$

dove λ_j denota il j -mo autovalore di T . Indichiamo con λ_1 l'autovalore massimo, che per il teorema di Perron-Frobenius è non degenere per ogni N finito. Possiamo scrivere

$$Z_{\Lambda}(\beta, 0) = \lambda_1^M \left\{ 1 + \sum_{j=2}^{2^N} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^M \right\} \quad (5.5.7)$$

L'energia libera si ottiene nel limite termodinamico $N, M \rightarrow \infty$. Possiamo eseguire il limite prima su M e poi su N :

$$f(\beta, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M \times N} \log Z_\Lambda(\beta, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \lambda_1 \quad (5.5.8)$$

Per eseguire il limite (5.5.8) è necessario diagonalizzare la matrice di trasferimento. Non discutiamo il procedimento di diagonalizzazione, dovuto ad Onsager, e riportiamo direttamente il risultato per l'autovalore λ_1 :

$$\lambda_1 = [2 \sinh(2\beta J)]^{N/2} \exp \frac{1}{2} \left(\sum_{k=0}^{N-1} l_{2k+1} \right) \quad (5.5.9)$$

dove

$$\cosh l_j := \cosh(2\beta J) \coth(2\beta J) - \cos \left(\frac{\pi j}{N} \right) \quad (5.5.10)$$

Ne segue che

$$\begin{aligned} f(\beta, 0) &= \frac{1}{2} \log [2 \sinh(2\beta J)] + \\ &+ \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \operatorname{arccosh} \left[\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J) - \cos \left(\frac{\pi(2k+1)}{N} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.5.11)$$

Nel limite $N \rightarrow \infty$ la somma che compare in (5.5.11) si risolve in un integrale (notare che la somma è solo sui dispari e che quindi l'ampiezza dell'intervallino è $2\pi/N$), per cui

$$f(\beta, 0) = \frac{1}{2} \log [2 \sinh(2\beta J)] + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\theta \operatorname{arccosh} [\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J) - \cos \theta] \quad (5.5.12)$$

Per scrivere la f in modo piú conveniente utilizziamo l'identità

$$\operatorname{arccosh} |x| = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\phi \log [2(x - \cos \phi)] \quad (5.5.13)$$

In questo modo possiamo scrivere

$$\begin{aligned} f(\beta, 0) &= \frac{1}{2} \log [2 \sinh(2\beta J)] + \frac{1}{2} \log 2 + \\ &+ \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi d\theta d\phi \log [\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J) - \cos \theta - \cos \phi] \\ &= \log 2 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi d\theta d\phi \log [\cosh^2(2\beta J) - \sinh(2\beta J)(\cos \theta + \cos \phi)] \end{aligned} \quad (5.5.14)$$

Dall'energia libera f ricaviamo l'energia interna e , mediante la relazione

$$e = \frac{\partial f}{\partial \beta} \quad (5.5.15)$$

Si ha:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\beta} \cosh(2\beta J) \coth(2\beta J) &= \frac{2J}{\sinh(2\beta J)} [2 \sinh^2(2\beta J) - \cosh^2(2\beta J)] \coth(2\beta J) \\ &= \frac{2J}{\sinh(2\beta J)} [\sinh^2(2\beta J) - 1] \coth(2\beta J) \end{aligned}$$

$$e = J \coth(2\beta J) + \frac{2J}{\sinh(2\beta J)} \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi d\theta d\phi \frac{[\sinh^2(2\beta J) - 1] \coth(2\beta J)}{[\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J) - \cos \theta - \cos \phi]^2}$$

Il risultato del calcolo è il seguente

$$e = J \coth(2\beta J) \left\{ 1 + [\sinh^2(2\beta J) - 1] \times \right. \\ \left. \times \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi d\theta d\phi \frac{1}{\cosh^2(2\beta J) - \sinh(2\beta J)(\cos \theta + \cos \phi)} \right\} \quad (5.5.16)$$

Sicuramente l'integrale (5.5.16) diverge per $\theta = \phi = 0$ se vale la condizione

$$\cosh^2(2\beta J) - 2 \sinh(2\beta J) = 0 \quad (5.5.17)$$

Si verifica facilmente che l'equazione (5.5.17) è equivalente a

$$1 + \sinh^2(2\beta J) - 2 \sinh(2\beta J) = [1 - \sinh(2\beta J)]^2 = 0 \\ \sinh(2\beta J) = 1 \quad (5.5.18)$$

La condizione (5.5.18) è identica alla (5.3.30). A priori non è possibile dire se l'integrale (5.5.16) diverga anche per altri valori di θ e ϕ e dei parametri termodinamici. È possibile tuttavia ricondurre tale integrale ad un integrale ellittico, in modo da poterlo studiare. Si può così dimostrare che l'unico punto di singolarità si ha per $\theta = \phi = 0$. Osserviamo inoltre che nella (5.5.16) l'integrale divergente è moltiplicato per un fattore che è nullo per $\beta = \beta_c$. Ne segue che la singolarità dell'integrale potrebbe essere compensata da tale fattore. Bisogna dunque studiare in che modo l'integrale (5.5.16) diverge. A tale scopo sviluppiamo le funzioni $\cos \theta$ e $\cos \phi$ nell'intorno dell'origine. Otteniamo così

$$\int_0^{\tilde{\theta}} \int_0^{\tilde{\phi}} \frac{d\theta d\phi}{\delta^2 + \frac{1}{2} \sinh(2\beta J)(\theta^2 + \phi^2)} \quad (5.5.19)$$

dove

$$\delta^2 := \cosh^2(2\beta J) - 2 \sinh(2\beta J) \quad (5.5.20)$$

Poiché l'integrale (5.5.19) dipende da θ e ϕ soltanto nella combinazione $\theta^2 + \phi^2$, possiamo adottare coordinate polari e scrivere tale integrale come

$$2\pi \int_0^{\tilde{r}} \frac{r dr}{\delta^2 + \frac{1}{2} \sinh(2\beta J)r^2} \quad (5.5.21)$$

Poichè risulta

$$\int \frac{x dx}{\delta^2 + \beta x^2} = \frac{1}{2\beta} \log(\delta + \beta x^2) \quad (5.5.22)$$

ne segue che l'integrale (5.5.19) diverge come

$$\frac{4\pi}{\sinh(2\beta J)} \log \delta \quad (5.5.23)$$

Inoltre si verifica facilmente che

$$\delta^2 = [\sinh(2\beta J) - 1]^2 \quad (5.5.24)$$

cosicchè, essendo

$$\lim_{x \rightarrow 0} x \log x = 0 \quad (5.5.25)$$

la singolarità dell'integrale (5.5.16) è perfettamente compensata. In particolare per valori di β prossimi a β_c , l'integrale (5.5.16) riceve un unico contributo per $\theta = \phi = 0$, cosicchè possiamo scrivere

$$e \sim -J \coth(2\beta_c J) [1 + A(\beta - \beta_c) \log(\beta - \beta_c)] \quad (5.5.26)$$

Il calore specifico ha una singolarità nel limite $\beta \rightarrow \beta_c$. Infatti

$$C \sim \frac{\partial e}{\partial \beta} \sim \log(\beta - \beta_c) \quad (5.5.27)$$

La divergenza di C in $\beta = \beta_c$ rivela definitivamente l'esistenza di una transizione di fase in $\beta = \beta_c$.

Prima di esaminare l'esistenza di magnetizzazione spontanea studiando le funzioni di correlazione, enunciamo il teorema di Perron-Frobenius per matrici finito-dimensionali.

Definizione Una matrice A è detta essere riducibile se esiste una permutazione di colonne e righe che la trasforma in una matrice della forma

$$\begin{pmatrix} B & C \\ 0 & D \end{pmatrix}$$

con B e D matrici quadrate.

Teorema 5.5.1 (Teorema di Perron-Frobenius). *Sia A una matrice simmetrica irriducibile $n \times n$ con elementi A_{ij} non negativi e sia λ il suo massimo autovalore. Valgono le seguenti proprietà :*

1. $\lambda > 0$
2. la corrispondente autofunzione ψ ha tutte le componenti ψ_j positive.
3. λ non è degenere

Dimostrazione. Poichè la somma degli autovalori è non negativa (è la traccia di A) deve essere $\lambda \geq 0$. Sia u un autovettore corrispondente a λ . Allora

$$0 \leq \lambda \leq (u, Au) \leq (|u|, A|u|) \leq \lambda$$

dove u è il vettore di componenti $|u_i|$ e l'ultima disuguaglianza segue dal fatto che $\lambda = \sup_v (v, Av)$. Quindi anche $|u|$ è un autovettore corrispondente a λ . Se λ è uguale a zero, allora deve essere $A_{ij} = 0$ a meno che $|u_i| = 0$ per qualche i . per permutazione degli indici

$$|u_i| > 0, i = 1, \dots, m \quad |u_i| = 0 \quad i > m$$

Allora $A|u| = 0$ e $A_{ij} = 0$ se $j \leq m$ e quindi A è riducibile. Quindi $\lambda > 0$.

Per provare che u è positivo, supponiamo $u_i = 0$ per qualche i , quindi come sopra $|u_i| > 0, i = 1, \dots, m \quad |u_i| = 0 \quad i > m$ e

$$\sum_{j=1}^m A_{ij} u_j = 0, i > m$$

e questo implica $A_{ij} = 0$ per $i > m$ e la matrice è riducibile. Infine, se λ è degenere, esistono due autovettori u, v ortonormali corrispondenti a λ . Scriviamo

$$\lambda(u + |u|) = A(u + |u|)$$

che implica per ogni i

$$u + |u| = 0, \text{ oppure } u + |u| > 0,$$

e lo stesso per v . Quindi u e v non possono essere ortogonali. \square

Osservazione 5.5.1. *Una matrice con elementi tutti positivi è irriducibile. Quindi il teorema si applica alla matrice di trasferimento.*

Il calcolo delle funzioni di correlazione a due punti è molto simile a quello discusso nel modello unidimensionale. Consideriamo per esempio due siti appartenenti alla stessa colonna (i, j) e $(i + r, j)$. Risulta

$$\begin{aligned} & \langle \sigma_{i,j} \sigma_{i+r,j} \rangle_{M \times N} (\beta, 0) = \\ &= \frac{1}{\text{Tr}(T^M)} \sum_{\sigma} \sigma_{i,j} \sigma_{i+r,j} \prod_{i=1}^M T_{\sigma_i \sigma_{i+1}} = \frac{1}{\text{Tr}(T^M)} \sum_{\sigma} \sigma_{i,j} \sigma_{i+r,j} T_{\sigma_1 \sigma_2} \dots T_{\sigma_M \sigma_1} \\ &= \frac{1}{\text{Tr}(T^M)} \sum_{\sigma_i, \sigma_{i+r}} \sigma_{i,j} T_{\sigma_i \sigma_{i+r}}^r \sigma_{i+r,j} T_{\sigma_{i+r} \sigma_i}^{M-r} \end{aligned} \quad (5.5.28)$$

Secondo la formula di decomposizione spettrale

$$T_{\sigma\tau}^n = \sum_{j=1}^{2^N} \lambda_j^n \phi_j(\sigma) \phi_j(\tau) \quad (5.5.29)$$

da cui

$$\begin{aligned} & \langle \sigma_{i,j} \sigma_{i+r,j} \rangle_{M \times N} (\beta, 0) \\ &= \frac{1}{\text{Tr}(T^M)} \sum_{\sigma_i, \sigma_{i+r}} \sum_{k,n=1}^{2^N} \lambda_k^r \lambda_n^{M-r} \phi_k(\sigma_i) \phi_n(\sigma_i) \sigma_{i,j} \phi_k(\sigma_{i+r}) \phi_n(\sigma_{i+r}) \sigma_{i+r,j} \\ &= \frac{1}{\text{Tr}(T^M)} \sum_{k,n=1}^{2^N} \lambda_k^r \lambda_n^{M-r} (\phi_k, \sigma \phi_n)_j^2 \end{aligned} \quad (5.5.30)$$

dove

$$(\phi_k, \sigma \phi_n)_j := \sum_{\sigma_i} \phi_k(\sigma_i) \sigma_{i,j} \phi_n(\sigma_i) \quad (5.5.31)$$

Sfruttando la (5.5.7) si ottiene

$$\langle \sigma_{i,j} \sigma_{i+r,j} \rangle_{M \times N} (\beta, 0) = \frac{1}{1 + \sum_{j=2}^{2^N} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1}\right)^M} \sum_{k,n=1}^{2^N} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1}\right)^r \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^{M-r} (\phi_k, \sigma \phi_n)_j^2 \quad (5.5.32)$$

Poichè per r, N fissati risulta (per il teorema di Perron-Frobenius)

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^{M-r} = \delta_{n,1} \quad (5.5.33)$$

ne segue che

$$\langle \sigma_{i,j} \sigma_{i+r,j} \rangle_N (\beta, 0) = \sum_{k=1}^{2^N} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1}\right)^r (\phi_k, \sigma \phi_1)_j^2 \quad (5.5.34)$$

Il procedimento di diagonalizzazione della matrice T mostra che

$$\phi_1(\sigma) = \phi_1(-\sigma) \quad (5.5.35)$$

Infatti, se ϕ_1 è una autofunzione anche $S\phi_1$ lo è, dove S è l'operatore di spin-flip, perchè S commuta con la matrice di trasferimento. Poichè λ_1 è un autovalore semplice deve necessariamente essere $\phi_1 = S\phi_1$. Dunque

$$\langle \sigma_{i,j} \sigma_{i+r,j} \rangle_N (\beta, 0) = \sum_{k=2}^{2^N} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1} \right)^r (\phi_k, \sigma \phi_1)_j^2 \quad (5.5.36)$$

Inoltre è possibile dimostrare che nel limite $N \rightarrow \infty$ l'autovalore λ_1 è non degenere per $\beta < \beta_c$ e degenere per $\beta > \beta_c$. Quindi

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_{i,j} \sigma_{i+r,j} \rangle_N (\beta, 0) \begin{cases} = 0 & \text{se } \beta < \beta_c \\ \neq 0 & \text{se } \beta > \beta_c \end{cases} \quad (5.5.37)$$

Osservazione 5.5.2. *La teoria di campo medio prevede un comportamento del calore specifico al più discontinuo in $\beta = \beta_c$. Ne segue che l'esponente critico previsto da tale teoria è sbagliato. È possibile ricavare i principali esponenti critici dalla soluzione di Onsager con tecniche che non discuteremo. Riportiamo soltanto i risultati, confrontandoli con quelli previsti dalla teoria di campo medio.*

$$C \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\alpha \quad m \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta \quad \chi \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-\gamma}$$

$$\langle \sigma_0 \sigma_r \rangle \sim r^{-d+2-\eta} \quad \xi \sim (T - T_c)^{-\nu} \quad m \sim h^{\frac{1}{\delta}}$$

$$\alpha \quad \beta \quad \gamma \quad \delta \quad \eta \quad \nu$$

<i>sol.esatta</i>	0	1/8	7/4	15	1/4	1
<i>teoria c.m.</i>	<i>disc.</i>	1/2	1	3	0	1/2

Capitolo 6

Metodi Non Perturbativi - Disuguaglianze

6.1 Disuguaglianze di correlazione.

In un ferromagnete ci si aspetta che gli spin siano correlati positivamente. Ad esempio, per quella a due punti si dovrebbe avere

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_C \geq 0 \quad (6.1.1)$$

Si provano disuguaglianze piú generali di queste. Consideriamo un modello di Ising generalizzato, con interazioni non solo a prossimi vicini

$$-H = \sum_A J_A \sigma_A \quad (6.1.2)$$

con A un sottinsieme di \mathbb{Z}^d e $\sigma_A = \prod_{j \in A} \sigma_j$. Ad esempio nel caso di Ising in campo esterno c'è una interazione a due corpi, quindi $A = (i, j)$ e accoppiamento $J_{i,j}$, e un'interazione ad un corpo, $A = i$ e $J_i = h_i$. Per Hamiltoniane ferromagnetiche, cioè tali che $J_A \geq 0$ per ogni A valgono le disuguaglianze ferromagnetiche, dette anche GKS dai nomi Griffiths, Kelly, Sherman

Teorema 6.1.1. *Sia $-H = \sum_A J_A \sigma_A$ e $J_A \geq 0$ per ogni A . Allora per ogni volume finito si ha*

$$1) \quad \langle \sigma_B \rangle \geq 0 \quad \text{per ogni } B \in \mathbb{Z}^d \quad (6.1.3)$$

$$2) \quad \langle \sigma_B \sigma_C \rangle - \langle \sigma_B \rangle \langle \sigma_C \rangle \geq 0 \quad \text{per ogni } B, C \in \mathbb{Z}^d \quad (6.1.4)$$

Dimostrazione. La prima disuguaglianza è la piú facile da provare. Infatti sviluppando l'esponenziale in serie di potenze di β si ha

$$\langle \sigma_B \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\sigma}} \sigma_B e^{-\beta H} = \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\sigma}} \sigma_B \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \left(\sum_A J_A \sigma_A \right)^n$$

Il valor medio di σ_A è così riscritto in termini di somme sulle configurazioni di polinomi nelle σ della forma $\sigma_B \sigma_A \sigma_{A'} \cdots$ che sono positive o nulle. Poichè i coefficienti dipendono da J_A che sono tutti positivi, si ottiene il risultato.

Per dimostrare la seconda disuguaglianza osserviamo che dobbiamo calcolare termini del tipo prodotti di somme sulle configurazioni $\sum_{\underline{\sigma}} e^{-\beta H(\underline{\sigma})} \sum_{\underline{\sigma}'} e^{-\beta H(\underline{\sigma}')}$ e per questo è utile cambiare variabile e usare invece di σ e σ'

$$\tau^+ = \frac{1}{2}(\sigma + \sigma'), \quad \tau^- = \frac{1}{2}(\sigma - \sigma') \quad (6.1.5)$$

Prima però osserviamo che

$$\langle \sigma_B \sigma_A \rangle - \langle \sigma_B \rangle \langle \sigma_A \rangle = \langle \sigma_A (\sigma_B - \sigma'_B) \rangle^D$$

dove a destra l'attesa è presa rispetto alla misura generata dall'Hamiltoniana "duplicata"

$$\sum_C J_C [\sigma_C + \sigma'_C]$$

Si può pensare di questo modello come un modello in cui in ogni sito ci sono due variabili di spin σ e σ' che non interagiscono, per cui valgono le identità

$$\langle \sigma_B \sigma_A \rangle = \langle \sigma_B \sigma_A \rangle^D, \quad \langle \sigma_B \sigma'_A \rangle^D = \langle \sigma_B \rangle \langle \sigma_A \rangle \quad (6.1.6)$$

Usando le variabili τ^+ e τ^- si ha

$$\langle \sigma_A (\sigma_B - \sigma'_B) \rangle^D = \frac{1}{2^{|A|+|B|}} \langle (\tau^+ + \tau^-)_A [(\tau^+ + \tau^-)_B - (\tau^+ - \tau^-)_B] \rangle \quad (6.1.7)$$

dove $|A|$ è il numero di elementi in A e $\tau_A^\pm = \prod_{i \in A} \tau_i^\pm$. Esaminiamo i singoli fattori in (6.1.7):

$$(\tau^+ + \tau^-)_A = \sum_{b_i=0,1} \prod_{i \in A} \tau_i^{+1-b_i} \tau_i^{-b_i}$$

È un polinomio nelle τ^\pm a coefficienti positivi. Inoltre

$$(\tau^+ - \tau^-)_A = \sum_{b_i=0,1} \prod_{i \in A} \tau_i^{+1-b_i} \tau_i^{-b_i} (-1)^{\sum_{i \in A} b_i}$$

Di conseguenza la differenza fra i due termini

$$(\tau^+ + \tau^-)_B - (\tau^+ - \tau^-)_B = \sum_{b_i=0,1} \prod_{i \in B} \tau_i^{+1-b_i} \tau_i^{-b_i} [1 + (-1)^{\sum_{i \in B} b_i}]$$

è anch'esso un polinomio a coefficienti positivi. Per concludere l'argomento basta far vedere che la media di un generico prodotto di $\tau^+{}^\ell$ e $\tau^-{}^k$ è positiva, con ℓ e k interi

$$\sum_{\tau^\pm = -1, 0, 1} (\tau_i^+)^{\ell} (\tau_i^-)^k e^{-\beta H(\underline{\tau})}$$

Rimane da valutare il segno di termini del tipo seguente

$$\sum_{\tau^\pm = -1, 0, 1} (\tau_i^+)^{\ell} (\tau_i^-)^k$$

Se ℓ, k sono entrambi pari i prodotti sono positivi.

Negli altri casi basta osservare che $\sum_{\tau = \pm 1, 0} \tau^\ell \geq 0$ per concludere che questi termini sono sempre positivi. In conclusione tutte le attese dei prodotti sono positive, i coefficienti dei polinomi sono positivi e così è provata la seconda disuguaglianza. \square

Prova alternativa della seconda disuguaglianza

Esiste una corrispondenza biunivoca tra le configurazioni σ e i sottinsiemi di \mathbb{R}^d :

$$\sigma \rightarrow A = \{x : \sigma(x) = -1\}$$

Dato $\sigma_B = \prod_{x \in B} \sigma_x$ si ha che il valore di σ_B nella configurazione A è dato da

$$\sigma_B(A) = (-1)^{|B \cap A|} = \sigma_A(B)$$

Valgono le seguenti identità:

$$\sigma_B(A)\sigma_C(A) = (-1)^{|B \cap A|}(-1)^{|C \cap A|} = (-1)^{|(B \Delta C) \cap A|} = \sigma_{B \Delta C}(A)$$

dove $B \Delta C = (B \cup C) - (B \cap C)$ è la differenza simmetrica di B e C ,

$$\sigma_B(C)\sigma_B(A) = (-1)^{|B \cap C| + |B \cap A|} = \sigma_B(C \Delta A)$$

$$\begin{aligned} Z^2(\langle \sigma_B \sigma_C \rangle - \langle \sigma_B \rangle \langle \sigma_C \rangle) &= \\ &= \sum_A \exp\{\beta \sum_D J_D \sigma_D(A)\} \sum_{A'} \sigma_{B \Delta C}(A') \exp\{\beta \sum_D J_D \sigma_D(A')\} \\ &- \sum_A \sigma_B(A) \exp\{\beta \sum_D J_D \sigma_D(A)\} \sum_{A'} \sigma_C(A') \exp\{\beta \sum_D J_D \sigma_D(A')\} \\ &= \sum_{A, A'} [\sigma_{B \Delta C}(A') - \sigma_B(A)\sigma_C(A')] \exp\{\beta \sum_D J_D [\sigma_D(A) + \sigma_D(A')]\} \end{aligned}$$

Sia $M = A \Delta A'$ e $S = B \Delta C$. Si ha che

$$\begin{aligned} [\sigma_D(A) + \sigma_D(A')] &= \sigma_D(A')\sigma_D(A')\sigma_D(A) + \sigma_D(A') = \sigma_D(A')[1 + \sigma_D(M)] \\ \sigma_B(A)\sigma_C(A') &= \sigma_B(A)\sigma_B(A')\sigma_B(A')\sigma_C(A') = \sigma_B(M)\sigma_S(A') \end{aligned}$$

da cui

$$Z^2(\langle \sigma_B \sigma_C \rangle - \langle \sigma_B \rangle \langle \sigma_C \rangle) = \sum_M [1 - \sigma_B(M)] \left[\sum_{A'} \sigma_S(A') \exp\{\beta \sum_D J_D \sigma_D(A') [1 + \sigma_D(M)]\} \right]$$

Per ogni M il termine nella parentesi quadra è l'attesa di $\sigma_S(A')$ (moltiplicato per Z) rispetto ad una Hamiltoniana con interazione $J_D \sigma_D(A') [1 + \sigma_D(M)] \geq 0$ quindi per la prima disuguaglianza è non negativa. Anche il fattore $[1 - \sigma_B(M)]$ è non negativo da cui il risultato.

6.2 Applicazioni.

Crescenza in β delle funzioni di correlazione

Le funzioni di correlazione connesse sono collegate a derivate dell'energia libera. Consideriamo l'Hamiltoniana

$$-H = \sum_A J_A \sigma_A, \quad J_A \geq 0 \text{ per ogni } A \quad (6.2.1)$$

Si ha che

$$\langle \sigma_B \sigma_A \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle \sigma_B \rangle}{\partial J_A} \quad (6.2.2)$$

Poichè le GKS valgono per questa classe di Hamiltoniane, si ha che le funzioni di correlazione sono crescenti negli accoppiamenti ferromagnetici J_A . Poichè si può sempre scrivere la derivata rispetto a β di una funzione di correlazione $\langle \sigma_B \rangle$ qualsiasi come derivata rispetto a βJ_A per β volte la derivata rispetto a J_A si ha usando le GKS che

$$\frac{\partial \langle \sigma_B \rangle}{\partial \beta} \geq 0$$

Monotonicità nel volume delle funzioni di correlazione

Consideriamo l'Hamiltoniana (6.2.1). Sia $\langle \sigma_B \rangle_\Lambda$ la media di σ_B con condizioni al contorno libere in Λ . Confrontiamola con la media su un volume più piccolo Λ' (si pensa $B \subset \Lambda'$). Si ha che

$$\langle \sigma_B \rangle_\Lambda \geq \langle \sigma_B \rangle_{\Lambda'} \quad (6.2.3)$$

In altri termini le medie con condizioni al contorno libere di osservabili cilindriche sono crescenti nel volume. Per provarlo usiamo le GKS che valgono per questo modello. $\langle \sigma_B \rangle_{\Lambda'}$ può essere pensata come una media rispetto ad una differente Hamiltoniana $H_{\Lambda'}$ che differisce da H_Λ per il fatto di avere $J'_A = 0$ per A non in Λ' e $J'_A = J_A$ per $A \subset \Lambda$, cioè ha zero gli accoppiamenti fuori di Λ' e in Λ non differisce da H . Quindi gli accoppiamenti J'_A relativi a $H_{\Lambda'}$ sono minori o uguali dei J_A e per la crescita rispetto a J_A delle funzioni di correlazione si ottiene la (6.2.3).

Consideriamo ora il caso di condizioni al contorno positive (tutti + all'esterno di Λ) $\langle \sigma_B \rangle_\Lambda^+$ e confrontiamola con $\langle \sigma_B \rangle_{\Lambda'}^+$ con $\Lambda' < \Lambda$. In questo caso la funzione di correlazione risulta decrescente nel volume cioè

$$\langle \sigma_B \rangle_\Lambda^+ \leq \langle \sigma_B \rangle_{\Lambda'}^+ \quad (6.2.4)$$

Si può ragionare come prima e considerare $\langle \sigma_B \rangle_{\Lambda'}^+$ come la media rispetto ad una Hamiltoniana $H_{\Lambda'}$ con $J'_A = J_A$ in Λ e un campo magnetico positivo infinitamente grande sugli spin in Λ/Λ' che costringe tutti questi spin ad essere uguali a +1. Formalmente si può pensare ad un termine di campo esterno $h_i, i \in \Lambda/\Lambda'$ e una delta nella misura $\delta(h_i = \infty)$. Confrontando le costanti di accoppiamento nelle due Hamiltoniane si ottiene così $J'_A \geq J_A$ e la 6.2.4 usando le GKS.

Condizioni al contorno

Nello stesso modo si possono confrontare attese di osservabili rispetto a differenti condizioni al contorno (di tipo positivo), perchè le condizioni al contorno + risultano in un termine di campo esterno positivo nell'Hamiltoniana. Si ha così che le condizioni al contorno + dominano tutte le altre nel senso che

$$\langle \sigma_B \rangle_\Lambda^+ \geq \langle \sigma_B \rangle_\Lambda^y \quad (6.2.5)$$

con y un'altra qualsiasi condizione al contorno che non implichi l'apparire di campi esterni negativi. La simmetria di spin flip per le funzioni di correlazione dispari permette di ottenere le disequaglianze opposte

$$\langle \sigma_B \rangle_\Lambda^z \geq \langle \sigma_B \rangle_\Lambda^-$$

dove ora z è una qualsiasi condizione al contorno che non implichi l'apparire di campi esterni positivi e $|B|$ è dispari. Le disequaglianze GKS non permettono di trattare altre condizioni al contorno.

Crescenza nelle dimensioni

Consideriamo l'Hamiltoniana (6.2.1) e vediamo come variano i valori medi relativi al variare delle dimensioni spaziali. Sia $d' < d$ e $\langle \sigma_B \rangle$ l'attesa di σ_B con b.c. libere. Per quanto detto sopra le Hamiltoniane in differenti dimensioni differiscono per il fatto che col crescere delle dimensioni si aggiungono interazioni ferromagnetiche. Quindi

$$\langle \sigma_B \rangle(d) \geq \langle \sigma_B \rangle(d') \quad (6.2.6)$$

Una conseguenza della (6.2.6) è che se per un certo valore di β a dimensione d' si ha magnetizzazione spontanea, $\langle \sigma_I \rangle^+ \neq 0$, poichè

$$\langle \sigma_i \rangle^+(\beta, d) \geq \langle \sigma_i \rangle^+(\beta, d')$$

si ha anche $\langle \sigma_i \rangle^+(\beta, d) \neq 0$. In altre parole, se c'è transizione di fase ad una fissata dimensione c'è transizione di fase per il modello in tutte le dimensioni più grandi. Inoltre il valore del β al quale appare la magnetizzazione spontanea, chiamiamolo β_c diminuisce con le dimensioni.

Un'altra conseguenza è un bound esponenziale dal basso per la funzione a due punti. Infatti

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle(d) = \left\langle \prod_{k=i}^{j-1} \sigma_k \sigma_{k+1} \right\rangle(d) \geq \prod_{k=i}^{j-1} \langle \sigma_k \sigma_{k+1} \rangle(d) \geq \prod_{k=i}^{j-1} \langle \sigma_k \sigma_{k+1} \rangle(d') \quad (6.2.7)$$

dove le GKS sono state usate nella seconda e nella terza diseuguaglianza. Ad esempio nel modello di Ising è facile valutare $\langle \sigma_k \sigma_{k+1} \rangle$ ad una dimensione e si ottiene così per la (6.2.7)

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle(d) \geq \exp -|i - j|\alpha$$

con $\alpha = |\log \tan h\beta J|$.

Proprietà di clustering

Teorema 6.2.1. *Sia H l'Hamiltoniana ferromagnetica (6.2.1). Allora le misure $+$ e $-$ hanno la proprietà di clustering*

$$\lim_{d(A,B) \rightarrow \infty} \langle \sigma_A \sigma_B \rangle_C^\pm = 0 \quad (6.2.8)$$

dove A e B sono sottinsiemi di Z^D , $d(A, B) = \min_{i \in A, j \in B} |i - j|$.

Dimostrazione. Esaminiamo prima lo stato $+$. Per le GKS è vero che $\langle \sigma_A \sigma_B \rangle_C^+ \geq 0$. Provando la diseuguaglianza inversa per separazione infinita di A e B si prova la (6.2.8). In un volume finito Λ tracciamo una linea L che separi A da B e fissiamo gli spin su questa linea uguali a $+1$. Chiamiamo μ^* la misura con b.c. $+$ condizionata al fatto che gli spin sulla linea siano $+$ e le attese corrispondenti $\langle \cdot \rangle^*$. Per le GKS si ha

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle_\Lambda^+ \leq \langle \sigma_A \sigma_B \rangle_\Lambda^* \quad (6.2.9)$$

Poichè gli spin su L sono fissati si ha che rispetto alla misura μ^* gli spin in Λ_1 sono indipendenti dagli spin in Λ_2 . Quindi la funzione di correlazione fattorizza

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle_\Lambda^* = \langle \sigma_A \rangle_{\Lambda_1}^+ \langle \sigma_B \rangle_{\Lambda_2}^+ \quad (6.2.10)$$

A destra appaiono le medie con b.c. $+$ perchè nelle regioni Λ_1 e Λ_2 gli spin sul contorno sono $+1$. Mettendo insieme (6.2.9) e (6.2.10) si ha

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle_\Lambda^+ \leq \langle \sigma_A \rangle_{\Lambda_1}^+ \langle \sigma_B \rangle_{\Lambda_2}^+ \quad (6.2.11)$$

Prendendo il limite per Λ che va all'infinito il membro di sinistra della (6.2.11) dà $\langle \sigma_A \sigma_B \rangle^+$. D'altro canto anche Λ_1 e Λ_2 diventano infinitamente grandi. Se adesso prendiamo anche il limite per $d(A, B)$ che diventa infinitamente grande si ha che A e B non sono vicini al contorno L e si può considerare in $\langle \sigma_A \rangle_{\Lambda_1}^+$ σ_A come una osservabile al finito mentre il contorno di Λ_1 si allontana indefinitamente da A nel limite termodinamico. In altri termini

$$\lim_{d(A,B) \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \langle \sigma_A \rangle_{\Lambda_1}^+ \langle \sigma_B \rangle_{\Lambda_2}^+ = \langle \sigma_A \rangle^+ \langle \sigma_B \rangle^+$$

e quindi si ha la (6.2.8) per lo stato $+$. Per lo stato $-$ basta usare le proprietà di simmetria per spin flip nella 6.2.8 scritta per b.c. positive. \square

La proprietà di clustering implica che le fasi \pm sono ergodiche e quindi pure. La proprietà di clustering non è vera per uno stato miscela. Se ad esempio prendiamo b.c. libere possiamo scrivere la misura associata come una combinazione convessa con $\alpha = 1/2$ dello stato $+$ e dello stato $-$

$$\langle \cdot \rangle = \frac{1}{2}[\langle \cdot \rangle^+ + \langle \cdot \rangle^-]$$

per cui

$$\lim_{d(A,B) \rightarrow \infty} \langle \sigma_A \sigma_B \rangle = \frac{1}{2}[\langle \sigma_A \rangle^+ \langle \sigma_B \rangle^+ + \langle \sigma_A \rangle^- \langle \sigma_B \rangle^-] \neq 0$$

che è diverso da zero per $T < T_c$.

6.3 Le disuguaglianze F.K.G.

Una importante serie di risultati relativi al modello di Ising è legata ad un teorema dimostrato nel 1971 da Fortuin, Kasteleyn, Ginibre e noto come Teorema F.K.G. Non dimostriamo il teorema nè lo enunciamo nella sua forma più generale: esso si applica ad una vasta classe di modelli, ma le uniche applicazioni che consideriamo sono relative al modello di Ising.

Definizione Sia $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$. Per ogni $\sigma, \sigma' \in C(\Lambda)$ diciamo

$$\sigma \prec \sigma' \quad \text{se} \quad \sigma_i \leq \sigma'_i \quad \forall i \in \Lambda \quad (6.3.1)$$

Definizione Sia $f : C(\Lambda) \rightarrow \mathbb{R}$. f è detta un'osservabile crescente su Λ se

$$f(\sigma) \leq f(\sigma') \quad \forall \sigma \prec \sigma' \quad (6.3.2)$$

Un esempio di osservabile crescente è il seguente: $f(\sigma) = \sigma_i$.

Una misura di probabilità è detta avere la **proprietà F.K.G.** se per ogni coppia f, g di osservabili crescenti si ha che

$$\langle fg \rangle_\Lambda(\beta, h) \geq \langle f \rangle_\Lambda(\beta, h) \langle g \rangle_\Lambda(\beta) \quad (6.3.3)$$

per ogni coppia f, g di osservabili uno crescente e l'altro decrescente

$$\langle fg \rangle_\Lambda(\beta, h) \leq \langle f \rangle_\Lambda(\beta, h) \langle g \rangle_\Lambda(\beta) \quad (6.3.4)$$

La condizione (6.3.3) può anche essere formulata in termini di probabilità di eventi. Un insieme di configurazioni A è detto crescente (decrescente) se la sua funzione caratteristica è crescente (decrescente). (6.3.3) e (6.3.4) diventano

$$\mu(A \cap B) \geq \mu(A)\mu(B), \quad A, B \text{ crescenti o decrescenti} \quad (6.3.5)$$

$$\mu(A \cap B) \leq \mu(A)\mu(B), \quad A, B \text{ uno crescente e l'altro decrescente} \quad (6.3.6)$$

Per quanto riguarda il modello di Ising si prova che

Teorema 6.3.1. Sia $\mu_\Lambda(\beta, h, J)$ la misura di Gibbs su Λ , con parametri $\beta, h := \{h_i\}_{i \in \Lambda}$, $J := \{J_{ij}\}_{i, j \in \Lambda}$ tale che $\sum_{k \in \mathbb{Z}^d} J_{0k} < \infty$, associata alla hamiltoniana

$$H_\Lambda(\sigma) := - \sum_{i \in \Lambda} h_i \sigma_i - \sum_{i, j \in \Lambda} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (6.3.7)$$

Si ha che per tale misura vale la proprietà FKG per ogni valore di $\beta \geq 0$, per ogni h e per ogni J tale che $J_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \in \Lambda$.

L'importanza del teorema F.K.G. è legata, come si vedrà, alla totale assenza di condizioni sul campo magnetico esterno h che permette di considerare anche valori negativi per h e quindi per le condizioni al contorno. Mostriamo alcune conseguenze di tale proprietà.

Correlazione positiva per osservabili crescenti

Dati $i, j \in \Lambda$ e considerata $\langle \sigma_i \rangle_\Lambda(\beta, h)$ come funzione di h_j , vale la seguente relazione

$$\frac{\partial}{\partial h_j} \langle \sigma_i \rangle_\Lambda(\beta, h) \geq 0 \quad (6.3.8)$$

per ogni valore di $\beta \geq 0$, per ogni h e per ogni condizione al contorno.

La dimostrazione della (6.3.8) segue dal teorema F.K.G. Infatti

$$\frac{\partial}{\partial h_j} \langle \sigma_i \rangle_\Lambda(\beta, h) = \quad (6.3.9)$$

$$= \frac{\beta}{Z_\Lambda(\beta, h)} \sum_{\sigma} \sigma_i \sigma_j e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)} - \frac{\beta}{Z_\Lambda^2(\beta, h)} \sum_{\sigma, \sigma'} \sigma_i e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)} \sigma'_j e^{-\beta H_\Lambda(\sigma')} = \quad (6.3.10)$$

$$= \beta \left\{ \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_\Lambda(\beta, h) - \langle \sigma_i \rangle_\Lambda(\beta, h) \langle \sigma_j \rangle_\Lambda(\beta, h) \right\} \geq 0 \quad (6.3.11)$$

Una conseguenza della (6.3.11), letta come crescita nel campo magnetico, è che per una generica condizione al contorno y si ha

$$\langle \sigma_i \rangle_\Lambda^+ \geq \langle \sigma_i \rangle_\Lambda^y \geq \langle \sigma_i \rangle_\Lambda^- \quad (6.3.12)$$

Torniamo infine al problema delle transizioni di fase. Si può provare che la derivata prima dell'energia libera rispetto al campo magnetico è discontinua se e solo se la magnetizzazione spontanea è diversa da zero (Lebowitz- Martin-Loef).

Proposizione 6.3.1. *Dato $i \in Z^d$ e posto*

$$\langle \sigma_i \rangle^+(\beta, h) := \lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle_\Lambda^+(\beta, h)$$

risulta

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \langle \sigma_i \rangle^+(\beta, h) = \langle \sigma_i \rangle^+(\beta, 0) \quad (6.3.13)$$

$$\lim_{h \rightarrow 0^-} \langle \sigma_i \rangle^-(\beta, h) = \langle \sigma_i \rangle^-(\beta, 0) \quad (6.3.14)$$

Dimostrazione. Dimostriamo la (6.3.13). Dati $\Lambda, \Lambda' \subset Z^d$ tali che $\Lambda \subset \Lambda'$ e $i \in \Lambda$, per la decrescenza nel volume con condizioni al contorno $+$ si ha

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda'}^+(\beta, h) \leq \langle \sigma_i \rangle_\Lambda^+(\beta, h) \quad (6.3.15)$$

Passando al limite $\Lambda' \rightarrow \infty$

$$\langle \sigma_i \rangle^+(\beta, h) \leq \langle \sigma_i \rangle_\Lambda^+(\beta, h) \quad (6.3.16)$$

Prendiamo il limite $h \rightarrow 0^+$ di entrambi i lati della disuguaglianza e osserviamo che il termine a destra è continuo in h perchè siamo a volume finito. Quindi

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \langle \sigma_i \rangle^+(\beta, h) \leq \langle \sigma_i \rangle_\Lambda^+(\beta, 0) \quad (6.3.17)$$

Passando al limite termodinamico

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \langle \sigma_i \rangle^+(\beta, h) \leq \langle \sigma_i \rangle^+(\beta, 0) \quad (6.3.18)$$

Viceversa per GKS (crescenza in h) si ottiene

$$\langle \sigma_i \rangle_\Lambda^+(\beta, h) \geq \langle \sigma_i \rangle_\Lambda^+(\beta, 0) \quad (6.3.19)$$

Passando al limite termodinamico e poi al limite $\lim_{h \rightarrow 0^+}$

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \langle \sigma_i \rangle^+(\beta, h) \geq \langle \sigma_i \rangle^+(\beta, 0) \quad (6.3.20)$$

La (6.3.13) è così dimostrata.

Nel caso di condizioni al contorno – si usa la simmetria di spin flip. \square

Siano $\frac{\partial f}{\partial h^\pm}(\beta, h)$ le derivate destra e sinistra dell'energia libera rispetto al campo magnetico esterno. Risulta

$$\frac{\partial f}{\partial h^\pm}(\beta, h) = \langle \sigma_i \rangle^\pm(\beta, h) \quad (6.3.21)$$

per ogni valore di $\beta \geq 0$ e per ogni h .

In conclusione la rottura spontanea di simmetria è equivalente alla non analiticità dell'energia libera in h .

Inoltre se la magnetizzazione spontanea è zero lo stato è unico. Perchè lo stato sia unico basta provare che tutte le funzioni di correlazione sono indipendenti dalla condizioni al contorno. Consideriamo l'osservabile

$$\sum_{i \in A} \sigma_i - \sigma_A, \quad A \in \mathbb{Z}^d$$

È facile vedere che questa osservabile è crescente nel senso delle FKG. Quindi vale la disuguaglianza

$$\sum_{i \in A} \langle \sigma_i \rangle^+ - \langle \sigma_A \rangle^+ \geq \sum_{i \in A} \langle \sigma_i \rangle^- - \langle \sigma_A \rangle^-$$

che implica

$$\langle \sigma_A \rangle^+ - \langle \sigma_A \rangle^- \leq \sum_{i \in A} [\langle \sigma_i \rangle^+ - \langle \sigma_i \rangle^-]$$

In conclusione, se $\langle \sigma_i \rangle^+ = \langle \sigma_i \rangle^-$ si ha anche $\langle \sigma_A \rangle^+ = \langle \sigma_A \rangle^-$ per ogni A .

6.4 La disuguaglianza di Simon.

La seguente disuguaglianza è dovuta a B. Simon ed è valida per un modello di spin a valori interi ed interazione a coppie di range finito.

$$\langle \sigma_x \sigma_y \rangle \leq \sum_{z \in B} \langle \sigma_x \sigma_z \rangle \langle \sigma_z \sigma_y \rangle \quad (6.4.1)$$

dove B è un qualsiasi insieme che separa x da y , cioè una linea che connette x e y deve intersecare B .

Esiste una versione più forte di questa disuguaglianza dovuta a Lieb

$$\langle \sigma_x \sigma_y \rangle \leq \sum_{z \in B} \langle \sigma_x \sigma_z \rangle_A \langle \sigma_z \sigma_y \rangle \quad (6.4.2)$$

dove A è la componente connessa del reticolo che contiene x e B .

Discutiamo una conseguenza di questa disuguaglianza che riguarda la valutazione del punto critico.

Sia B l'insieme degli spin sul perimetro di un quadrato di lato L centrato nell'origine. Iteriamo la (6.4.2)

$$\langle \sigma_0 \sigma_y \rangle \leq \sum_{z \in B} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_A \sum_{z' \in B'} \langle \sigma_{z'} \sigma_y \rangle \langle \sigma_z \sigma_{z'} \rangle_{A'}$$

con B' definito come B ma centrato in z . Si continua ad iterare fino a che non si raggiunge y , quindi il numero di iterazioni è $k = \frac{|x-y|}{L}$. Si ha che

$$\langle \sigma_0 \sigma_y \rangle \leq \left[\sum_{z \in B} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_A \right]^k \quad (6.4.3)$$

Se $\sum_{z \in B} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_A = \alpha < 1$ la (6.4.3) implica il decadimento esponenziale per la funzione di correlazione. Sia $\bar{\beta}$ tale che $\sum_{z \in B} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_A = 1$. I valori di $\beta \leq \bar{\beta}$ non sono punti critici e $\bar{\beta}$ è una stima dal basso del punto critico. Se per B scegliamo i prossimi vicini dell'origine si ha

$$\sum_{|z|=1} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle < 1$$

Per GKS nel modello di Ising

$$2d \tanh(\beta J) \leq \sum_{|z|=1} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle$$

e quindi $\bar{\beta} = \frac{1}{2dJ} = \beta_c^{c.m.}$ che è il valore del punto critico nella teoria di campo medio e si ritrova il risultato noto $\beta_c^{c.m.} \leq \beta_c$.

Inoltre si ha che il decadimento a potenza con esponente p tale che $p + 1 > d$ implica il decadimento esponenziale. Infatti scegliamo per B il perimetro di un quadrato di lato r

$$\sum_{z \in B} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle \approx r^{d-1} \langle \sigma_0 \sigma_r \rangle < 1$$

Di conseguenza se $\langle \sigma_0 \sigma_r \rangle \approx r^{-p}$ con $p \geq d - 1$ il decadimento è esponenziale.

Diamo ora un argomento che permette di costruire un algoritmo per la valutazione numerica del punto critico.

Sia B_r una successione di perimetri di quadrati di lato r e sia A_r la successione di componenti connesse contenenti 0 e B_r . Sia β_c^r definito da

$$\sum_{z \in B_r} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_{A_r}(\beta_c^r) = 1 \quad (6.4.4)$$

Si ha che $\beta_c^r \leq \beta_c$ per la crescita in β delle correlazioni. Si indica con β_c il valore di β per cui il decadimento non è piú esponenziale. Sia $\beta < \beta_c$, allora per tale valore di β il decadimento è ancora esponenziale e si ha

$$\sum_{z \in B_r} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_{A_r} \leq \sum_{z \in B_r} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle \approx r^{d-1} \langle \sigma_0 \sigma_r \rangle \approx r^{d-1} e^{-\frac{r}{\xi}}$$

in modo che

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sum_{z \in B_r} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_{A_r} = 0$$

D'altro canto per la (6.4.4) si ha che a partire da un N in poi

$$\sum_{z \in B_n} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_{A_n}(\beta_c^n) > \sum_{z \in B_n} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_{A_n}(\beta). \quad n \geq N$$

che implica $\beta_c^n > \beta$.

In conclusione poichè il β scelto è arbitrario e minore di β_c e $\beta_c^n < \beta_c$ si ha che

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \beta_c^r = \beta_c$$

Considerando volumi crescenti e valutando al calcolatore i corrispondenti β_c^r si hanno approssimazioni del vero punto critico.

Capitolo 7

Espansioni ad Alta e Bassa Temperatura

7.1 Equazioni ricorsive: alta temperatura.

Consideriamo il modello di Ising a prossimi vicini

$$-H = J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j$$

Per la aspettazione di $\sigma_M = \prod_{i \in M} \sigma_i$ vale la seguente identità

$$\langle \langle \sigma_j \rangle^Y \sigma_{M/j} \rangle = \langle \sigma_M \rangle \quad (7.1.1)$$

dove j è un sito di M arbitrario. M/j è l'insieme M privato del sito j . $\langle \sigma_j \rangle^Y$ è l'aspettazione condizionata ad una fissata configurazione Y dei siti che interagiscono con j cioè i suoi prossimi vicini. La (7.1.1) è vera per la seguente proprietà delle attese condizionate: l'attesa dell'attesa condizionata coincide con l'attesa.

La (7.1.1) è il punto di partenza nella costruzione di equazioni ricorsive per le funzioni di correlazione del modello di Ising. Infatti possiamo calcolare esplicitamente $\langle \sigma_j \rangle^Y$ come funzione della fissata configurazione Y dei prossimi vicini di j .

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j \rangle^Y &= \frac{\sum_{s_j = \pm 1} s_j e^{\beta J \sum_{k:|k-j|=1} s_j \sigma_k}}{\sum_{s_j = \pm 1} e^{\beta J \sum_{k:|k-j|=1} s_j \sigma_k}} \\ &= \tan h(\beta J \sum_{k:|k-j|=1} \sigma_k) \end{aligned} \quad (7.1.2)$$

Ogni funzione delle σ si può riscrivere in termini dei polinomi delle σ e per la tangente iperbolica si ha

$$\tan h(\beta J \sum_{k:|k-j|=1} \sigma_k) = \sum_{A \subset D} g(A) \sigma_A \quad (7.1.3)$$

dove D è l'insieme dei siti prossimi vicini di j , A un suo sottinsieme, compresi l'insieme vuoto e D , $\sigma_A = \prod_{i \in A} \sigma_i$. Infine

$$g(A) = \frac{1}{2^{2d}} \sum_{\sigma'} \tan h(\beta J \sum_{k \in D} \sigma'_k) \sigma'_A \quad (7.1.4)$$

Ad esempio, in una dimensione D è costituito di due siti σ_{k-1} e σ_{k+1} . La funzione da sviluppare è $\tan h[\beta J(\sigma_{k+1} + \sigma_{k-1})]$ che è una funzione di due variabili. I polinomi fondamentali nelle σ in tal caso sono

$$1, \sigma_{k+1}, \sigma_{k-1}, \sigma_{k+1}\sigma_{k-1}$$

Le $g(A)$ sono

$$g(\emptyset) = \frac{1}{4} \sum_{\sigma_{k+1}=\pm 1} \sum_{\sigma_{k-1}=\pm 1} \tan h[\beta J(\sigma_{k-1} + \sigma_{k+1})] = 0$$

$$g(k-1) = g(k+1) = \frac{1}{2} \tan h 2\beta J; \quad g(k-1, k+1) = 0$$

In definitiva

$$\tan h[\beta J(\sigma_{k-1} + \sigma_{k+1})] = \frac{1}{2}[\sigma_{k-1} + \sigma_{k+1}] \tan h 2\beta J$$

Usando la rappresentazione per la tangente iperbolica (7.1.3) nella 7.1.1 si ha

$$\langle \sigma_M \rangle = \sum_{A \subset D} g(A) \langle \sigma_{M' \Delta A} \rangle \quad (7.1.5)$$

dove $M' = M/j$, $M' \Delta A$ indica la differenza simmetrica tra l'insieme A e M' . La differenza simmetrica appare perchè se un sito k appartiene ai due insiemi appare nella funzione di correlazione come $\sigma_k^2 = 1$.

Nella (7.1.5) M è un insieme arbitrario, diverso dall'insieme vuoto, per cui al variare di M si ottengono delle equazioni lineari nelle funzioni di correlazione. La funzione a M siti è collegata alle funzioni di correlazione ad un sito in meno, e a quelle con più siti fino a $D - 1$ siti in più rispetto a M in generale.

Ritorniamo all'esempio in una dimensione. Consideriamo il caso $M = i, i + 1$, due siti consecutivi. Si ha

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle = \frac{1}{2} \tan h 2\beta J [\langle \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \rangle + 1] \quad (7.1.6)$$

Altro caso: $M = \sigma_i \sigma_{i+2}$.

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle = \frac{1}{2} \tan h 2\beta J [\langle \sigma_{i-1} \sigma_{i+2} \rangle + \langle \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} \rangle]$$

In entrambi gli esempi il sito eliminato è stato il sito i , ma la scelta è arbitraria.

Riscriviamo in forma compatta le equazioni ricorsive per le funzioni di correlazione. Introduciamo uno spazio di Banach i cui elementi sono i vettori u così definiti

$$u = \{u_M\}_{M \in \mathbb{Z}^d}, \quad u_M = \langle \sigma_M \rangle \quad (7.1.7)$$

L'insieme dei vettori u è l'insieme dei possibili stati di equilibrio a volume infinito. Esso costituisce uno spazio vettoriale a dimensione infinita. Infatti, $(u + u')_M = \langle \sigma_M \rangle_\mu + \langle \sigma_M \rangle_{\mu'} = \langle \sigma_M \rangle_{\bar{\mu}}$ with $\bar{\mu} = \mu + \mu'$. La "componente" del vettore u di indice M è il valore di aspettazione di σ_M . Quindi u rappresenta dal punto di vista fisico un possibile stato del sistema. Muniamo questo spazio di una norma

$$\|u\| = \sup_{M \in \mathbb{Z}^d} |u_M| \quad (7.1.8)$$

Lo spazio così ottenuto è completo e quindi è uno spazio di Banach.

Sia u_0 il vettore di componenti

$$u_0(M) = \begin{cases} 1 & \text{if } M = \emptyset \\ 0 & \text{if } M \neq \emptyset. \end{cases} \quad (7.1.9)$$

Scelto un ordine sul reticolo, ad esempio quello lessicografico, sia S un operatore dallo spazio di Banach in sè definito da

$$(Su)(\emptyset) = 0 \quad (7.1.10)$$

$$(Su)(M) = \sum_{A \subset D} g(A)u(M' \Delta A), \quad M \neq \emptyset \quad (7.1.11)$$

M' è l'insieme M privato del primo sito in ordine lessicografico.

Le equazioni ricorsive si scrivono come

$$u = u_0 + Su \quad (7.1.12)$$

L'introduzione del vettore u_0 è dovuta al fatto che le equazioni non sono omogenee, cioè può apparire un termine noto, indipendente dalla funzione di correlazione, come nell'esempio precedente, equazione (7.1.6), c'è il termine 1 nel secondo membro. Il fatto di porre $(Su)(\emptyset) = 0$ è una conseguenza del fatto che le equazioni ricorsive sono state introdotte partendo da una funzione di correlazione relativa ad almeno un sito.

Se S è un operatore di contrazione esiste un'unica soluzione delle equazione (7.1.12). S è un operatore di contrazione se

$$\|S\| = \sup_v \frac{\|Sv\|}{\|v\|} < 1 \quad (7.1.13)$$

Equivalentemente S è un operatore di contrazione se $\sup_{u: \|u\|=1} \|Su\| < 1$. La norma di S è data da

$$\|S\| = \sup_{u: \|u\|=1} \sup_M \left| \sum_{A \subset D} g(A)u(M' \Delta A) \right| \leq \left| \sum_{A \subset D} g(A) \right|$$

Perchè S sia un operatore di contrazione è sufficiente che

$$\left| \sum_{A \subset D} g(A) \right| = \left\| \sum_{A \subset D} \frac{1}{2^{2d}} \sum_{\sigma} \tan h[\beta J \sum_{k \in D} \sigma_k] \sigma_A \right\| < 1$$

Usando le stime $\sigma_A \leq 1$ e $\sum_{k \in D} \sigma_k \leq 2d$ si ha

$$\|S\| \leq 2^{2d} \tan h[\beta J 2d] \quad (7.1.14)$$

dove 2^{2d} è la stima del numero di sottinsiemi di D . Infatti il numero dei sottinsiemi di un insieme costituito da K elementi è dato da

$$\frac{\sum_{i=0}^k (N-i)}{i} = 2^k$$

In conclusione la norma di S è minore di 1 se

$$\beta J < \frac{1}{2d} \arctan h \frac{1}{2^{2d}} \quad (7.1.15)$$

L'intervallo di β (7.1.15) in cui c'è unicità dello stato è molto piccolo. Ad esempio a due dimensioni si ottiene $\beta_{max} J = 0.0624$ da confrontare con il valore del punto critico $\beta_c J = 0.44$, o anche con il valore dato dall'approssimazione di campo medio per il $\beta_c J$ che è 0.25.

In tale intervallo esiste ed è unica la soluzione di (7.1.12) ed è espressa sotto forma di serie, che si ottiene iterando la (7.1.12)

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} S^n u_0 \quad (7.1.16)$$

La (7.1.16) è una serie di potenze in $\tan h\beta J$. Quindi quando la serie è convergente si ha l'analiticità in β di tutte le funzioni di correlazione. Inoltre si possono ottenere valori approssimati per le funzioni di correlazione troncando la serie.

Infine le equazioni ricorsive permettono anche di ottenere il decadimento delle funzioni di correlazione, sempre nella regione di convergenza della serie. Infatti, iterando k volte la 7.1.12 si ha

$$u = u_0 + Su_0 + \dots + S^{k-1}u_0 + S^k u \quad (7.1.17)$$

Consideriamo la componente di indice M del vettore u , $u(M)$ con $M \subset \mathbb{Z}^d$, e usiamo la (7.1.17)

$$u(M) = u_0(M) + (Su_0)(M) + \dots + (S^{k-1}u_0)(M) + (S^k u)(M) \quad (7.1.18)$$

Osserviamo che, detto m il numero di passi necessario per vuotare l'insieme M , si ha che i primi m termini in (7.1.18) sono nulli (si sceglie quindi $k > m$). Infatti ogni applicazione dell'operatore S toglie un sito ad M , quindi per vuotare l'insieme M occorrono almeno m applicazioni di S . Se ad esempio $M = i$, j m è dato dalla distanza $|i - j|$. In altre parole $(S^j u_0)(M)$, con $j < m$, sarà una combinazione lineare di termini del tipo $u_0(B)$ con B diverso dall'insieme vuoto e poichè $u_0(A) = 0$ se $A \neq \emptyset$ si ha $(S^j u_0)(M) = 0$. Tenendo conto di questa osservazione la (7.1.18) con $k = m$ dà

$$u(M) = (S^m u)(M) \quad (7.1.19)$$

da cui

$$u(M) \leq \sup_M |(S^m u)(M)| \leq \|S^m u\| \leq \|S\|^m \leq e^{-\alpha m} \quad (7.1.20)$$

con $\alpha = -\log[2^{2d} \tan h\beta J 2d]$. La (7.1.20) dice che $u(M)$ decade esponenzialmente con m . Se si considera la funzione di correlazione a due punti il numero di passi necessari per vuotare l'insieme costituito dalla catena di siti che va da i a j è la distanza $|i - j|$ per cui si ottiene il decadimento con la distanza della funzione di correlazione

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \leq e^{-\alpha|i-j|} \quad (7.1.21)$$

7.2 Equazioni ricorsive: basse temperatura.

Le configurazioni di spin sono in corrispondenza biunivoca con le configurazioni di contorni (per condizioni al contorno \pm). Una configurazione di contorni è indicata con Γ , il singolo contorno da γ , e $\Gamma = \{\gamma_1 \dots \gamma_N\}$. È preferibile introdurre dei contorni non intersecantisi. Per fare questo gli angoli dei contorni sono smussati in modo che i contorni non si toccano. I contorni possono essere separati in diversi modi: si procede in modo da ottenere il piú alto numero di contorni e il piú lunghi possibile dopo la separazione. La funzione di partizione in termini delle variabili di contorni si scrive

$$Z = \sum_{\Gamma} \exp\{-2\beta \sum_i \gamma_i\} \quad (7.2.1)$$

Quindi il peso di ogni configurazione è $\exp\{-2\beta \sum_i \gamma_i\}$ e il sistema è equivalente ad un gas di contorni interagenti: l'interazione è di tipo geometrico e consiste nel vincolo di non intersezione per i contorni.

Ricaviamo ora delle equazioni ricorsive per le funzioni di correlazione di contorni che ammettono una unica soluzione per grandi β .

Sia $B(\gamma_1 \dots \gamma_s)$ l'insieme delle configurazioni Γ tali che $\gamma_1 \dots \gamma_s \in \Gamma$. La misura di tali insieme è per definizione la funzione di correlazione a s contorni

$$\rho(\gamma_1 \dots \gamma_s) = \mu(B(\gamma_1 \dots \gamma_s)) = \frac{1}{Z} \sum_{\Gamma: \gamma_1 \dots \gamma_s \in \Gamma} \exp\{-2\beta \sum_i \gamma_i\} \quad (7.2.2)$$

Sia $\bar{B}^{\gamma_1}(\gamma_2 \dots \gamma_s)$ l'insieme delle configurazioni che si ottengono da $B(\gamma_1 \dots \gamma_s)$ rovesciando il segno degli spin dentro il contorno γ_1 , cioè le configurazioni Γ cui appartengono i contorni $(\gamma_2 \dots \gamma_s)$ e tali che non ci sia nessun contorno che si interseca con γ_1 . Si ha la relazione

$$\bar{B}^{\gamma_1}(\gamma_2 \dots \gamma_s) = B(\gamma_2 \dots \gamma_s) - \bigcup_{\delta \approx \gamma_1} B(\delta \gamma_2 \dots \gamma_s) \quad (7.2.3)$$

dove \approx significa intersecante. Si usa anche chiamare due contorni non intersecantisi compatibili, e non compatibili se invece si intersecano.

Posto $\mu(\gamma_i) = \exp\{-2\beta \gamma_i\}$, osserviamo che

$$\begin{aligned} \mu(B(\gamma_1 \dots \gamma_s)) &= \frac{1}{Z} \sum_{\Gamma: \gamma_1 \dots \gamma_s \in \Gamma} \mu(\gamma_i) = \\ &= \frac{1}{Z} \mu(\gamma_1) \sum_{\Gamma: \gamma_1 \dots \gamma_s \in \Gamma} \prod_{i \neq 1} \mu(\gamma_i) = \mu(\gamma_1) \mu(\bar{B}^{\gamma_1}(\gamma_2 \dots \gamma_s)) \end{aligned} \quad (7.2.4)$$

che si può riscrivere, posto $\bar{\rho}_s(\gamma_2 \dots \gamma_s) = \mu(\bar{B}^{\gamma_1}(\gamma_2 \dots \gamma_s))$, come

$$\rho_s(\gamma_1 \dots \gamma_s) = \mu(\gamma_1) \bar{\rho}_s(\gamma_2 \dots \gamma_s) \quad (7.2.5)$$

Dalla (7.2.5) segue che

$$\rho_s(\gamma_1 \dots \gamma_s) \leq \mu(\gamma_1)$$

Ripetendo l'argomento precedente rovesciando gli spin nel contorno γ_2 si arriva a

$$\rho_s(\gamma_1 \dots \gamma_s) \leq \mu(\gamma_1) \mu(\gamma_2)$$

Iterando ancora si ha che

$$\rho_s(\gamma_1 \dots \gamma_s) \leq \prod_{i=1}^s \mu(\gamma_i) \quad (7.2.6)$$

Partendo dalla relazione (7.2.3) si possono ricavare delle relazioni tra le funzioni di correlazione corrispondenti a differenti insiemi di contorni. Per questo occorre avere una espressione per la misura dell'unione di insiemi. Usiamo l'identità

$$\mu\left(\bigcup_{i=1}^N A_i\right) = \sum_{k=1}^N \frac{(-1)^{k+1}}{k!} \sum_{\{i_1 \dots i_k\}} \mu(A_{i_1} \cap \dots \cap A_{i_k}) \quad (7.2.7)$$

la somma $\sum_{\{i_1 \dots i_k\}}$ va intesa su tutte le k -ple di interi, in modo che, ad esempio, compaiono sia il set $\{1, 2\}$ che il set $\{2, 1\}$. Usando il fatto che

$$B(\gamma_2 \dots \gamma_s, \gamma_{i_1}) \cap B(\gamma_2 \dots \gamma_s, \gamma_{i_2}) = \begin{cases} B(\gamma_2 \dots \gamma_s, \gamma_{i_1}, \gamma_{i_2}) \\ \emptyset & \text{se } \gamma_{i_1} \approx \gamma_{i_2}. \end{cases} \quad (7.2.8)$$

(la seconda è vera perchè non ci può essere una configurazione di contorni Γ in cui due contorni si intersecano) si ottiene

$$\bigcup_{\delta \approx \gamma_1} B(\delta \gamma_2 \dots \gamma_s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} \sum_{\{\bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}\}}^* \mu(B(\gamma_2 \dots \gamma_s, \bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k})) \quad (7.2.9)$$

La somma \sum^* è fatta sulle k -ple $\{\bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}\}$ tali che $\bar{\gamma}_{i_j} \sim \bar{\gamma}_{i_k}$ per ogni coppia j, k e inoltre $\bar{\gamma}_{i_j} \approx \gamma_1$ per ogni j , cioè i contorni aggiunti devono essere compatibili fra loro (oltre che con $\gamma_2 \dots \gamma_s$), in modo che $\gamma_2 \dots \gamma_s, \bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}$ costituisca una configurazione di contorni non intersecantisi, e non compatibili con γ_1 .

Scrivendo la (7.2.3) per le misure degli insiemi e usando la (7.2.9) si ha

$$\bar{\rho}_s(\gamma_1 \dots \gamma_s) = \rho_{s-1}(\gamma_2 \dots \gamma_s) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} \sum_{\{\bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}\}}^* \rho_{s+k-1}(\gamma_2 \dots \gamma_s, \bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k})$$

e infine

$$\rho_s(\gamma_1 \dots \gamma_s) = \mu(\gamma_1) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \sum_{\{\bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}\}}^* \rho_{s+k-1}(\gamma_2 \dots \gamma_s, \bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}) \quad (7.2.10)$$

Per $s = 1$ $\rho_{s+k-1}(\gamma_2 \dots \gamma_s, \bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k})$ va inteso come $\rho_k(\bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k})$.

Introduciamo lo spazio di Banach i cui elementi sono $u = \{\rho_s(\gamma_1 \dots \gamma_s)\}$ al variare di s e del set di contorni, con norma

$$\|u\| = \sup_s \sup_{\{\gamma_1 \dots \gamma_s\}} \frac{\rho_s(\gamma_1 \dots \gamma_s)}{\prod_{i=1}^s e^{-c|\gamma_i|}}, \quad c > 0 \quad (7.2.11)$$

Sia V l'operatore definito da

$$(Vu)(\emptyset) = 0$$

$$(Vu)(\gamma_1 \dots \gamma_s) = \mu(\gamma_1) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} \sum_{\{\bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}\}}^* \rho_{s+k-1}(\gamma_2 \dots \gamma_s, \bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}) \quad (7.2.12)$$

Sia inoltre u_0 il vettore

$$u_0(\gamma_1 \dots \gamma_s) = \begin{cases} 1 & \text{se } s = 0 \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (7.2.13)$$

Le equazioni (7.2.10) assumono la forma

$$u = u^0 + Vu \quad (7.2.14)$$

Stimiamo la norma di V :

$$\begin{aligned} \frac{(Vu)(\gamma_1 \dots \gamma_s)}{\prod_{i=1}^s e^{-c|\gamma_i|}} &\leq \frac{\mu(\gamma_1)}{e^{-c|\gamma_1|}} \prod_{i=1}^s \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \\ &\sum_{\{\bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}\}}^* \rho_{s+k-1}(\gamma_2 \dots \gamma_s, \bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}) \frac{\prod_{j=1}^k e^{-c|\gamma_{i_j}|}}{\prod_{i=2}^s e^{-c|\gamma_i|} \prod_{j=1}^k e^{-c|\gamma_{i_j}|}} \\ &\leq \|u\| \frac{\mu(\gamma_1)}{e^{-c|\gamma_1|}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \sum_{\{\bar{\gamma}_{i_1} \dots \bar{\gamma}_{i_k}\}}^* \prod_{j=1}^k e^{-c|\gamma_{i_j}|} \end{aligned} \quad (7.2.15)$$

Questa diseguaglianza implica che

$$\begin{aligned} \|V\| &\leq e^{-(2\beta-c)|\gamma_1|} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} \left[\sum_{\delta \sim \gamma_1} e^{-c|\delta|} \right]^k \\ &= e^{-(2\beta-c)|\gamma_1|} \exp \left[\sum_{\delta \sim \gamma_1} e^{-c|\delta|} \right] \end{aligned} \quad (7.2.16)$$

Ragionando come nel caso dell'argomento di Peierls si ottiene una stima per la somma in (7.2.16)

$$\sum_{\delta \sim \gamma_1} e^{-c|\delta|} \leq q|\gamma_1| \sum_{p=1}^{\infty} e^{-cp} (2d-1)^p \quad (7.2.17)$$

dove $q < 1$ e il termine $q|\gamma_1|$ conta il numero di punti in cui un dato contorno può intersecare γ_1 .

In conclusione si ha

$$\|V\| \leq \exp -|\gamma_1| \left[2\beta - c - \frac{1}{1 - (2d-1)e^{-c}} \right] \quad (7.2.18)$$

con $(2d-1)e^{-c} < 1$. Affinchè V sia una contrazione è sufficiente che

$$2\beta - c - \frac{1}{1 - (2d-1)e^{-c}} > 0$$

Si ha che V è una contrazione per $\beta > \beta_0$, dove

$$\beta_0 = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1 - (2d-1)e^{-c}} + c \right]$$

Per $c \approx 2$ in $d = 2$ si ha $\beta_0 \approx 3$.

Nell'intervallo $[\beta_0, \infty)$ si ha che esiste un'unica soluzione delle equazioni ricorsive, ma in questo caso non significa che esiste un'unica misura di equilibrio, perchè sono state fissate le condizioni al contorno. Inoltre le funzioni di correlazione sono esprimibili come serie di potenze in $e^{-2\beta}$ e quindi sono analitiche nella temperatura. Le funzioni di correlazione di spin nello stato \pm si possono ricostruire a partire dalle funzioni di correlazione di contorni. Ad esempio per la magnetizzazione si ha

$$\langle \sigma_0 \rangle^+ = 1 - 2\mu(E_0)$$

dove E_0 è l'evento: esiste un contorno che circonda l'origine per cui $E_0 = \cup_i E(\gamma_i)$, dove $E(\gamma_i)$ è l'evento: esiste il contorno γ_i . Si ha che

$$\mu(E_0) = \mu(\cup_i E(\gamma_i)) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} \sum_{\{\gamma_{i_1} \dots \gamma_{i_k}\}}^* \rho_k(\gamma_{i_1} \dots \gamma_{i_k})$$

Si può far vedere che dall'analiticità delle ρ_s segue l'analiticità dell'energia libera.

Capitolo 8

Altri Modelli

8.1 Modello gaussiano

Questo modello è una variazione del modello di Ising che si differenzia dall'originale per il fatto che è a spin continuo e non discreto (modello non limitato) ed è caratterizzato dal fatto di essere risolubile in modo non approssimato. Prendiamo ancora una volta un reticolo ma, anzichè assegnare ad ogni sito $i \in \mathbb{Z}^d$ una variabile di spin che può assumere solo i due valori $\sigma = \pm 1$, ne assegniamo una del tipo:

$$s_i \in \mathbb{R}, \forall i \in \mathbb{Z}^d$$

Se con tale definizione per lo spin andiamo a considerare una interazione a prossimi vicini, troviamo che l'hamiltoniana di questo sistema continuo risulta essere formalmente identica a quella del modello di Ising, ed infatti, in essa, compare il termine di interazione più un eventuale termine di campo esterno, e cioè è della forma

$$-H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j + \sum_i h_i s_i$$

dove J_{ij} , che definisce l'interazione spin-spin, è data da

$$J_{ij} := J(|i - j|) = \begin{cases} J & \text{se } |i - j| = 1 \text{ ed } i \neq j \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Una volta definita la probabilità di singolo spin (cioè la probabilità che il sito i abbia spin s_i) come:

$$P(s_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{s_i^2}{2}}$$

ovvero una distribuzione di tipo gaussiano, possiamo scrivere la funzione di partizione:

$$Z_N = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N P(s_i) ds_i e^{-\beta H}$$

la cui forma integrale rende il modello esattamente risolubile.

Remark. Si può considerare un modello più generale che interpola tra i due, in cui

$$P(s_i) = \exp\left\{-\frac{s_i^2}{2} + g(s_i^2 - 1)\right\}$$

Per $g = 0$ si riottiene il modello Gaussiano, per $g = \infty$ si ottiene una delta $\delta(1 - s_i^2)$ e quindi il modello di Ising.

Manipoliamo la precedente espressione per Z_N riassorbendo il termine $P(s_i)$ nell'esponenziale e scrivendola come:

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N ds_i \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{i,j} G_{ij} s_i s_j + \beta \sum_i h_i s_i\right\}$$

con

$$G_{ij} = -\beta J_{ij} + \delta_{ij} = \beta B$$

con G matrice simmetrica reale e positiva (la condizione di positività degli autovalori di B è fondamentale per la convergenza dell'integrale che stiamo studiando) dove il termine δ_{ij} viene dal prodotto: $s_l s_k = (s_l)^2$ in cui $l = k$. La condizione di positività e' violata per $\beta > \beta_c = \frac{1}{2dJ}$. Infatti, una forma quadratica D e' definita positiva se $\sum_{ij} D_{ij} u_i u_j \geq 0$ per ogni scelta di u_ℓ . In particolare, consideriamo la matrice G e $u_\ell = 1$. Si ha

$$\sum_{ij} (-\beta J_{ij} + \delta_{ij}) = \sum_i (-\beta 2dJ + 1) = N(-\beta 2dJ + 1) < 0$$

se $\beta > \beta_c$.

Il modello si può risolvere esattamente utilizzando la nota identità

$$e^{x^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{y^2}{2} + yx}$$

Riscriviamo la forma quadratica come

$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j} G_{ij} s_i s_j = -\frac{1}{2} \langle s, Gs \rangle, \quad \beta \sum_i h_i s_i = \langle s, z \rangle, \quad z = \beta h$$

Affinchè l'integrale in esame sia dello stesso tipo di quello precedente manca ancora qualcosa: siamo infatti giunti ad avere una espressione del tipo di quella cercata dove, al posto di $\frac{1}{2}y^2$ abbiamo una forma quadratica e al posto di xy un prodotto scalare, ma per completare la scrittura conviene definire

$$\eta = G^{-1}z$$

in modo da rendere il termine $-\frac{1}{2} \langle s, Gs \rangle + \langle s, z \rangle$ un quadrato sommando e sottraendo ad esso la quantità:

$$\frac{1}{2} \langle \eta, G\eta \rangle$$

in modo da ottenere

$$\begin{aligned} \langle s, z \rangle - \frac{1}{2} \langle s, Gs \rangle &= -\frac{1}{2} \langle s, Gs \rangle + \langle s, G\eta \rangle + \frac{1}{2} [\langle \eta, G\eta \rangle - \langle \eta, G\eta \rangle] \\ &= -\frac{1}{2} \langle s - \eta, G(s - \eta) \rangle + \frac{1}{2} \langle \eta, G\eta \rangle \end{aligned}$$

A questo punto abbiamo un integrale del tipo:

$$Z_N = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N ds_i \exp\left\{\frac{1}{2} \langle s + \eta, G(s + \eta) \rangle\right\} e^{\frac{1}{2} \langle \eta, G\eta \rangle} = e^{\frac{1}{2} \langle \eta, G\eta \rangle} \frac{1}{\sqrt{\det G}}$$

che, essendo in forma esponenziale, è calcolabile in modo esplicito. Inoltre, dal momento che $z = \beta h$ la matrice G risulta essere applicata al campo magnetico esterno h e quindi, se $h = 0$, la funzione di partizione diventa semplicemente

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{\det G}}$$

Si vede allora come la risoluzione di questo modello sia legata alla determinazione della matrice G : agendo come nel caso dell'approssimazione di campo medio, lavoriamo con la matrice inversa $G^{-1} = A'$ in quanto da essa è possibile calcolare la trasformata di Fourier di A' e quindi determinare la matrice stessa. $A' = A/\beta$, con A valutata nella teoria di campo medio.

$$A'_{jk} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{[0,2\pi]^d} d\theta A(\theta) e^{i(j-k)\cdot\theta}$$

$$A(\theta) = \frac{1}{1 - 2J\beta \sum_{k=1}^d \cos \theta_k}$$

Fatto ciò¹, per continuare la nostra analisi del modello gaussiano, ci rimane da calcolare l'energia libera e cioè il logaritmo del determinante di G . Utilizzando le relazioni:

$$\det G = \exp \text{Tr} \ln G; \quad \frac{d}{d\lambda} \log(G + \lambda I) = (G + \lambda I)^{-1}$$

si ha

$$\log Z = -\frac{1}{2} \log \det G = -\frac{1}{2} \text{Tr} \log G = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left[\int d\lambda (G + \lambda I)^{-1} \right]_{\lambda=0}$$

$$(G + \lambda)_{jk}^{-1} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{[0,2\pi]^d} d\theta e^{i(j-k)\cdot\theta} \frac{1}{1 - 2J\beta \sum_{k=1}^d \cos \theta_k + \lambda}. \quad (8.1.1)$$

Si ricava, a campo magnetico nullo, che

$$f(\beta, 0) = -\frac{1}{2(2\pi)^d} \int_{[0,2\pi]^d} d\theta \ln \left[1 - 2J\beta \sum_{k=1}^d \cos \theta_k \right]$$

Per trovare il punto di non analiticità di tale espressione si procede sviluppando in serie il coseno che compare all'interno del logaritmo da cui si vede che per $1 - 2\beta Jd = 0$ si ha la singolarità cercata. Il valore di β critico trovato $\beta = \frac{1}{2dJ}$ coincide con quello fornito dalla teoria approssimata di campo medio. Osserviamo che il modello in esame non risulta essere definito per valori di β superiori a quello critico perchè per essi la matrice A non è più definita positiva e quindi i calcoli fatti fino ad ora non hanno senso. Una volta calcolata l'energia libera possiamo studiare le funzioni di correlazione dalle sue derivate prima e seconda. Cominciamo col valutare la magnetizzazione $\beta \langle s_i \rangle$ come derivata rispetto ad h del logaritmo della funzione di partizione

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{\det G}} e^{\frac{\beta^2}{2} \langle h, G^{-1} h \rangle}$$

Si ha

$$\langle s_i \rangle = \beta G^{-1} h|_{h=0} = 0$$

¹Quest'ultimo risultato era stato ricavato durante lo studio della teoria di campo medio; si veda in proposito l'equazione (4.5.38).

Le altre funzioni di correlazione sono date da

$$\langle \prod_{k=1}^n s_k \rangle_C = \frac{1}{\beta^n} \prod_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial h_k} \log Z(h)$$

dove, essendo lo spin illimitato, tali sono anche le funzioni di correlazione. Studiamo $\langle s_i s_j \rangle \equiv \langle s_i s_j \rangle_C$ attraverso la derivata seconda dell'energia libera rispetto ad h che vale:

$$\langle s_i s_j \rangle = A'_{ij}$$

Come si vede la funzione di correlazione a due punti risulta essere pari all'inverso della covarianza di B . In questo caso abbiamo riottenuto la stessa espressione del modello $1/N$ e quindi possiamo dire che anche le "proprietà di decadimento" dei suoi sistemi sono le stesse, cioè:

1. andamento esponenziale per $\beta \neq \beta_c$
2. andamento a potenza per $\beta = \beta_c$

In virtù di ciò resta invariata anche la tabella degli esponenti critici che, per tale ragione, vengono detti esponenti gaussiani in entrambi i casi.

Da quanto detto fino ad ora si evince che il modello gaussiano è risolubile ma non banale: in particolare possiamo dire che l'esistenza di un punto critico (lunghezza di correlazione risulta essere divergente) denota la presenza di una transizione di fase del secondo ordine. Calcoliamo allora la funzione di correlazione a quattro punti per vedere se ne possiamo ricavare un qualche tipo di informazione:

$$\begin{aligned} \langle s_i s_j s_\ell s_k \rangle &= A'_{ij} A'_{\ell k} + A'_{i\ell} A'_{jk} + A'_{ik} A'_{\ell j} \\ &= \langle s_i s_j \rangle \langle s_\ell s_k \rangle + \langle s_i s_\ell \rangle \langle s_k s_j \rangle + \langle s_\ell s_j \rangle \langle s_i s_k \rangle \end{aligned}$$

Come si vede la precedente si decompone nella somma di prodotti di funzioni di correlazione a due punti e quindi, una volta calcolate queste ultime, riusciamo a calcolare quelle ad " n -punti" con n generico purchè pari: dal momento che conosciamo tutte le funzioni di correlazione è lecito concludere di aver risolto interamente il modello! A partire dalla definizione delle funzioni di correlazione ad n punti si deduce una informazione di notevole importanza e cioè che le funzioni di correlazione connesse sono nulle qualunque sia il numero di punti: in virtù di ciò possiamo dire che, di tutti i modelli interagenti, quello gaussiano è il più vicino ad uno indipendente in quanto differisce da esso solo per il fatto di avere $\langle s_i s_j \rangle \neq 0$.

8.1.1 Teoria di Campo Scalare Massivo

Studiamo ora un altro modello a spin continuo connesso con quello gaussiano ma definito sul continuo invece che sul reticolo. A tale scopo, sia $\phi(x) \in \mathbb{R}$ un variabile di campo associata ad ogni sito $x \in \mathbb{R}^d$. Introduciamo quella che in teoria dei campi è chiamata azione

$$S[\phi] = \int_{\mathbb{R}^d} dx |\nabla \phi|^2 + m^2 \phi^2$$

ed ha un ruolo analogo all'hamiltoniana nel senso che la distribuzione di probabilità associata è

$$P[\phi] = \frac{1}{Z} \exp -S[\phi]$$

Questo modello è detto teoria di campo scalare con massa. Al fine di confrontare la teoria di questo modello con quella di un sistema reticolare dobbiamo discretizzare \mathbb{R}^d in modo che il campo

ϕ diventa una variabile continua ϕ_j associata ad ogni sito j del reticolo. Una approssimazione discreta della componente n del gradiente nel punto j è

$$(\nabla_n \phi)(j) = \frac{1}{\varepsilon} [\phi_{j+n} - \phi_j]$$

dove n è uno spostamento da j sul reticolo di lunghezza ε , con ε il passo reticolare. L'azione discretizzata ha la forma

$$\begin{aligned} S[\phi] &= \varepsilon^d \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} \left(\frac{1}{2} \sum_{n:|n|=\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon^2} [\phi_{j+n} - \phi_j]^2 + m^2 \phi_j^2 \right) \\ &= \varepsilon^d \left[-\frac{1}{\varepsilon^2} \sum_{i,j:|i-j|=\varepsilon} \phi_i \phi_j + \left(\frac{2d}{\varepsilon^2} + m^2 \right) \sum_j \phi_j^2 \right] \end{aligned}$$

L'azione può essere interpretata come l'hamiltoniana del modello gaussiano in quanto ϕ_j è un campo a valori in \mathbb{R} . Dopo il cambiamento di variabile

$$s_i = \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon^{1-d/2}} \phi_i \sqrt{2d + \varepsilon^2 m^2}$$

si ha

$$-H = \frac{1}{2(2d + \varepsilon^2 m^2)} \sum_{i,j:|i-j|=\varepsilon} s_i s_j - \frac{1}{2} \sum_j s_j^2$$

La corrispondente distribuzione di probabilità è

$$P[\phi] = \frac{1}{Z} \exp \left[\frac{1}{(2d + \varepsilon^2 m^2)} \frac{1}{2} \sum_{i,j:|i-j|=\varepsilon} s_i s_j - \frac{1}{2} \sum_j s_j^2 \right]$$

che è la misura di Gibbs del modello Gaussiano corrispondente alla temperatura $\beta = \frac{1}{2d + \varepsilon^2 m^2}$ e $J = 1$. Tale teoria ammette quindi un punto critico per $m = 0$.

8.2 Modello rotatore piano.

Un esempio di modello di spin continuo è il cosiddetto "rotatore piano" in cui ad ogni sito reticolare $i \in \mathbb{Z}^d$ viene associata una variabile angolare $\theta_i \in [0, 2\pi]$. L'hamiltoniana è della forma (interazione a prossimi vicini)

$$-H = J \sum_{(i,j)} \cos(\theta_i - \theta_j) = J \sum_{(i,j)} \text{Re}(e^{i(\theta_i - \theta_j)})$$

La somma è su tutte le coppie di prossimi vicini (i, j) , $|i - j| = 1$. Osserviamo che per variabili angolari che possono assumere soltanto i valori $\theta = 0, \pi$ si ha $(\theta_i - \theta_j) = 0, \pm\pi \Rightarrow \cos(\theta_i - \theta_j) = \pm 1$ e quindi il modello si riduce al modello di Ising. La corrispondenza è tramite la posizione $e^{i\theta_j} = \sigma_j$. L'invarianza presentata dall'energia è del tipo (globale)

$$\theta_i \rightarrow \theta_i + \alpha, \quad \forall i \in \mathbb{Z}^d, \quad \alpha \in [0, 2\pi]$$

Sia F un'osservabile continua e locale sullo spazio delle configurazioni $[0, 2\pi]^{\mathbb{Z}^d}$. Un'osservabile si dice locale se dipende solo da un numero finito di θ_i . Una tale funzione è rappresentabile in termini di una serie di Fourier multipla. I singoli termini della serie di Fourier sono della forma

$$(e^{i \sum_j \theta_j n_j}), \quad n_j \in \mathbb{Z}$$

con n_j le variabili coniugate alle θ_j . Quindi le osservabili elementari "i polinomi" sono di questo tipo. Se si conoscono i valori di aspettazione di queste osservabili elementari si può ricostruire il valore di aspettazione di una qualsiasi osservabile continua locale F . Se si è interessati alle attese di osservabili reali basta considerare

$$Re(e^{i\sum_j \theta_j n_j}) = \cos(\sum_j \theta_j n_j).$$

In particolare, la magnetizzazione è definita da

$$m_j = \langle \cos \theta_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{1}{2\pi} \int_{[0,2\pi]} \prod_i d\theta_i \cos \theta_j e^{-\beta H}.$$

Discutiamo ora le conseguenze dell'invarianza dell'Hamiltoniana. Introduciamo un campo $\underline{n} : j \in \mathbb{Z}^d \rightarrow n_j \in \mathbb{Z}$ sul reticolo e usiamo la notazione $\underline{n} \cdot \underline{\theta} = \sum_j \theta_j n_j$, dove $\underline{\theta}$ denota una configurazione sul reticolo $\underline{\theta} = \{\theta_j\}_{j \in \mathbb{Z}^d}$. Le osservabili elementari sono così in corrispondenza biunivoca con i campi \underline{n} sul reticolo. Lo stato ha la stessa simmetria dell'Hamiltoniana se per tutti i campi si ha

$$\langle e^{i\underline{n} \cdot \underline{\theta}} \rangle = \langle e^{i\underline{n} \cdot (\underline{\theta} + \alpha)} \rangle \quad \forall \alpha \in [0, 2\pi].$$

Osserviamo che lla precedente uguaglianza è vera solo se $\sum_j n_j = 0$ oppure \underline{n} è tale che $\langle e^{i\underline{n} \cdot \underline{\theta}} \rangle = 0$. Infatti

$$\begin{aligned} \prod_i \frac{1}{2\pi} \int_{[0,2\pi]} d\theta_i e^{i\underline{n} \cdot \underline{\theta}} e^{-\beta H} &= \prod_i \frac{1}{2\pi} \int_{[0,2\pi]} d\theta_i e^{i\underline{n} \cdot (\underline{\theta} + \alpha)} e^{-\beta H} \\ &= e^{\alpha \sum_j n_j} \prod_i \frac{1}{2\pi} \int_{[0,2\pi]} d\theta_i e^{i\underline{n} \cdot \underline{\theta}} e^{-\beta H}. \end{aligned}$$

Quindi le osservabili invarianti sono quelle caratterizzate da $\sum_j n_j = 0$, ad esempio $\cos(\theta_i - \theta_j)$. La magnetizzazione invece non è invariante, per cui se è diversa da zero si è in presenza di una rottura spontanea della simmetria. Nel caso di modelli a simmetria continua non si ha rottura spontanea della simmetria a $d = 1, 2$. Proviamo questa affermazione nel caso del rotatore piano. Vale il seguente

Teorema 8.2.1 (di Wagner). *Nel modello rotatore piano il valore di aspettazione $\langle \cos \theta_i \rangle$ è zero a $d = 1, 2$.*

Dimostrazione. Si parte dalla seguente identità valida per una generica osservabile continua F (integrazione per parti)

$$0 = \int \prod_i d\theta_i \frac{d}{d\theta_j} F e^{-\beta H} = \langle \frac{d}{d\theta_j} F \rangle - \beta \langle F \frac{\partial}{\partial \theta_j} H \rangle$$

Sia $A(k) = \sum_n e^{ikn} \sin \theta_n$, $B(k) = \sum_n e^{ikn} \frac{\partial H}{\partial \theta_n}$, $k \in [0, 2\pi]$. Si ha che

$$\langle \bar{A}B \rangle = \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \langle \sin \theta_{n'} \frac{\partial}{\partial \theta_n} H \rangle$$

Usando la precedente identità si ottiene

$$\langle \bar{A}B \rangle = - \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \langle \frac{\partial}{\partial \theta_n} \sin \theta_{n'} \rangle = - \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \langle \cos \theta_{n'} \rangle \delta_{nn'} = -NM$$

dove N è il numero totale di spin e M la magnetizzazione. Per la disuguaglianza di Schwartz si ha

$$(\langle \bar{A}B \rangle)^2 \leq \langle |A|^2 \rangle \langle |B|^2 \rangle$$

Dalla definizione di A, B segue

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int \langle |A|^2 \rangle dk &= \sum_{nn'} \delta_{nn'} \langle \sin \theta_n \sin \theta_{n'} \rangle = \langle \sin^2 \theta_n \rangle N \\ &= N(1 - \langle \cos^2 \theta_n \rangle) \leq N[1 - \langle \cos \theta_n \rangle^2] = [1 - M^2]N \end{aligned}$$

La disuguaglianza è una conseguenza delle disuguaglianza GKS che sono valide per questo modello. Analogamente

$$\begin{aligned} \langle |B|^2 \rangle &= \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \langle \frac{\partial}{\partial \theta_{n'}} H \frac{\partial}{\partial \theta_n} H \rangle \\ &= -\beta \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \sum_{j:|n-j|=1} \langle \sin(\theta_{n'} - \theta_j) \frac{\partial}{\partial \theta_n} H \rangle \end{aligned}$$

Adesso usiamo di nuovo l'identità

$$\begin{aligned} \langle |B|^2 \rangle &= \beta \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \sum_{j:|n-j|=1} \langle \cos(\theta_{n'} - \theta_j) (\delta_{nn'} - \delta_{nj}) \rangle \\ &= \beta \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \sum_{j:|n-j|=1} \langle \cos(\theta_{n'} - \theta_j) (1 - \cos k(n-j)) \rangle \\ &= \beta \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \sum_{j:|n-j|=1} \langle \cos(\theta_{n'} - \theta_j) (2 \sin^2 \frac{k(n-j)}{2}) \rangle \\ &\leq \frac{k^2}{2} \beta \sum_{nn'} e^{ik(n'-n)} \sum_{j:|n-j|=1} \langle \cos(\theta_{n'} - \theta_j) \rangle \leq k^2 dN \beta \end{aligned}$$

Di conseguenza

$$\frac{M^2}{k^2} \leq \frac{\langle |A|^2 \rangle d\beta}{N}$$

e integrando

$$\frac{1}{2\pi} \int dk \frac{M^2}{k^2} \leq d\beta(1 - M^2) \leq d\beta$$

che implica

$$M^2 \leq \frac{d\beta}{\frac{1}{2\pi} \int dk \frac{1}{k^2}}$$

L'integrando ha una divergenza nell'origine che comporta la divergenza dell'integrale a $d = 1, 2$ di tipo logaritmico a $d = 2$. Quindi abbiamo ottenuto che

$$M^2 \leq 0, \quad d = 1, 2$$

□

Se aumentiamo le dimensioni, però, questo risultato non è più valido ed, in particolare, per $d=3$, si ha che il precedente integrale è costante quindi non possiamo concludere nulla sulla magnetizzazione.

Nonostante l'assenza di magnetizzazione residua il modello bidimensionale presenta comunque una transizione di fase. Osservando che per il rotatore piano valgono:

1. le disuguaglianze ferromagnetiche (ma la loro forma è estremamente complessa)
2. le equazioni ricorsive a basse temperature

andiamo a studiare cosa accade per β grande. A temperatura zero l'energia è minima se tutti i coseni della sommatoria sono uguali al loro valore massimo, e cioè

$$(\theta_i - \theta_j) = 0 \quad \forall(i, j)$$

dove la precedente richiesta si formalizza dicendo che tutti gli spin devono essere allineati. Per temperature vicino allo zero tale differenza resterà piccola e quindi si può pensare di approssimare il coseno con i primi termini della sua serie di Taylor

$$(\theta_i - \theta_j) \sim 1 - \frac{1}{2}(\theta_i - \theta_j)^2$$

dimenticando, in tal modo, la natura angolare delle variabili: da ora in poi, quindi, penseremo che: $\theta_i \in \mathbb{R}$. Utilizzando questa approssimazione la funzione di partizione si scrive nella forma

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_i d\theta_i \exp\left\{\frac{1}{4}\beta \sum_{ij} J_{ij}(\theta_i - \theta_j)^2\right\}$$

con:

$$J_{ij} = \begin{cases} J > 0 & \text{se } |i - j| = 1 \\ 0 & \text{se } |i - j| \neq 1 \end{cases}$$

Sviluppando i prodotti si ottiene:

$$\frac{1}{4}\beta \sum_{ij} J_{ij}(\theta_i - \theta_j)^2 = \frac{1}{2}\beta \sum_{ij} J_{ij}\theta_i\theta_j - \beta dJ \sum_i \theta_i^2$$

da cui, effettuando il seguente cambio di variabili

$$s_i = \theta_i \sqrt{2\beta dJ} \quad \Rightarrow \quad \theta_i = \frac{s_i}{\sqrt{2\beta dJ}}$$

si ricava, per la funzione di partizione, l'espressione:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \int \prod_i ds_i P(s_i) \exp\left\{\frac{1}{4dJ} \sum_{ij} J_{ij}s_i s_j\right\}$$

dove $P(s_i)$ è la densità di probabilità relativa alla distribuzione gaussiana.

Si vede quindi che ci troviamo in presenza di un modello gaussiano con $\beta = \frac{1}{2d}$ e cioè al punto critico. In virtù di ciò possiamo affermare che il modello rotatore piano è risolubile in quanto siamo in grado di calcolarne le funzioni di correlazione che sono:

$$\langle \cos(\theta_l - \theta_j) \rangle = \langle \text{Re}[e^{i(\theta_l - \theta_j)}] \rangle = \langle \text{Re}[e^{i\frac{1}{\sqrt{2\beta dJ}}(s_l - s_j)}] \rangle$$

Per risolvere esplicitamente la precedente espressione osserviamo che il numeratore nell'attesa appare come una funzione di partizione di un modello gaussiano con campo magnetico $h_k = \frac{i}{\sqrt{2\beta dJ}}[\delta_{lk} + \delta_{jk}]$ che ci permette di scrivere:

$$\langle \text{Re}[e^{i\frac{1}{\sqrt{2\beta dJ}}(s_l - s_j)}] \rangle = \exp\left\{-\frac{1}{2dJ\beta}(B_{jj} - B_{jl})\right\}$$

Gli elementi della matrice B hanno una espressione esplicita in termine della trasformata di Fourier.

$$B_{jk}(\beta) = \frac{\beta}{(2\pi)^d} \int d\theta e^{i(j-k)\cdot\theta} \frac{1}{1 - 2\beta dJ + \beta J|\theta|^2}$$

Quindi al punto critico

$$B_{jj} - B_{jl} = \frac{\beta}{(2\pi)^d} \int d\theta (1 - e^{i(j-l)\cdot\theta}) \frac{1}{\beta J|\theta|^2}$$

Il risultato è:

1. $d = 1$: $\langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle \sim e^{-\frac{|i-j|}{4\beta}}$
2. $d = 2$: $\langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle \sim \frac{1}{|i-j|^{\frac{1}{4\pi\beta}}}$
3. $d = 3$: $\lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle = e^{-\frac{c}{\beta}}$

dalle quali si vede che, nel caso tridimensionale, la correlazione non decade a zero e ciò porta di conseguenza alla possibile presenza di magnetizzazione spontanea. In $d = 2$ le funzioni di correlazione decadono a zero a potenza, da cui si deduce che non sussiste magnetizzazione spontanea ma si osserva una divergenza della suscettività a bassa temperatura, per $4\pi\beta > 1$, $\chi \sim \sum_r r r^{-\frac{1}{4\pi\beta}}$. Ciò è dovuto al fatto che il rotatore piano non presenta un unico punto critico, come avviene per tutti quei sistemi che descrivono una transizione ferromagnetica, ma una linea critica come nel caso della liquefazione. Quello che succede è che nel limite di temperatura nulla il rotatore piano presenta gli spin allineati ma, all'aumentare T , essi tendono cambiare posizione in modo che la nuova configurazione sia tale che i prossimi vicini vengano ruotati uno rispetto all'altro di poco in modo da determinare non più un sistema di spin ma un sistema di vortici. Si vede quindi come, al crescere della temperatura, sia più giusto andare a studiare le interazioni tra i vortici piuttosto che quelle fra gli spin. Nel limite in cui la temperatura va all'infinito, ogni spin tende ad orientarsi in modo proprio e quindi tra essi sussistono solo delle relazioni del tutto casuali che ci portano a concludere la totale disorganizzazione del sistema. Questo scenario è avvalorato dal seguente argomento euristico di tipo energia-entropia, basato sul confronto tra l'energia libera delle configurazioni in cui tutti gli spin hanno lo stesso valore (stato fondamentale) e l'energia libera delle configurazioni in cui è presente un vortice di raggio R cui appartiene l'origine. La differenza di energia è

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} (\theta_i - \theta_j)^2 = J \sum_{r=1}^R \pi r (\nabla\theta)^2(r)$$

dove ∇ denota la differenza finita sul reticolo. Per valutare la somma, osserviamo che nell'approssimazione del continuo l'integrale circuitale lungo una qualunque linea chiusa contenente il vortice di un gradiente è $\int d\ell \cdot \nabla\theta = 2\pi$. Questo comporta che l'integrale su ogni circonferenza di raggio r del gradiente deve essere uguale a 2π e quindi per il gradiente si ha $\nabla\theta \approx \frac{1}{r}$. Da cui

$$H = J \sum_{r=1}^R \pi r \frac{1}{r^2} \approx \pi \ln R$$

La differenza in entropia si valuta dicendo che si possono avere ordine di πR^2 vortici di raggio R cui appartiene l'origine. La risultante differenza in energia libera è

$$(\pi J - 2T) \ln R$$

che quindi favorisce la presenza di vortici a bassa temperatura.

8.3 Trasformazione di dualità.

Un altro modello interessante è quello che si ottiene a partire dalla trasformazione di dualità per il modello di Ising in tre dimensioni a campo magnetico nullo. Nella trasformazione di dualità nel caso bidimensionale ad ogni legame (link) cioè ad ogni coppia di prossimi vicini $(i, j) = b$ viene associato in modo univoco un legame sul reticolo duale perpendicolare al link b e che lo interseca nel punto di mezzo. In tre dimensioni ad ogni link si può associare in modo univoco una varietà bidimensionale, il quadratino unitario perpendicolare a b nel punto di mezzo (una placchetta, che in genere si indica con la lettera p).

Indicheremo con b^* l'elemento duale al link b : b^* è quindi una placchetta e useremo la notazione b^* quando si vuole stressare la relazione di dualità e p quando si vuole ricordare che si tratta di una placchetta. Effettueremo la trasformazione di dualità nel caso tridimensionale in modo analitico: partiamo dal modello di Ising in campo magnetico nullo, ponendo $J = 1$, con la notazione $\sigma_b = \sigma_i \sigma_j$, $b = (i, j)$,

$$Z_\Lambda = \sum_{\sigma} \prod_b \exp \beta \sigma_b$$

e scriviamo $\exp \beta \sigma_b$ per ogni b come:

$$\exp \beta \sigma_b = \cosh \beta \sum_{\tau_{b^*} = \pm 1} (\sigma_b \tanh \beta)^{\frac{1 - \tau_{b^*}}{2}}$$

dove τ_{b^*} è una variabile a valori ± 1 associata all'elemento duale b^* , cioè alla placchetta duale. Sostituendo questa espressione nella funzione di partizione di Ising in $d=3$, si ottiene:

$$Z_\Lambda = \sum_{\sigma} \prod_b \cosh \beta \sum_{\tau_{b^*} = \pm 1} (\sigma_b \tanh \beta)^{\frac{1 - \tau_{b^*}}{2}} \quad (8.3.1)$$

$$= (\cosh \beta)^{N_b} \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \prod_b (\sigma_b \tanh \beta)^{\frac{1 - \tau_{b^*}}{2}} \quad (8.3.2)$$

dove τ rappresenta una configurazione di variabili di placchette τ_p sul reticolo duale. In particolare, riscrivendo:

$$\sigma_b = \prod_x (\sigma_x)^{\chi_b(x)}$$

dove σ_x è una variabile di sito e

$$\chi_b(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in b \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

si ricava:

$$(\cosh \beta)^{N_b} \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \prod_x (\sigma_x)^{\sum_b \frac{1 - \tau_{b^*}}{2} \chi_b(x)} (\tanh \beta)^{\sum_b \frac{1 - \tau_{b^*}}{2}}$$

A questo punto, scambiando le sommatorie, è possibile svolgere direttamente quella sulle configurazioni $\underline{\sigma}$

$$\sum_{\underline{\sigma}} \prod_x (\sigma_x)^{\sum_b \frac{1-\tau_{b^*}}{2} \chi_b(x)}$$

che è la somma di polinomi nelle σ la quale fornisce un valore diverso da zero se e solo se ogni σ_x che compare nel prodotto è elevata ad un numero pari e cioè se:

$$\sum_b \frac{1-\tau_{b^*}}{2} \chi_b(x) = 0 \quad \text{mod } 2 \quad \forall x$$

Come si vede, abbiamo trovato che sommare sulle configurazioni $\underline{\sigma}$ comporta l'esistenza di un vincolo. Fissato $x \in b$ si ha $\chi_b(x) = 1$ e quindi possiamo riscrivere il vincolo come una somma su tutti i legami b che partono dal sito x :

$$\sum_{b \ni x} \frac{1-\tau_{b^*}}{2} = 0 \quad \text{mod } 2 \quad \forall x$$

Poichè ad ogni legame b corrisponde una placchetta p (l'elemento duale b^*) sul reticolo duale effettuare una tale somma sui legami che partono dal sito x equivale a sommare sulle placchette appartenenti al cubo $C(x)$ sul reticolo duale di centro x (x si trova sul reticolo originario), quindi possiamo scrivere:

$$\sum_{p \in C(x)} \frac{1-\tau_p}{2} = 0 \quad \text{mod } 2 \quad \forall x$$

L'esistenza del vincolo è ora espressa in termini dell'ultima relazione scritta e ci dice che le variabili τ_p associate alle placchette non sono indipendenti. In particolare, dal momento che la somma nella formula precedente deve essere pari ci devono essere un numero pari di segni negativi, e poichè le τ_p hanno valori ± 1 questo è equivalente al fatto che il prodotto è 1:

$$\prod_{p \in C(x)} \tau_p = 1 \quad \forall x$$

Si vede facilmente che tale vincolo è equivalente al fatto che in realtà le variabili τ_p sono il prodotto di variabili $\tau_\ell = \pm 1$ associate ai bond sul reticolo duale, cioè si ha la condizione:

$$\tau_p = \prod_{\ell \in p} \tau_\ell \quad \forall p$$

dove la quantità $\ell = (x, y)$ prende il nome di link e rappresenta un bond sul reticolo duale e $\tau_\ell = \pm 1$ è una variabile configurazionale associata a ciascun link. In virtù di quanto detto fino ad ora la funzione di partizione si riscrive come:

$$\begin{aligned} Z_\Lambda &= (\cosh \beta)^{N_b} \sum_{\underline{\tau}} (\tanh \beta)^{\sum_p \frac{1-\tau_p}{2}} \\ &= (\cosh \beta)^{N_b} (\tanh \beta)^{N_p/2} \sum_{\underline{\tau}} (\tanh \beta)^{-\frac{1}{2} \sum_{p \in C(x)} \prod_{\ell \in p} \tau_\ell} \end{aligned}$$

dove \sum' significa somma vincolata al fatto che $\sum_{p \in C(x)} \frac{1-\tau_p}{2} = 0 \quad \text{mod } 2$.

Introduciamo ora come usuale la temperatura duale β^* , usando la relazione $\tanh \beta = e^{-2\beta^*}$. Si ha

$$(\cosh \beta)^{N_b} e^{-\beta^* N_p} \sum_{\underline{\tau}} e^{\beta^* \sum_{p \in C(x)} \prod_{\ell \in p} \tau_\ell}$$

dove ora la somma è fatta su tutte le configurazioni di link $\underline{\tau} = \{\tau_\ell\}_{\ell \in \mathbb{Z}^d}$.

In conclusione possiamo dire che il modello che stiamo esaminando è un modello di spin in cui a ciascun link ℓ è associata una variabile di spin $\tau_\ell = \pm 1$ e relativo ad una Hamiltoniana

$$-H = \sum_p \prod_{\ell \in p} \tau_\ell$$

e cioè una interazione a quattro corpi: due links interagiscono se e solo se appartengono alla stessa placchetta. Questo modello prende il nome di modello di Ising gauge invariante od anche modello Z_2 .

Osservazione L'argomento precedente si può estendere ad altre dimensioni e al modello con il termine di potenziale ad un corpo $\sum_\ell \beta_\ell \sigma_\ell$ nell'Hamiltoniana tenendo conto della seguente tabella per individuare l'elemento duale:

$d = 2$: sito $\langle - \rangle$ placchetta, link $\langle - \rangle$ link

$d = 3$: sito $\langle - \rangle$ cubo, link $\langle - \rangle$ placchetta

$d = 4$: sito $\langle - \rangle$ ipercubo, link $\langle - \rangle$ cubo, placchetta $\langle - \rangle$ placchetta

Quindi a $d = 4$ il modello Z_2 in cui è presente solo l'interazione a placchetta è autoduale. Inoltre in $d = 3$ il modello con β_ℓ diverso da zero è a sua volta autoduale.

8.4 Modelli di teoria di gauge.

Prima di continuare con la nostra analisi precisiamo il tipo di invarianza presentata da questo sistema. Il modello che stiamo esaminando presenta una invarianza locale del seguente tipo: Se si cambia il segno dello spin associato ai link che partono da un sito i prodotti $\prod_{\ell \in p} \sigma_\ell$ che coinvolgono questi link non cambiano e quindi l'Hamiltoniana è invariante. Il sito è arbitrario quindi tale invarianza è locale. Una prima conseguenza è che a due dimensioni il modello Z_2 è banale. Infatti, data una configurazione $\underline{\sigma}_\ell$ sul reticolo sul piano x, y partiamo da un sito i e vogliamo cambiare σ_ℓ associato al link $\ell = (i, i + 1)$ che parte da i nella direzione y in modo da ottenere $\sigma_\ell = +1$. Possiamo poi fissare il valore di σ_{ℓ_1} a $+1$ al link $\ell_1 = (i + 1, i + 2)$, sempre nella direzione y , cambiando il segno σ_ℓ di tutti i link che partono da $i + 2$. In questo modo applicando questo spin-flip locale ad un sito alla volta si può arrivare ad avere una configurazione in cui tutti gli spin in una direzione hanno segno fissato e negli altri invece σ_ℓ dipende dalla configurazione. In questo modo il prodotto $\prod_{\sigma_\ell \in p}$ si riduce per ogni placchetta al prodotto delle sole σ_ℓ nella direzione x perché quelle nella direzione y sono state fissate a 1 e si viene a produrre una "indipendenza" fra le "strisce" che compongono il reticolo. La funzione di partizione del modello si fattorizza nel prodotto di funzioni di partizione di modelli di Ising unidimensionali:

$$Z_\Lambda = \sum_{\sigma_p} e^{\beta \sum_p \sigma_\phi} 2C(\Lambda)$$

dove $C(\Lambda)$ è il numero di configurazioni equivalenti a quella con tutti $+$ in una direzione. Quindi poiché nel modello di Ising unidimensionale non c'è transizione di fase e la magnetizzazione è zero si ha $\langle \sigma_\ell \rangle = 0$ e assenza di punti critici.

Si vede quindi che, in un certo senso, si ha un riscaldamento della dimensione di non banalità del modello: per il modello di Ising è due mentre per quello gauge invariante è tre!

Come visto prima, in $d = 3$ il modello e' duale al modello di Ising in campo magnetico nullo e vale come usuale la relazione di dualità per le energie libere

$$f_I(\beta) = g + f_{Z_2}(\beta^*)$$

dove g è una funzione analitica mentre f_I ha un punto di non analiticità in $\beta = \beta_c$ e quindi β_c^* è un punto di non analiticità per f_{Z_2} . Si ricava così l'esistenza di un punto critico per il modello invariante di gauge. Ma in tale modello a causa della invarianza locale non c'è magnetizzazione spontanea. Tale non analiticità deve comunque corrispondere ad una transizione di fase. Per capire cosa succede discutiamo le conseguenze dell'invarianza locale e riformuliamo la proprietà di invarianza locale nel seguente modo. Introduciamo la trasformazione di gauge

$$\sigma(x, x') \Rightarrow \phi(x)\sigma(x, x')\phi(x') \quad x, x' \in \mathbb{Z}^d$$

con $\phi(x) = \pm 1$ variabili associate ai siti $x \in \mathbb{Z}^d$ e $\sigma(x, x')$ le variabili di spin associate ai link $\sigma_\ell, \ell = (x, x')$. Tale trasformazione lascia invariato il termine di interazione a placchetta ed è locale.

Tale trasformazione induce una trasformazione sulle osservabili F e sullo stato $\langle \cdot \rangle$

$$F \Rightarrow F_\phi, \quad \langle \cdot \rangle \Rightarrow \langle \cdot \rangle_\phi$$

Una osservabile F gauge invariante è tale che $F = F_\phi$. La più generale osservabile gauge-invariante ha la forma

$$\sigma_\Gamma = \prod_{\ell \in \Gamma} \sigma_\ell$$

dove Γ è un circuito chiuso su \mathbb{Z}^d . Per questo sono dette osservabili di loop.

In base a quanto detto lo stato è invariante se e solo se non si accorge delle trasformazioni che avvengono sulle osservabili, cioè $\langle F \rangle = \langle F \rangle_\phi \quad \forall F$.

Detto ciò è lecito chiederci se anche la misura di equilibrio, e dunque lo stato, siano invarianti rispetto alla stessa trasformazione di gauge.

Per argomenti generali ogni misura di equilibrio a volume infinito (DLR) è limite di misure di Gibbs a volume finito condizionate

$$\langle \cdot \rangle = \lim \langle \cdot \rangle_\Lambda^y$$

dove y rappresenta un qualsiasi gruppo di condizioni al bordo e cioè la configurazione che si presenta nell'insieme complementare a Λ .

Guardiamo, allora, cosa accade in un volume finito $\Lambda' \subset \Lambda$ ad una osservabile F cilindrica di base Λ' cioè funzione delle variabili σ in Λ' soltanto. Se ora andiamo ad eseguire una trasformazione di gauge in Λ' , e dunque senza toccare quello che sta all'esterno in Λ/Λ' . Essendo l'hamiltoniana invariante rispetto a questa trasformazione e rimanendo inalterate le condizioni al bordo, ne deduciamo che

$$\langle F \rangle_\Lambda^y = \langle F_\phi \rangle_\Lambda^y$$

e passando al limite otteniamo

$$\langle F \rangle = \langle F \rangle_\phi \quad \forall F, \phi$$

cioè la gauge invarianza dello stato d'equilibrio. Quindi l'invarianza di gauge dell'hamiltoniana non può essere spontaneamente rotta. Questo implica che le osservabili non invarianti di gauge

hanno media zero. Infatti, poichè lo stato è gauge invariante si ha per la media sul gruppo di un'osservabile $\bar{F} = \int F_\phi d\mu(\phi)$

$$\langle F \rangle = \langle \bar{F} \rangle$$

Poichè la media \bar{F} di un'osservabile non gauge invariante è zero l'uguaglianza precedente comporta che la sua media di Gibbs è zero. In particolare si ha

$$\langle \sigma_\ell \rangle = 0$$

Osserviamo che tale invarianza della misura di equilibrio non comporta la unicità dello stato: si può avere più di uno stato di equilibrio, basta che siano tutti invarianti di gauge.

Una volta indagata la presenza di un punto critico ci rimane da stabilirne la natura: per fare ciò consideriamo le osservabili invarianti di gauge σ_Γ , le osservabili associate ad un loop Γ . Siccome l'interazione è a range finito tali correlazioni devono decadere a zero: ciò che noi dimostreremo tra breve è non solo che le correlazioni decadono a zero nelle due regioni di temperatura separate dal β critico ma che lo fanno in due modi differenti a seconda che la temperatura sia maggiore o minore di quella critica.

In particolare, faremo vedere che:

1. per $\beta < \beta_c$ il decadimento è esponenziale ad area

$$\langle \sigma_\Gamma \rangle \approx e^{-(\text{cost})A(\Gamma)}$$

dove $A(\Gamma)$ è l'area minima sottesa da Γ

2. per $\beta > \beta_c$ il decadimento è a perimetro

$$\langle \sigma_\Gamma \rangle \approx e^{-\text{cost}|\Gamma|}$$

dove $|\Gamma|$ rappresenta il perimetro di Γ .

Per arrivare a ciò cominciamo col dire che nel caso in esame valgono le disuguaglianze G.K.S. ed anche che è possibile scrivere delle equazioni ricorsive ad alta temperatura che hanno la stessa natura di quelle trovate per il modello di Ising.

Cominciamo col dimostrare il decadimento "ad area" del caso (1). Sia Σ_Γ una qualsiasi superficie avente come contorno Γ , si ha:

$$\langle \Sigma_\Gamma \rangle = \langle \prod_{p \in \Sigma_\Gamma} \sigma_p \rangle$$

Consideriamo una Hamiltoniana differente H'

$$-H'_\Lambda = \sum_p J_p \sigma_p + \sum_\ell J_\ell \sigma_\ell$$

nella quale c'è un diverso campo esterno dipendente dai links:

$$-H_\Lambda = \sum_p J_p \sigma_p + \sum_\ell J_\ell \sigma_\ell, \quad \text{con } J_\ell = \begin{cases} 0 & \text{lungo } x \\ \infty & \text{lungo } y, z \end{cases}$$

Rispetto alla Hamiltoniana H' i piani paralleli al piano yz sono disaccoppiati. Ciò implica che il modello gauge invariante tridimensionale può essere ricondotto al prodotto di modelli di Ising bidimensionali in cui l'interazione a due corpi ha intensità β_p . In virtù di ciò possiamo applicare

le disuguaglianze G.K.S. e dire che, poichè in H' ci sono costanti di accoppiamento positive β_ℓ piú grandi di quelle in H , allora si ha:

$$\langle \Sigma_\Gamma \rangle_H \leq \langle \Sigma_\Gamma \rangle_{H'}$$

dove a causa della proprietà di fattorizzazione di cui si è parlato, la quantità $\langle \Sigma_\Gamma \rangle$ diventa facilmente calcolabile sui loop che giacciono nel piano yz per i quali si ha:

$$\langle \Sigma_\Gamma \rangle_{H'} = \langle \sigma_0 \sigma_L \rangle_{I(d=2)}^L.$$

Dal momento che lo studio del modello di Ising ci ha portati alla seguente espressione:

$$\langle \sigma_0 \sigma_L \rangle_{I(d=2)}^L \sim \exp\left\{-\frac{L^2}{\xi_L}\right\}$$

dove ξ è la lunghezza di correlazione, possiamo concludere che:

$$\langle \Sigma_\Gamma \rangle_H \sim \exp\left\{-\frac{A(\Gamma)}{\xi_L}\right\}.$$

Osserviamo, però, che un tale decadimento non si protrae fino al punto critico in quanto esso è definito per $\beta < \beta_c^I$ che, come è noto, non è uguale a quella del modello Z_2 .

Passiamo adesso a dimostrare l'altro decadimento, a perimetro, e cioè quello che si osserva nella regione B. Tale dimostrazione parte dall'espressione

$$Z_\Lambda = \sum_\sigma \prod_b \{e^{\beta J_b \sigma_b} - 1 + 1\}$$

che, sviluppando il prodotto, porta a quella che si chiama espansione in polimeri

$$Z_\Lambda \sim \exp\left\{\sum_k \Psi(k) \zeta(k)\right\}$$

dove:

1. k indica i cammini connessi e chiusi sul reticolo i quali sono costituiti da tutti quei legami che possono essere percorsi più di una volta. Ovviamente in k ogni legame ha la sua molteplicità e quindi se il legame ℓ_i è percorso n_i volte, si ha:

$$|k| = \sum_i \ell_i \cdot n_i$$

2. $\Psi(k)$ rappresenta il fattore combinatorio per il quale vale che:

$$\Psi(k) \leq \frac{1}{|k|}$$

3. $\zeta(k)$ fornisce il peso dell'espansione $\frac{1}{|k|} \sum_\sigma \prod_b \{e^{\beta J_b \sigma_b} - 1\}$.

La funzione di partizione scritta sopra insieme alla dualità con modello di Ising tridimensionale rappresentano le proprietà di cui si fa uso per dimostrare il decadimento a perimetro.

Data la dualità, possiamo dire che ad ogni link resta associata la placchetta ad esso ortogonale e passante per il suo punto medio, quindi possiamo scrivere:

$$\langle \sigma_\Gamma \rangle (\beta) = \langle \prod_{p \in \Sigma_\Gamma} \sigma_p \rangle = \langle \exp\{-2\beta^* \sum_{b \perp p \in \Sigma_\Gamma} J_b \sigma_b\} \rangle_I (\beta^*)$$

Dagli studi fatti sul modello di Ising, ci è noto che:

$$\langle \exp\{-2\beta^* \sum_{b \perp p \in \Sigma_\Gamma} J_b \sigma_b\} \rangle_I = \frac{Z^-}{Z}$$

dove:

$$Z^- = \sum_\sigma \prod_b \exp\{\sum_b J_b \sigma_b\} \quad \text{con : } J_b^- = \begin{cases} J_b^I & \forall b \text{ non } \perp \Sigma_\Gamma \\ 0 & \forall b \perp \Sigma_\Gamma \end{cases}$$

da cui si ricava:

$$\frac{Z^-}{Z} = \exp\{\sum_k \Psi(k) [\zeta^-(k) - \zeta(k)]\}$$

Per la definizione data in precedenza, se k non interseca la superficie Γ si ha che $\zeta^-(k) - \zeta(k) = 0$ essendo, per definizione, $\zeta^-(k) = \zeta(k)$ e quindi k deve per forza intersecare il duale di Σ_Γ . Per ottenere una maggiorazione, andiamo a sviluppare quanto ottenuto alle alte temperature:

$$\zeta(k) = \frac{1}{|k|} \sum_\sigma \prod_b \{e^{\beta J_b \sigma_b} - 1\} \sim \sum_\sigma \prod_b \beta J_b \sigma_b$$

Affinchè quella scritta risulti essere la migliore approssimazione occorre scegliere come percorsi chiusi e connessi k quelli che contengono il circuito Γ e sono ad esso perpendicolari, in particolare i più corti, ma occorre fare attenzione perchè se essi intersecano un numero pari di volte si cancellano e non va più bene. Da quanto fino ad ora detto appare chiaro che servono un numero dispari di intersezioni e, servendo quelle di lunghezza minima, possiamo concludere che i cammini k buoni per il nostro fine sono quelli che intersecano una sola volta. Scelti i k opportunamente procediamo nella nostra analisi notando che $\frac{1}{|k|} < \frac{1}{4}$ ed anche:

$$e^{\beta J_b \sigma_b} - 1 \sim -\beta J_b \sigma_b = -\beta \text{cost}$$

dalle quali si ricava che $\prod_b(\cdot)$ fornisce quattro termini uguali, in quanto ogni placchetta è costituita da quattro legami, e cioè un termine pari a $-\beta^4 \text{cost}$.

Quanto detto vale per il termine $\zeta(k)$ ma, facendo un ragionamento analogo per $\zeta^-(k)$, otteniamo, a meno di costanti ininfluenti, un fattore pari a $-2\beta^4$. Ci rimane allora da studiare la sommatoria $\sum_b(\cdot)$ dalla quale proviene un fattore $|\Gamma|$. In virtù delle precedenti considerazioni otteniamo, per la quantità studiata la seguente relazione

$$\langle \prod_{p \in \Sigma_\Gamma} \sigma_p \rangle \leq \exp\{-\beta^4 |\Gamma| \text{cost}\}$$

e dunque la tesi.

Con la dimostrazione del decadimento a perimetro si conclude lo studio del modello gauge invariante tridimensionale a campo magnetico nullo, ma prima di dare alcuni cenni su cosa accade in quattro dimensioni guardiamo, anche se non in dettaglio, cosa succede se h non è zero. L'hamiltoniana di tale modello è:

$$-H_\Lambda = \sum_p J_p \sigma_p + \sum_\ell J_\ell \sigma_\ell$$

e la dualità fa sì che sussistano le seguenti trasformazioni:

$$\begin{cases} \text{sito} \leftrightarrow \text{cubo} \\ \text{link} \leftrightarrow \text{placchetta} \end{cases}$$

e quindi, poichè trasformando H per dualità si ottiene una hamiltoniana ancora espressa per mezzo di link e placchette, possiamo dire che questo modello è autoduale. Dal momento che la trasformazione di dualità agisce su due variabili, facendo uso di informazioni già note possiamo scrivere:

$$\begin{cases} e^{-2\beta_p^*} = \tanh(\beta_p) & \text{con } \beta_p = \beta J_p \\ e^{-2\beta_\ell^*} = \tanh(\beta_\ell) & \text{con } \beta_\ell = \beta J_\ell \end{cases}$$

e dunque la nuova hamiltoniana è della forma:

$$Z_\Lambda(\beta_p, \beta_\ell) = \sum_\sigma \exp\left\{ \sum_p J_p \sigma_p + \sum_\ell J_\ell \sigma_\ell \right\} = g_{analitica} Z_\Lambda(\beta_p^*, \beta_\ell^*)$$

Possiamo allora dire, sempre per dualità, che se esiste un punto critico nel modello originario tale caratteristica si trasferisce inalterata nel modello duale anche in presenza di due parametri.

Il modello Z_2 in quattro dimensioni in assenza di campo magnetico risulta essere autoduale e, proprio in virtù di tale autodualità si riesce a stabilire l'esistenza di un β critico il quale "crea" due regioni, che per comodità continueremo a chiamare A e B come nell'analogo caso tridimensionale, tali che in una (A) ci sia un decadimento ad area e nell'altra (B) un decadimento a perimetro. La peculiarità di questo modello è che il punto critico non è più del secondo ordine ma del primo; in virtù di ciò si ha che non è la derivata seconda dell'energia libera ad essere discontinua ma la derivata prima.

Capitolo 9

Elementi di Teoria della Percolazione

Esaminiamo adesso un modello probabilistico, detto della percolazione ma, prima di addentrarci nella sua fenomenologia, qualche cenno storico. Questo modello fu adottato per studiare l'ottimizzazione delle maschere in dotazione ai minatori nelle cave di carbone: ciò che occorreva a questa gente era una protezione in grado di bloccare i materiali velenosi, in modo da non inalarli, pur permettendo il passaggio dell'aria. Serviva, cioè, un opportuno dosaggio della porosità del materiale che componeva le suddette maschere. In termini del modello che ci accingiamo a descrivere, quanto detto si traduce nell'esistenza di "percorsi connessi" per l'aria. Il processo di percolazione riguarda il verificarsi di un flusso deterministico all'interno di un mezzo a distribuzione di densità casuale e ciò lo pone in contrasto con quello di diffusione che avviene con un flusso random in un mezzo a densità determinata.

Se poniamo un pezzo di materiale poroso in un secchio d'acqua vediamo che esso comincia a bagnarsi perchè l'acqua penetra all'interno di esso sfruttando i "percorsi" costituiti dai pori del materiale. Visualizziamo il materiale come una rete di pori interconnessi, di cui alcuni sufficientemente grandi da far passare l'acqua ed altri sufficientemente piccoli da bloccarla: questa situazione può essere idealizzata supponendo che la struttura dei pori formi un reticolo ad esempio cubico. Per essere più precisi, chiamiamo i punti in cui i pori si interconnettono siti ed imponiamo che essi abbiano coordinate intere, in particolare, i siti che sono a distanza unitaria si dicono prossimi vicini ed ogni coppia di tali siti è connessa da un poro. La "struttura" composta da due siti ed una porosità viene chiamata legame. Consideriamo un reticolo \mathbb{Z}^d dove ad ogni sito i viene associata una variabile a due valori $n_i = 0, 1$ che ci dice se questo sito è libero oppure occupato. I siti sono distribuiti indipendentemente uno dall'altro. Un sito i è occupato con probabilità $P(n_i = 1) = p$ e non è occupato con probabilità $P(n_i = 0) = 1 - p$.

La probabilità di una configurazione in cui su N siti totali ce ne sono k occupati, è data da $p^k(1 - p)^{N-k}$ è, come si vede, una probabilità prodotto.

Quello che ci chiediamo è se, partendo da un fissato punto, riusciamo a "trapassare" il materiale e cioè se esiste una catena di prossimi vicini connessi e vuoti (o, equivalentemente, pieni). Dalla letteratura è noto che, per avere il fenomeno della percolazione, occorre una ben precisa concentrazione di siti "vuoti": quanto appena detto ci dice che, nonostante l'indipendenza, questo particolare modello esibisce un qualche tipo di "comportamento critico". Dato un certo sito i nel reticolo, vediamo quant'è la probabilità che esso appartenga ad un cluster di "occupati" ($i \in C$) ed, in particolare, ad un cluster infinito ($i \in C_\infty$). Questa probabilità definisce la cosiddetta "probabilità di percolazione":

$$P(i \in C_\infty) = P_\infty(i)$$

e si ha che:

$$\exists P_c : \begin{cases} P \leq P_c \Rightarrow P_\infty(i) = 0 \\ P > P_c \Rightarrow P_\infty(i) \neq 0 \end{cases}$$

dove la probabilità di percolazione rappresenta il "parametro d'ordine" e P_c il valore critico, cioè il valore della probabilità di percolazione al di sotto del quale non c'è la transizione di fase (nel modello di Ising il parametro d'ordine era dato dalla magnetizzazione). Inoltre si può provare che la probabilità di percolazione è crescente nel parametro.

Quella vista fino ad ora è, in un certo senso, una caratteristica "locale" in quanto andiamo a guardare se un certo sito appartiene o meno ad un cluster, finito od infinito che sia. Se vogliamo andare a vedere questa caratteristica in modo globale, occorre studiare la probabilità che esista un cluster infinito, cioè:

$$P(\exists C_\infty) = P_\infty$$

La transizione di fase si manifesta bruscamente come si vede subito ricordando che un modello indipendente presenta una misura ergodica rispetto al gruppo delle traslazioni e cioè che tutti gli eventi invarianti per traslazione hanno misura: $\mu \in 0, 1$. Possiamo anche usare il fatto che tale evento è un evento tali e quindi ha probabilità 0, 1. In virtù di ciò si ha che, per ogni valore di $P > P_c$, la probabilità di percolazione P_∞ passa discontinuamente dal valore zero al valore uno: nel caso locale, invece, il passaggio è continuo ed il salto si presenta solo a volume infinito.

Esaminiamo il caso semplice di un reticolo unidimensionale. È evidente che il cluster infinito si può formare solo se si ha una catena infinita di siti occupati: un solo sito vuoto spezzerebbe la catena. E questo significa che $p_c = 1$.

Rimane aperto il problema della continuità di p al punto critico: la probabilità di percolazione è zero al punto critico? La risposta è positiva in due dimensioni

Una volta che si è formato il cluster infinito, una domanda naturale è: quanti cluster infiniti esistono? È stato provato che il numero di cluster infiniti è 0, 1, ∞ con probabilità 1. Inoltre su \mathbb{Z}^d tale numero è 0, 1. Quindi appare un unico cluster infinito sopra la soglia di percolazione. Ci sono inoltre clusters di taglia arbitrariamente grande.

Un'altra grandezza interessante è la funzione di connessione:

$$\tau_{\ell k} = P(\ell, k \in C)$$

che possiamo riscrivere in termini di aspettazione delle funzioni caratteristiche dei singoli eventi:

$$\tau_{\ell k} = \mathbb{E}(\chi_\ell^c \chi_k^c)$$

Quello che ci aspettiamo è che allontanando ℓ e k le funzioni di connessione decadano. Infatti per $p \neq p_c$, esse decadono esponenzialmente. Invece per $p = p_c$ esse esibiscono un decadimento polinomiale:

$$\tau_{\ell k} \sim \frac{1}{|\ell - k|^\alpha}$$

mentre al di fuori di esso il decadimento è di tipo esponenziale:

$$\tau_{\ell k} \sim \exp -s|\ell - k|.$$

Ovviamente α sarà uno degli esponenti critici della teoria della percolazione.

In una dimensione, la funzione di connessione $\tau_{0,r}$ è uguale a p^r perchè 0 ed r appartengono allo stesso cluster se tutti i siti tra 0 ed r sono occupati. Quindi decade esponenzialmente. Se $p = p_c = 1$ non c'è decadimento.

Ci rimane da definire la "dimensione media" di un cluster. A tale scopo, sia $k(n)$ il numero di siti che appartengono ad un cluster passante per l'origine, allora la quantità cercata è data da: $\mathbb{E}(k(n))$. Cosa accade al punto critico? Quello che si ottiene è che $\mathbb{E}(k(n))$ può divergere. Infatti,

$$k(n) = \chi_0 + \sum_{j \in \mathbb{Z}^d - \{0\}} \chi_{0j}$$

Per contare il numero di siti imponiamo che l'origine sia occupato (il primo termine è la funzione caratteristica di questo evento) e poi contiamo ogni altro sito connesso all'origine tramite le funzioni caratteristiche χ_{0j} . Prendendo l'attesa si ha

$$\mathbb{E}(k(n)) = p + \sum_{j \neq 0} \mathbb{E}(\chi_{0j})$$

nella quale il primo termine rappresenta la probabilità che lo zero sia occupato mentre il secondo rappresenta una serie di funzioni di connessione (serie perchè il cluster considerato è infinito). Da essa, infatti, si nota subito che, dato il decadimento polinomiale delle funzioni τ_{ij} la serie può tanto divergere quanto convergere (in modo assolutamente indipendente dalla dimensione del cluster) anche se al punto critico la probabilità di percolazione è, in base alle formule date in precedenza, ancora nulla.

Osserviamo che un altro possibile esponente critico è dato dal divergere della dimensione media del cluster. In 1d la probabilità che un sito appartenga ad un cluster di dimensione s è data da $(1-p)^s(1-p)$ perchè ci devono essere s siti consecutivi occupati separati dagli altri da due siti vuoti. Tende a zero a $p = p_c = 1$. La dimensione media è data da $\sum_r p^r = \frac{1}{1-p}$ e diverge come $|p - p_c|^{-1}$ (esponente critico).

Reticolo di Bethe: ogni punto a z prossimi vicini e da ogni ramo partono $z - 1$ nuovi rami.

Dimensione frattale del cluster infinito: rapporto superficie / volume in 2d è $S \approx L^D, D < 2$.

Quella vista fino ad ora è la cosiddetta "percolazione di sito" ma ne esiste un'altra, che è nota col nome di "percolazione di legame" dove si lavora assegnando una probabilità non più al singolo sito ma ad un legame:

$$b : n_b = 0, 1.$$

In questo nuovo formalismo si dice che due legami sono connessi se presentano un sito in comune ed ogni legame, indipendentemente da tutti gli altri, ha una predeterminata probabilità p (la stessa per ciascun legame) di essere abbastanza largo da trasmettere, ad esempio, acqua (vuoto), ed una probabilità: $q = (1-p)$ di essere troppo piccolo e dunque non in grado di far passare il materiale (pieno). Un legame vuoto trasmette il materiale in entrambe le direzioni e cioè quando l'acqua raggiunge uno dei siti che compongono il suddetto legame, può viaggiare attraverso ogni altro legame che termina in quel particolare sito sempre che gli altri legami siano del tipo di quelli che abbiamo chiamato "vuoti". Un altro esempio è costituito da un circuito elettrico fatto da una maglia di segmenti (disposti ad esempio secondo un reticolo piano), di cui alcuni sono conduttori ed altri isolanti. Ci si domanda per quale percentuale di elementi conduttori può fluire la corrente elettrica .

In due dimensioni si conosce con esattezza il valore di p_c usando la dualità. Dato un reticolo planare L si costruisce il duale L_* fatto dai siti che sono i centri delle facce di L e lati che congiungono i siti se le facce di L hanno un lato in comune. Si dimostra che vale la relazione

$$p_c(Z^d) + p_c(Z_*^d) = 1$$

Poichè in due dimensioni Z^2 è isomorfo a Z_*^2 , si ha che $p_c(Z^2) = 1/2$. Inoltre si può provare che la probabilità di percolazione è zero a $p = p_c$.

Il processo di contatto. Distribuiamo delle particelle su \mathbb{Z}^d in modo che in ogni sito ci sia al più una particella. L'evoluzione Markoviana è tale che ogni particella scompare dopo un tempo esponenziale di parametro 1, indipendentemente dalle altre. Inoltre ogni particella può creare una nuova particella in ognuno dei siti vicini con rate $\lambda > 0$, indipendentemente da ogni altra cosa. Partendo da un numero finito di particelle, tale numero andrà a zero in un tempo finito? Esiste un valore critico, λ_c tale che per $\lambda \leq \lambda_c$ questo accade con probabilità 1. Tale domanda può essere riformulata in termini di percolazione: esiste un cammino infinito orientato (tale che la somma delle coordinate è crescente)?

9.1 Modello di Ising e percolazione di sito.

Vediamo adesso come si lega la teoria della percolazione di sito con il modello di Ising: la domanda che ci dobbiamo porre è se esistono clusters infiniti di + (o di - è del tutto indifferente). Adottando la convenzione che due siti sono connessi se sono prossimi vicini ed hanno lo stesso segno, andiamo a considerare la relazione che sussiste tra la probabilità di percolazione e la magnetizzazione e studiamo il fenomeno critico con l'intenzione di stabilire se il punto critico del modello di Ising coincide o meno con il punto critico della probabilità di percolazione. Ovviamente in questo caso il fenomeno di percolazione non è più un fenomeno indipendente perchè associandolo al modello di Ising si introduce in esso una dipendenza sensibile dalla temperatura. Andando a guardare le seguenti quantità:

$$P_{\infty}^{\pm} = P(0 \in C_{\infty}^{\pm}); \quad \langle \sigma_0 \rangle$$

e definendo:

$$\mathbb{E}^{\pm} = \{\sigma : \sigma_0 = \pm 1\}$$

possiamo scrivere la magnetizzazione come:

$$\langle \sigma_0 \rangle = \mu(E^+) - \mu(E^-)$$

A questo punto ciò che ci accingiamo a dimostrare è che:

$$(*) \quad \langle \sigma_0 \rangle^+ \leq P_{\infty}^{\pm}$$

e cioè che il fenomeno critico dovuto alla magnetizzazione potrebbe precedere quello dovuto alla percolazione. Consideriamo un volume finito con condizioni al contorno \pm , definite dall'insieme:

$$B^{\pm} = \{\sigma : \sigma_i = \pm 1, i \notin \Lambda\}$$

Denotiamo con

$$C_Y^+ = \{\sigma : Y \text{ è un cluster di } +\}, \quad Y \subset \Lambda$$

l'evento che Y appartenga ad un cluster di + e la probabilità di questo evento con $\mu^{\pm}(C_Y^+)$. Consideriamo il rapporto

$$\frac{\mu^+(C_Y^+)}{\mu^-(C_Y^+)}$$

Dal momento che sia il numeratore che il denominatore possono essere riscritti in termini di una probabilità condizionata dalle condizioni al contorno:

$$\mu^+(C_Y^+) = \frac{\mu^+(C_Y^+ \cap B^+)}{\mu(B^+)} = \mu(C_Y^+ | B^+)$$

a patto di lavorare con la frontiera del contorno Y , si ha:

$$\frac{\mu^+(C_Y^+)}{\mu^-(C_Y^+)} = \frac{\mu(B^+|C_Y^+)}{\mu(B^-|C_Y^+)}$$

Dalla precedente, definendo:

$$C_{\partial Y}^- = \{\underline{\sigma} : \sigma_i = -1 \quad \forall i \in \partial Y\}$$

si ottiene

$$\frac{\mu^+(C_Y^+)}{\mu^-(C_Y^+)} = \frac{\mu(B^+|C_Y^+)}{\mu(B^-|C_Y^+)} = \frac{\mu(B^+|C_{\partial Y}^-)}{\mu(B^-|C_{\partial Y}^-)} = \frac{\mu(B^+ \cap C_{\partial Y}^-)}{\mu(B^- \cap C_{\partial Y}^-)}$$

A questo punto, ricordando che per il modello di Ising valgono le disuguaglianza F.K.G, si ha che

$$\mu(B^+ \cap C_{\partial Y}^-) \leq \mu(B^+) \mu(C_{\partial Y}^-)$$

e, per spin-flip, anche la disuguaglianza inversa

$$\mu(B^+) \mu(C_{\partial Y}^-) = \mu(B^-) \mu(C_{\partial Y}^-) \leq \mu(B^- \cap C_{\partial Y}^-)$$

Da cui:

$$\frac{\mu(B^+ \cap C_{\partial Y}^-)}{\mu(B^- \cap C_{\partial Y}^-)} \leq 1$$

In totale, dunque, possiamo scrivere:

$$\frac{\mu^+(C_Y^+)}{\mu^-(C_Y^+)} \leq 1 \Rightarrow \mu^+(C_Y^+) \leq \mu^-(C_Y^+)$$

A questo punto possiamo utilizzare questi risultati per dare una stima della magnetizzazione usando che

$$\langle \sigma \rangle^+ = \mu^+(E^+) - \mu^+(E^-).$$

Ricordando la relazione:

$$\mu^+(E^\pm) = \sum_{Y \ni 0} \mu^+(C_Y^\pm) + \mu^+(C_\infty^\pm)$$

si ottiene:

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle^+ &= \sum_{Y \ni 0} [\mu^+(C_Y^+) - \mu^+(C_Y^-)] + \mu^+(C_\infty^+) - \mu^+(C_\infty^-) \\ &= \sum_{Y \ni 0} [\mu^+(C_Y^+) - \mu^-(C_Y^-)] + \mu^+(C_\infty^+) - \mu^-(C_\infty^+) \end{aligned}$$

dove l'ultima uguaglianza è vera, ancora una volta, a causa della simmetria di spin-flip. Fatto ciò, per arrivare alla formula (*) basta osservare che il termine in parentesi è negativo e che $-\mu^-(C_\infty^+) \leq 0$ e quindi

$$\langle \sigma \rangle^+ \leq \mu^+(C_\infty^+)$$

9.2 Percolazione di legame e modello random cluster.

Lo studio del modello di Ising insieme a quello a percolazione di legame si basa su un differente modo di scrivere Z utilizzando il formalismo dei legami in modo da poter svolgere direttamente la sommatoria sulle configurazioni che compare nella funzione di partizione. Riscriviamo l'hamiltoniana di interazione di tale modello

$$-H = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j,$$

usando le identità

$$\delta_{\sigma_i \sigma_j} = \frac{\sigma_i \sigma_j + 1}{2}, \quad \delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1 = \frac{\sigma_i \sigma_j - 1}{2}.$$

Si ottiene

$$-H = \sum_{ij} J_{ij} (\delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1) + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij}$$

L'ultimo termine, essendo costante, può essere trascurato a patto di ridefinire il punto zero dell'energia. Una hamiltoniana di questo tipo fornisce, per la funzione di partizione, la scrittura:

$$Z = \sum_{\sigma} \exp\left\{\beta \sum_b J_b (\delta_{\sigma_b 1} - 1)\right\}$$

Facciamo uso dell'identità

$$\exp\left\{\beta \sum_b J_b (\delta_{\sigma_b 1} - 1)\right\} = (1 - P_b) + P_b \delta_{\sigma_b 1}$$

dove

$$P_b = 1 - \exp(-\beta J_b)$$

Sostituendo si ottiene

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_b [(1 - P_b) + P_b \delta_{\sigma_b 1}].$$

Introducendo le variabili $n_b = 0, 1$ possiamo effettuare una ulteriore sostituzione usando

$$(1 - P_b) + P_b \delta_{\sigma_b 1} = \sum_{n_b=0,1} (1 - P_b) \delta_{n_b 0} + P_b \delta_{\sigma_b 1} \delta_{n_b 1}$$

La funzione di partizione Z viene così espressa in termini di due sommatorie (sulle configurazioni) di due produttorie (sui legami):

$$Z = \sum_{\underline{n}} \prod_{b:n_b=0} (1 - P_b) \prod_{b:n_b=1} P_b \sum_{\underline{\sigma}} \delta_{\sigma_b 1}$$

La somma sulle configurazioni di spin dà

$$\sum_{\underline{\sigma}} \delta_{\sigma_b 1} = 2^{C(n)}$$

dove $C(n)$ rappresenta il numero di clusters di legami presenti nella configurazione n e il fattore 2 è dovuto al fatto che per il cluster esistono soltanto due stati possibili. In definitiva, la funzione di partizione associata al modello di Ising si riscrive come

$$Z = \sum_{\underline{n}} \prod_{b:n_b=0} (1 - P_b) \prod_{b:n_b=1} P_b 2^{C(n)}$$

Si ottiene così un modello di percolazione di legame dipendente. L'interazione si legge nel termine $2^{C(n)}$.

Fatto ciò ci rimane da capire la relazione che intercorre fra le funzioni di correlazione nel modello di Ising e le grandezze caratteristiche del modelli a percolazione di legame. Si ha:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \prod_{b:n_b=0} (1 - P_b) \prod_{b:n_b=1} P_b \sum_{\sigma} \delta_{\sigma_b 1} \sigma_i \sigma_j$$

dove la quantità [...] rappresenta un vincolo che obbliga i due siti che formano un legame ad avere, se appartengono allo stesso cluster, segno uguale. Da quanto scritto appare evidente che il valore della somma sulle configurazioni dipende dal segno del prodotto $\sigma_i \sigma_j$ nel seguente modo. Dato un cluster di legami nella configurazione n la somma sulle configurazioni σ è zero se i siti nel cluster non hanno tutti lo stesso segno. Quindi se $\sigma_i \neq \sigma_j$ i siti i e j non possono appartenere allo stesso cluster. Così, per non avere la sommatoria nulla, è necessario restringerla a tutte e sole le configurazioni n in cui i e j appartengono allo stesso cluster di legami, e dunque $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ rappresenta la funzione di connessione che ci assicura l'appartenenza di i e j allo stesso cluster, cioè:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \tau_{ij}.$$

Se proviamo a fare un ragionamento analogo anche nel caso della magnetizzazione, con condizioni al contorno $+$, ci accorgiamo che si ha $\langle \sigma_i \rangle \neq 0$ se e solo se il sito i appartiene al contorno del volume e cioè se e solo se i appartiene ad un cluster infinito. In conclusione

$$\langle \sigma_i \rangle^+ = P(i \in C_\infty)$$

L'uguaglianza fra la magnetizzazione e la probabilità di percolazione ci porta a dire che devono coincidere anche i punti critici ed, in particolare, ad affermare che la dimensione dei clusters sia una stima della lunghezza di correlazione in quanto l'esistenza dei clusters ha come conseguenza che i siti di una stessa catena abbiano segno uguale e ciò comporta la "creazione" di zone coerenti di "+" e "-".

Il modello di percolazione di legame così ottenuto risulta essere un caso particolare di quello che viene usualmente chiamato modello random cluster in cui il termine di interazione $2^{C(n)}$ viene sostituito da $q^{C(n)}$, con q reale. Per valori interi di q , il modello si può connettere con il modello di spin la cui hamiltoniana è:

$$-H = \sum_{i,j} J_{ij} (\delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1), \quad \sigma_i = 1, 2, \dots, q$$

Questi modelli sono noti anche col nome di modelli di Potts.

Capitolo 10

Il Gruppo di Rinormalizzazione

Consideriamo un modello di spin su un reticolo su \mathbb{Z}^d . Il punto critico è caratterizzato dal fatto che la lunghezza di correlazione ξ diverge, cioè il sistema è infinitamente correlato e non esiste una lunghezza fondamentale. Si può quindi congetturare che esista invarianza di scala, cioè che il sistema appaia allo stesso modo su qualunque scala lo si guardi. Non esiste una descrizione ridotta del sistema perchè tutti i gradi di libertà sono rilevanti. Le variabili giuste per studiare il comportamento del sistema al punto critico sono quelle associate ai blocchi di spin. Dividiamo il volume in blocchi $B_n(k)$ di lato $L_n = 2^n$. Sia k l'indice del blocco (ad es. il centro del blocco). Le variabili di blocco sono definite da

$$S_n(k) = \frac{1}{L_n^{d\omega}} \sum_{i \in B_n(k)} \sigma_i$$

dove ω è un parametro che serve a garantire la “corretta”normalizzazione per le variabili di blocco nel limite di volume infinito. Ogni blocco al livello $n+1$ è costituito da blocchi del livello n

$$S_{n+1}(k) = \frac{1}{L_{n+1}^{d\omega}} \sum_{i \in B_{n+1}(k)} \sigma_i = \frac{1}{2^{d\omega}} \sum_{i_n \in B'_1(k)} S_n(i_n)$$

dove $B'_1(k)$ è il blocco di lato 2 costruito a partire dai blocchi del livello n . La normalizzazione delle somme deve essere tale da dare un definito comportamento dei blocchi per grandi n . Supponiamo che la lunghezza di correlazione sia finita. Siti che sono a distanza superiore a ξ sono quasi scorrelati (debolmente dipendenti) e vale il teorema del limite centrale per cui possiamo aspettarci che $S_n(k)$ per $\omega = 1/2$ tenda ad una variabile gaussiana nel limite $n \rightarrow \infty$. La varianza di tale variabile è data da

$$\begin{aligned} \langle S_n(k) S_n(k) \rangle &= \frac{1}{L_n^{d2\omega}} \langle \sum_{i \in B_n(k)} \sigma_i \sum_{j \in B_n(k)} \sigma_j \rangle \simeq \\ &\simeq \frac{|B_n(k)|}{|B_n(k)|^{2\omega}} \sum_j \langle \sigma_0 \sigma_j \rangle = \frac{\chi}{\beta} \end{aligned}$$

dove sono state trascurate le correlazioni fra punti lontani. Quindi S_n è distribuita per grandi n come

$$P(S_n) \approx \left(\frac{1}{2\pi \frac{\chi}{\beta}} \right)^{1/2} e^{-\frac{x^2}{2\frac{\chi}{\beta}}}$$

Possiamo anche chiederci quale sia la distribuzione congiunta delle variabili di blocco per grandi n . Poichè i blocchi lontani sono indipendenti la distribuzione sarà prodotto. Se la suscettività

non è finita la distribuzione non può essere gaussiana ma potrebbe esistere qualche valore di $\omega \neq 1/2$ tale che il limite per grandi n esiste lo stesso. Questo accade quando il teorema del limite centrale non vale più perchè le variabili sono fortemente correlate (lunghezza di correlazione infinita).

Rivediamo prima di procedere alcune nozioni elementari di probabilità: teorema del limite centrale per variabili indipendenti.

10.1 Blocchi di spin e teorema del limite centrale .

Consideriamo una successione di variabili indipendenti a media zero e identicamente distribuite S_i con varianza finita $\langle S_i^2 \rangle = \sigma^2$. Sia $S(N) = \sum_{i=1}^N S_i$ una variabile di blocco. La sua varianza è data da $N\sigma^2$. Se le variabili non sono indipendenti la varianza è diversa

$$\langle S(N)^2 \rangle = \sum_{i,j=1}^N \langle S_i S_j \rangle$$

Sia la sequenza stazionaria cioè

$$\sum_{i,j=1}^N \langle S_i S_j \rangle = N \langle S_i S_i \rangle + 2 \sum_{\ell=1}^N (N-\ell) \langle S_0 S_\ell \rangle \quad (10.1.1)$$

Se la somma diverge la varianza diverge più velocemente di N e il teorema del limite centrale non vale più.

È importante avere delle informazioni sulla distribuzione della variabile $S(N)$ al crescere di N per sapere come normalizzare per ottenere un limite finito. Un modo di procedere è confrontare la distribuzione al valore N con quella a $2N$. Vediamo prima cosa succede nel caso in cui vale il teorema del limite centrale. Sia $P_N(x)$ la distribuzione della variabile $\frac{S(N)}{\sigma\sqrt{N}}$. Poichè

$$\frac{S(2N)}{\sigma\sqrt{2N}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{S(N)}{\sigma\sqrt{N}} + \frac{S'(N)}{\sigma\sqrt{N}} \right] \quad (10.1.2)$$

la relazione tra $P_N(x)$ e $P_{2N}(x)$ è

$$P_{2N}(x) = \int dx' dx'' P_N(x') P_N(x'') \delta \left(x - \frac{1}{\sqrt{2}}(x' + x'') \right)$$

poichè le variabili di blocco $S(N)$ e $S(N')$ sono indipendenti, nel caso valga il teorema del limite centrale, ma vincolate a sommarsi a $S(2N)$.

Integrando in dx'' si ha

$$\frac{1}{\sqrt{2}} P_{2N}(x) = \int dx' P_N(x') P_N(\sqrt{2}x - x')$$

Passando al limite per $N \rightarrow \infty$ si ottiene una equazione per la distribuzione limite P_∞

$$\frac{1}{\sqrt{2}} P_\infty(x) = \int dx' P_\infty(x') P_\infty(\sqrt{2}x - x') \quad (10.1.3)$$

È facile vedere che la gaussiana è soluzione di questa equazione.

$$\frac{1}{2\pi} \int dx' e^{-\frac{x'^2}{2}} e^{-\frac{(\sqrt{2}x-x')^2}{2}} = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2}{2}} \int dx' e^{-\frac{(x-\frac{x'}{\sqrt{2}})^2}{2}}$$

Dopo il cambiamento di variabili $z = \sqrt{2}x' - x$ si ha

$$e^{-\frac{x^2}{2}} \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} \int dz e^{-\frac{z^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} P_\infty(x)$$

Si può dimostrare che se la varianza è finita l'equazione

$$aP_\infty(x) = \int dx' P_\infty(x') P_\infty\left(\frac{x}{a} - x'\right)$$

ammette soluzione solo se $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$ nel senso che esiste finito il limite e naturalmente la soluzione è gaussiana. Questa è una prova alternativa del teorema del limite centrale per variabili indipendenti. Quindi questa equazione può essere usata per determinare a . Nel caso di variabili dipendenti si può fare un conto analogo e si ottiene una equazione più complicata perchè per esempio bisogna usare la distribuzione congiunta per calcolare la distribuzione della variabile su scala $2N$ e la soluzione se esiste può essere non gaussiana. La relazione tra a e l'esponente di normalizzazione della variabile di blocco ω è dato da

$$\langle S(N)^2 \rangle = N \langle S_i S_i \rangle + 2 \sum_{\ell=1}^N (N - \ell) \langle S_0 S_\ell \rangle$$

Se $\sum_{\ell=1}^N \langle S_0 S_\ell \rangle$ è finita, allora la varianza cresce come N . Se $\langle S_0 S_\ell \rangle \approx \ell^{-\alpha}$, $\alpha < 1$ si ha

$$\sum_{\ell=1}^N \ell^{-\alpha} = N^{1-\alpha} \frac{1}{N} \sum_{k=\frac{1}{N}}^1 \frac{1}{k^\alpha}$$

L'ultima somma converge per $N \rightarrow \infty$ all'integrale $\int_0^1 dx x^{-\alpha} = \frac{1}{(1-\alpha)}$. In definitiva si ha

$$\langle S(N)^2 \rangle \approx N^{2-\alpha}$$

e quindi $a = 2^{\frac{2-\alpha}{2}}$ e $2\omega = 2 - \alpha$, $0 < \alpha < 1$.

Come esempio di variabili di blocco che hanno una distribuzione limite non gaussiana consideriamo il caso del modello $\frac{1}{N}$ la cui hamiltoniana è, a meno di un termine costante:

$$H_\Lambda(\sigma) = -h \sum_i \sigma_i - \frac{J2d}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 + \frac{J2d}{2}$$

Le variabili di spin non sono indipendenti e le funzioni di correlazione non sono zero. La distribuzione di Gibbs per $h = 0$

$$P_N(\sigma_1 \dots \sigma_N) = (\text{const}) \exp \left[\frac{\beta J d}{N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 \right]$$

induce una distribuzione per la variabile di blocco

$$S(N) = \frac{\sum_i \sigma_i}{N^\omega}$$

data da

$$P(S(N) = y) = \frac{1}{Z_N} \sum_{\sigma: S(N)=y} \exp \left[\frac{\beta J d N^{2\omega}}{N} \left(\frac{\sum_i \sigma_i}{N^\omega} \right)^2 \right] \quad (10.1.4)$$

$$= \frac{1}{Z_N} e^{\beta J d N^{2\omega-1} y^2} \sum_{\sigma: S(N)=y} 1$$

Valutiamo l'ultima somma nell'esponenziale

$$\sum_{\sigma: S(N)=y} 1 = \sum_{\tau: \sum_i (1-2\tau_i)=yN^\omega} 1$$

avendo usato $\sigma_i = 1 - 2\tau_i$. Posto $m = \sum_i \tau_i$ il numero dei siti occupati basta valutare il numero dei siti tali che $N - 2m = yN^\omega$ su un totale di N e cioè

$$\sum_{\tau: \sum_i (1-2\tau_i)=yN^\omega} 1 = \binom{N}{m}$$

$$P(S(N) = y) = \frac{1}{Z_N} \binom{N}{m} \exp\left[\frac{\beta J d N^{2\omega} y^2}{N}\right]$$

Si ha:

$$N - m = \frac{N}{2} + \frac{y}{2} N^\omega, \quad m = \frac{N}{2} - \frac{y}{2} N^\omega$$

Per la formula di Stirling

$$\begin{aligned} \log \binom{N}{m} &\approx N \log \frac{N}{N-m} + m \log \frac{N-m}{m} \\ &= N \log \frac{N}{\frac{N}{2} + \frac{y}{2} N^\omega} + \left(\frac{N}{2} - \frac{y}{2} N^\omega\right) \log \frac{\frac{N}{2} + \frac{y}{2} N^\omega}{\frac{N}{2} - \frac{y}{2} N^\omega} \\ &= -\frac{N}{2} \log\left(\frac{1}{2} + \frac{y}{2} N^{\omega-1}\right) - \frac{y}{2} N^\omega \log \frac{\frac{1}{2} + \frac{y}{2} N^{\omega-1}}{\frac{1}{2} - \frac{y}{2} N^{\omega-1}} \\ &\quad - \frac{N}{2} \log\left(\frac{1}{2} - \frac{y}{2} N^{\omega-1}\right) \\ &= -\frac{N}{2} \log \frac{1 - y^2 N^{2\omega-2}}{4} - y \frac{N^\omega}{2} \log \frac{1 + y N^{\omega-1}}{1 - y N^{\omega-1}} \\ &= N \log 2 - \frac{N}{2} \log(1 - x^2) - y \frac{N^\omega}{2} \log \frac{1+x}{1-x} \end{aligned}$$

Per $\frac{1}{2} \leq \omega < 1$, $x = \frac{y}{N^{1-\omega}}$ è piccolo e approssimando $\log(1 - x^2) \approx -x^2 - \frac{1}{2}x^4$ e $\log \frac{1+x}{1-x} \approx 2(x + \frac{x^3}{3})$ si ha

$$\begin{aligned} \log \binom{N}{m} &\approx N \log 2 + \frac{y^2}{2} N^{2\omega-1} + \frac{y^4}{4} N^{4\omega-3} - y N^\omega (y N^{\omega-1} + \frac{y^3}{3} N^{3\omega-3}) \\ &= N \log 2 - \frac{y^2}{2} N^{2\omega-1} - \frac{y^4}{12} N^{4\omega-3} \end{aligned}$$

Per la distribuzione P si ha

$$P(S(N) = y) \approx \frac{1}{Z_N} e^{N \log 2} \exp\left[-\frac{y^2}{2} N^{2\omega-1} (1 - 2dJ\beta) - \frac{y^4}{12} N^{4\omega-3}\right] \quad (10.1.5)$$

Per $2dJ\beta \neq 1$ il termine dominante è quello quadratico e quindi la distribuzione è gaussiana. Per $2dJ\beta = 1$ il termine quadratico si cancella e scegliendo $2\omega = \frac{3}{2}$ si ha

$$P(S(N) = y) \approx \frac{1}{Z_N} e^{-\frac{y^4}{12}}$$

Quindi per ottenere una distribuzione limite basta normalizzare la variabile di blocco con $\frac{1}{N^{\frac{3}{4}}}$.

Lo stesso risultato si ottiene dall'equazione del gruppo di rinormalizzazione per questo caso.

10.2 Leggi di scala ed esponenti critici.

Rileggiamo ora la costruzione dei blocchi di spin nel seguente modo. Costruiamo una variabile di blocco mettendo insieme n^d spin a partire da un reticolo originario \mathbb{Z}^d ($S_0 \equiv \sigma$)

$$S_n(k) = \frac{1}{n^{d\omega}} \sum_{i \in B_n(k)} S_0(i)$$

I centri k di questi blocchi formano un nuovo reticolo \mathbb{Z}_n^d il cui passo reticolare è n e ad ogni sito di questo reticolo è associata una variabile di spin di blocco $S_n(k)$ che non è più a valori ± 1 . La distanza fra i siti in unità di passo reticolare è 1. Al variare di n parleremo sempre di distanza tra i punti in unità di passo reticolare. Iterando il procedimento ad ogni livello $j = mn$ c'è un reticolo \mathbb{Z}_j^d ed una variabile di spin che è la media di $(mn)^d$ spin del reticolo originario e di n^d spin del reticolo al passo precedente. Sia $P_0(S_0(i_1), S_0(i_2) \dots)$ la distribuzione congiunta degli spin del reticolo originario ($S_0 \equiv \sigma$). Usiamo la notazione $P_0\{x_i\}$ per indicare la probabilità congiunta $P_0(S_0(i_1) = x_1, S_0(i_2) = x_2 \dots)$. La relazione tra la probabilità $P_n\{x_k\}$ dei blocchi di spin di lato n centrati in k e $P_0\{x_i\}$ è

$$P_n\{x_k\} = \int \prod_i dx'_i P_0\{x'_i\} \prod_k \delta\left(x_k - n^{-d\omega} \sum_{i \in B_n(k)} x'_i\right) \quad (10.2.1)$$

Sul reticolo al passo n costruiamo dei blocchi di spin costituiti da m^d spin del reticolo \mathbb{Z}_n^d e centrati in ℓ

$$S_{nm}(\ell) = \frac{1}{m^{d\omega}} \sum_{k \in B_m(\ell)} S_n(k) = \frac{1}{(nm)^{d\omega}} \sum_{i \in B_{nm}(\ell)} S_0(i)$$

Come sopra si ha che

$$P_{nm}\{x_\ell\} = \int \prod_k dx'_k P_n\{x'_k\} \prod_\ell \delta\left(x_\ell - m^{-d\omega} \sum_{k \in B_m(\ell)} x'_k\right) \quad (10.2.2)$$

Facciamo il limite $n \rightarrow \infty$. La distribuzione limite se esiste deve soddisfare

$$P_\infty\{x_\ell\} = \int \prod_k dx'_k P_\infty\{x'_k\} \prod_\ell \delta\left(x_\ell - m^{-d\omega} \sum_{k \in B_m(\ell)} x'_k\right) \quad (10.2.3)$$

Questa equazione è difficile da risolvere in generale a differenza del caso delle variabili indipendenti anche perchè bisogna fare una integrazione su un numero infinito di variabili. Si possono però ricavare alcune proprietà della distribuzione limite, in particolare l'invarianza di scala delle funzioni di correlazione. Siano S_r e S_{r+s} due variabili di spin nel limite sul reticolo \mathbb{Z}_∞^d dopo infinite iterazioni del procedimento. Consideriamo la loro funzione di correlazione

$$\begin{aligned} E_\infty[S_r S_{r+s}] &= \int \prod_j dx_j x_r x_{r+s} P_\infty\{x_j\} \\ &= \sum_{\ell \in B_m(r), \ell' \in B_m(r+s)} m^{-d2\omega} E_\infty[S_\ell S_{\ell'}] \approx m^{2d-d2\omega} E_\infty[S_{mr} S_{m(r+s)}] \end{aligned}$$

L'ultima eguaglianza vale per s grandi: se i blocchi sono molto lontani la correlazione fra gli spin nei centri dei blocchi è uguale a quella di un qualunque punto di un blocco e un qualunque punto dell'altro blocco. Il fattore m appare perchè siti che sono a distanza 1 sul reticolo i cui

siti sono i centri dei blocchi di lato m sono a distanza m quando visti come siti sul reticolo prima di formare i blocchi. Quindi rispetto alla distribuzione limite la correlazione obbedisce ad una precisa legge di scala: se si scalano le distanze bisogna riscalare la correlazione con un fattore $m^{2d(1-\omega)}$.

Questa proprietà è vera qualunque sia la lunghezza di correlazione, finita o infinita. Possiamo rileggerla dicendo che guardare la distribuzione delle variabili di blocco equivale a guardare una configurazione tipica del sistema di spin da lontano, perchè così si riescono a percepire solo valori medi; per non avere una visione indistinta conviene mettere a fuoco cioè normalizzare opportunamente le medie (in modo che la fluttuazione sia finita). Fatta questa operazione quello che si vede è indipendente dalla distanza per grandi distanze. Se ξ è finita ad una distanza maggiore di ξ si vede ad alta temperatura tutto grigio (se i + sono neri e i - bianchi) e a bassa temperatura tutto bianco o tutto nero. Al punto critico quello che si vede a grande distanza non è così uniforme ed è indipendente dalla distanza.

Per m finito si ha

$$E_m[S_r S_{r+s}] \sim m^{2d(1-\omega)} \langle \sigma_{mr} \sigma_{m(r+s)} \rangle \quad (10.2.4)$$

La equazione (10.2.4) permette di trovare una relazione tra ω e l'esponente critico η che è definito da

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \sim |i - j|^{-d+2-\eta} \quad (10.2.5)$$

Infatti, fissando $r = 0$ si ha

$$E_m[S_0 S_s] \sim m^{2d(1-\omega)} \langle \sigma_0 \sigma_{ms} \rangle \sim m^{2d(1-\omega)} (ms)^{-d+2-\eta}$$

Nel limite $m \rightarrow \infty$ $E_\infty[S_0 S_s]$ deve essere indipendente da m da cui si

$$2\omega = 1 + \frac{2-\eta}{d}, \quad E_\infty[S_0 S_s] \sim s^{-2d(1-\omega)} \quad (10.2.6)$$

Possiamo riscrivere la relazione precedente come una condizione sulle funzioni di correlazione per le variabili originarie σ

$$\langle \sigma_0 \sigma_{ms} \rangle \sim m^{-2d(1-\omega)} \phi(s) \quad (10.2.7)$$

per grandi m , $s > m$, dove $\phi(s) \sim E_\infty[S_0 S_s]$.

Otteniamo anche informazioni sugli esponenti critici γ e ν

$$\chi \approx |\beta - \beta_c|^{-\gamma}, \quad \xi \approx |\beta - \beta_c|^{-\nu}$$

Infatti tra gli esponenti critici esiste una relazione che troviamo osservando che

$$\chi \approx \sum_{r=0}^{\xi} \langle \sigma_0 \sigma_r \rangle \approx r^{d-1} \approx \sum_{r=0}^{\xi} r^{d-1} r^{-d+2-\eta} \approx \xi^{2-\eta}$$

da cui

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (10.2.8)$$

È possibile in modo analogo ricavare altre relazioni tra gli esponenti critici

$$\beta = \frac{\nu}{2}(d-2) + \frac{\eta}{2}, \quad \delta = \frac{2d}{d-2+\eta}, \quad \alpha = 2 - d\nu$$

$$C \approx |\beta - \beta_c|^{-\alpha}, \quad m \approx |\beta - \beta_c|^{-\beta}, \quad h \approx m^\delta$$

In conclusione, per conoscere tutti gli esponenti critici basta conoscerne due. La normalizzazione delle variabili di blocco ne fissa uno e gli argomenti nella prossima sezione permettono di determinare l'altro.

10.2.1 Rinormalizzazione - Modello gaussiano

Concludiamo questa sezione osservando che nel caso del modello gaussiano le funzioni di correlazione connesse sono zero ad ogni livello m . Infatti

$$\begin{aligned} E_m[S_{r_i}S_{r_k}S_{r_l}S_{r_j}] &= m^{4d\omega} \sum_{\ell_i \in B_m(r_i)} \sum_{\ell_j \in B_m(r_j)} \sum_{\ell_k \in B_m(r_k)} \sum_{\ell_l \in B_m(r_l)} \langle \sigma_{\ell_i} \sigma_{\ell_k} \sigma_{\ell_l} \sigma_{\ell_j} \rangle \\ &= m^{4d\omega} \sum_P \sum_{\ell_i \in B_m(r_i)} \sum_{\ell_j \in B_m(r_j)} \sum_{\ell_k \in B_m(r_k)} \sum_{\ell_l \in B_m(r_l)} \langle \sigma_{\ell_i} \sigma_{\ell_k} \rangle \langle \sigma_{\ell_l} \sigma_{\ell_j} \rangle \\ &= \sum_P E_m[S_{r_i}S_{r_k}] E_m[S_{r_l}S_{r_j}] \end{aligned}$$

Quindi la distribuzione limite delle variabili di blocco è determinata dalla covarianza e dalla varianza. Per quanto detto sopra la covarianza

$$E_\infty[S_0S_s] \sim s^{-(d-2)}$$

Il decadimento della funzione a due punti mostra che $\eta = 0$ e $\omega = \frac{1}{2} + \frac{1}{d}$ per il modello gaussiano. Si può provare direttamente che la distribuzione della variabile di blocco normalizzata con ω è gaussiana usando la funzione caratteristica. Per definizione la funzione caratteristica per una variabile casuale ξ è data da

$$f_\xi(t) = \langle e^{i\xi t} \rangle.$$

Esiste un teorema generale per il quale, se una successione di funzioni caratteristiche converge, allora il suo limite è la funzione caratteristica del limite delle distribuzioni di probabilità corrispondenti. Consideriamo la variabile di blocco $S(N) = \frac{1}{N^{d\omega}} \sum_{i \in B_N} S_i$. La sua funzione caratteristica $\langle e^{i \frac{1}{N^{d\omega}} \sum_{i \in B_N} S_i t} \rangle$ si valuta facilmente osservando che il numeratore nell'attesa è la funzione di partizione del modello gaussiano con campo magnetico costante sul blocco considerato $h = \frac{i}{\beta N^{d\omega}} t$. Per cui

$$\langle e^{i \frac{1}{N^{d\omega}} \sum_i S_i t} \rangle = \exp\left\{-\frac{t^2}{2} \frac{1}{N^{2d\omega}} \sum_{ij \in B_N} A_{ij}^{-1}\right\}$$

Poichè $A_{ij}^{-1} = \langle S_i S_j \rangle$ si ha

$$\sum_{ij \in B_N} A_{ij}^{-1} \sim |B_N| \sum_{j \in B_N} \langle S_0 S_j \rangle \sim |B_N| \sum_{r=1}^N r^{d-1} r^{-(d-2)}$$

poichè $\eta = 0$ per il modello gaussiano, da cui

$$\frac{1}{N^{2d\omega}} \sum_{ij \in B_N} A_{ij}^{-1} \sim \frac{1}{N^{2d\omega}} \underbrace{|B_N|}_{=N^d} N^2 = 1$$

Per la funzione caratteristica

$$\langle e^{i \frac{1}{N^{d\omega}} \sum_i S_i t} \rangle = e^{-\frac{\bar{\chi} t^2}{\beta^2}}$$

dove $\bar{\chi}$ è la suscettività "rinormalizzata" data da

$$\bar{\chi} = \beta \lim_{N \rightarrow \infty} \langle S(N)^2 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-d\omega} \sum_{i \in B_N} \langle S_0 S_i \rangle.$$

È facile vedere che la funzione caratteristica di una distribuzione gaussiana con varianza $\bar{\chi}$ è esattamente $e^{-\frac{t^2}{2\bar{\chi}}}$. Quindi

$$P_N(x) = P(S(N) = x) \rightarrow G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{\chi}}} e^{-\frac{\beta x^2}{2\bar{\chi}}}$$

In conclusione, la distribuzione limite delle variabili di blocco nel caso del modello gaussiano al punto critico è una distribuzione gaussiana. Le normalizzazione però non è quella del teorema limite centrale e quindi il teorema del limite centrale non vale.

Il metodo della funzione caratteristica può dare informazioni anche nel caso in cui il modello di spin non sia esattamente risolubile. Denotiamo la funzione caratteristica della variabile di blocco S_N con $f_N(t)$. Osserviamo che

$$\frac{i^n}{N^{d\omega k}} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \log f_N(t) = \sum_{i_1 \dots i_n} \langle \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_n} \rangle_C$$

dove la somma è su tutte le n -ple di siti nel blocco B_N e le variabili σ_i sono a media nulla. Quindi

$$\log f_N(t) = \sum_{k=0}^N \frac{(it)^k}{k!} N^{-d\omega k} \sum_{i_1 \dots i_k} \langle \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_k} \rangle_C$$

dove la somma è solo su k pari. Da qui si vede che la distribuzione limite sarà gaussiana solo se $N^{-d\omega k} \sum_{i_1 \dots i_k} \langle \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_k} \rangle_C \rightarrow 0$ per $k > 2$. La varianza in tal caso sarà data da $\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-d\omega} \sum_{i \in B_N} \langle \sigma_0 \sigma_i \rangle$.

10.3 Trasformazione del gruppo di rinormalizzazione

La relazione che connette la distribuzione P_0 delle variabili di blocco S_0 con quella P_1 di S_1 definisce un operatore R sullo spazio delle distribuzioni di probabilità R . Gli operatori R_k ottenuti applicando k volte R formano un semigruppato detto gruppo di normalizzazione. La distribuzione limite è per costruzione il punto fisso di R

$$P_\infty = RP_\infty$$

Lo studio di R e soprattutto le sue proprietà di stabilità e i suoi attrattori permette in principio di determinare P_∞ data una P_0 . Purtroppo R non è lineare ed è molto complicato per cui la cosa più semplice che si può fare è fare un'analisi lineare basata sulla linearizzazione di R .

Si può lavorare nello spazio delle Hamiltoniane invece che nello spazio delle distribuzioni di probabilità perchè le distribuzioni di probabilità sono a volume finito le misure di Gibbs $\frac{e^{-\beta H}}{Z}$. Data una Hamiltoniana H_0 si costruisce la Hamiltoniana H_n per le variabili di blocco S_n che è in genere molto diversa da quella di partenza. Ad esempio se si parte da spin ± 1 già al primo passo lo spin assume valori in un insieme diverso. Ancora più importante, se l'interazione iniziale è a prossimi vicini ci possono essere diverse interazioni (diverso il range, diverso il numero degli spin interagenti etc.) in quella dei blocchi. Si possono parametrizzare le Hamiltoniane in termini degli accoppiamenti ed aggiungere all'insieme dei parametri un altro parametro che appare nella misura, la temperatura. La trasformazione R per le Hamiltoniane (usiamo la stessa notazione) associa ad un set dei parametri un altro insieme. Il punto fisso di questo operatore sarà una Hamiltoniana effettiva che contiene tutte le informazioni rilevanti al punto critico. Si può anche definire un operatore, che chiamiamo di nuovo R che agisce sullo spazio dei parametri. Sappiamo

già quale è il comportamento di R al variare del parametro iniziale β : per $\beta \neq \beta_c$ la lunghezza di correlazione è finita, vale quindi il teorema del limite centrale e i punti fissi sono gaussiani. Questi punti fissi hanno dei bacini di attrazione che devono essere separati da una superficie critica in modo che partendo da $\beta = \beta_c$ si rimane su questa superficie. Questo significa che il punto fisso sulla superficie critica deve essere attrattivo sulla superficie ma repulsivo verso l'esterno perchè se ci si muove verso l'esterno si è catturati dai punti fissi gaussiani. Facciamo ora una analisi molto qualitativa supponendo che sia sufficiente analizzare un numero finito di parametri. Sia H^* un elemento dello spazio delle Hamiltoniane corrispondente al punto fisso sulla superficie critica, ottenuto partendo da una Hamiltoniana $H_0(\beta_c)$. Studiamo l'equazione

$$H' = RH \quad (10.3.1)$$

Iteriamo la trasformazione k volte

$$H_k = R^k H$$

Trattiamo k per semplicità come una variabile continua λ che ha il ruolo del tempo per l'evoluzione di un sistema dinamico. Sia T il generatore del gruppo di evoluzione $e^T = R$

$$\frac{dH_\lambda}{d\lambda} = TH_\lambda$$

Per chiarire il fenomeno facciamo prima un esempio relativo al campo delle equazioni differenziali ordinarie non lineari. Sia $U(x, \lambda)$, $U(0, \lambda) = 0$ una funzione di x non lineare dipendente da un parametro λ , ad es. $U(x, \lambda) = -x(\lambda + x)$ e consideriamo l'equazione

$$\frac{dx}{dt} = -x(\lambda + x)$$

Sia x_0 soluzione stazionaria, quindi esistono due soluzioni stazionarie $x_0 = 0$ oppure $x_0 = -\lambda$. Perturbiamo la soluzione stazionaria $x = x_0 + \varepsilon y$, per $\varepsilon \ll 1$. Si ha

$$\frac{d(x_0 + \varepsilon y)}{dt} = -(x_0 + \varepsilon y)(\lambda + x_0 + \varepsilon y) = -x_0(\lambda + x_0) - x_0\varepsilon y - \varepsilon y\lambda - \varepsilon y x_0 - \varepsilon^2 y^2$$

e poichè x_0 è soluzione stazionaria si ottiene l'equazione per y

$$\frac{\varepsilon dy}{dt} = -\varepsilon(2x_0 y + y\lambda) - \varepsilon^2 y^2.$$

Il termine $-(2x_0 y + y\lambda)$ è la linearizzazione di $U(x, \lambda)$ intorno a x_0 . Se $x_0 = 0$, l'equazione linearizzata (trascurando cioè il termine di ordine ε) diventa

$$\frac{dy}{dt} = -y\lambda$$

la cui soluzione è $y = e^{-\lambda t} y_0$ che mostra che x_0 è soluzione stabile per $\lambda > 0$ e instabile per $\lambda < 0$. Se $x_0 = -\lambda$ l'equazione linearizzata diventa

$$\frac{dy}{dt} = y\lambda$$

e quindi $x_0 = -\lambda$ diventa stabile per $\lambda < 0$. In conclusione, per $\lambda > 0$ l'origine è un equilibrio stabile, mentre quando λ attraversa il valore $\lambda = 0$ appare un nuovo equilibrio stabile $x_0 = -\lambda$.

Per linearizzare l'equazione di punto fisso intorno al punto critico partiamo da una H molto vicina a H^* : $H = H^* + \Delta H$, con ΔH di ordine ε , per ε piccolo. Chiamiamo ΔH_λ la soluzione ad un tempo successivo λ : $H_\lambda = H^* + \Delta H_\lambda$. Sostituiamo nell'equazione;

$$\frac{d(\Delta H_\lambda)}{d\lambda} = T_L \Delta H_\lambda + O(\Delta H_\lambda^2) \quad (10.3.2)$$

dove T_L , $e^{T_L} = R_L$, è l'operatore linearizzato intorno ad H^* .

Per ε piccolo il comportamento della perturbazione sarà quello determinato da T_L .

Nell'analisi lineare delle proprietà di R , quindi nello studio dell'operatore R_L linearizzato intorno ad un punto fisso, le proprietà del punto fisso sono legate agli autovalori di T_L : $R_L = e^{T_L}$:

1. se il punto fisso è attrattivo tutti gli autovalori di T_L hanno parti reali negative,
2. se il punto fisso è repulsivo tutti gli autovalori di T_L hanno parti reali positive,
3. se il punto fisso è misto ci sono autovalori di T_L con parti reali negative e positive.

Nel caso dei blocchi di spin il ruolo di λ è giocato da β e quando β attraversa il valore β_c appare un punto fisso diverso da quello gaussiano.

Sia e_j la base degli autovettori di T_L e ℓ_j i corrispondenti autovalori. La perturbazione iniziale (ΔH_0) si può decomporre sulla base degli autovalori e_j di T_L : $(\Delta H_0) = \sum_j t_j e_j$ da cui $(\Delta H_\lambda) = \sum_j e^{\lambda \ell_j} t_j e_j$ ($R e_j = e^{\ell_j} e_j$). Supponiamo che ci sia una sola direzione instabile e_1 cioè $\ell_1 > 0$ e che la perturbazione iniziale sia in questa direzione, in particolare nella direzione in cui ci si allontana dalla superficie critica. Il coefficiente t_1 deve dipendere da $\beta - \beta_c$ (di ordine ε) perchè variando β si esce dalla superficie critica. Possiamo scrivere per grandi λ e piccoli $\beta - \beta_c$

$$H_\lambda \approx H^* + e^{\lambda \ell_1} e_1 |\beta - \beta_c| + \dots = e^{\ell_1 [\lambda + \frac{\log |\beta - \beta_c|}{\ell_1}]} e_1 + \dots$$

Il termine $\tau = -\frac{\log |\beta - \beta_c|}{\ell_1}$ ha il significato fisico di tempo effettivo che la traiettoria spende nell'intorno del punto critico. Infatti se $\lambda < \tau$ l'esponente nell'esponenziale $e^{\ell_1 [\lambda - \tau]}$ è negativo e la traiettoria non si allontana dal punto critico per cui la hamiltoniana non sarà molto diversa da quella critica. Per $\lambda > \tau$ invece si entra nel bacino di attrazione dei punti fissi gaussiani di alta e bassa temperatura e i blocchi di spin saranno scorrelati. In conclusione, le variabili di blocco sono correlate per $\tau = -\frac{\log |\beta - \beta_c|}{\ell_1}$ e scorrelate altrimenti. Poichè $e^{T_L} = R_L$ si ha $\Delta H_\lambda = R_L^\lambda \Delta H_0$, e, tornando al linguaggio delle iterazioni discrete con indice k , $\Delta H_k = R^k \Delta H_0 = e^{(k-\tau)\ell_1} \Delta H_0 + \dots$, si ha che e^k è dell'ordine della dimensione dei blocchi di spin, K , per cui si ha per \bar{K} , la dimensione corrispondente al tempo critico $\bar{\lambda} = \tau$

$$\bar{K} = |\beta - \beta_c|^{-\frac{1}{\ell_1}} \quad (10.3.3)$$

La dimensione dei blocchi di spin \bar{K} è tale che blocchi di dimensione più piccola sono correlati e quelli di dimensione più grande sono scorrelati quindi è proporzionale alla lunghezza di correlazione ξ . Poichè $\xi \approx |\beta - \beta_c|^{-\nu}$ si ha la relazione cercata tra un esponente critico e l'autovalore instabile di R_L :

$$\nu = \frac{1}{\ell_1} \quad (10.3.4)$$

Capitolo 11

Dinamica dei Fluidi

(cortesia del Prof. R. Esposito)

Nella prima parte di queste note è stata formulata la La Meccanica Statistica dell'equilibrio che ha come oggetto la comprensione delle proprietà fisiche dei sistemi costituiti da un numero grande ($N \sim 10^{23}$) di particelle in equilibrio. In questa seconda parte saranno trattati fenomeni di non equilibrio. Questo capitolo è dedicato alla formulazione su base fenomenologica delle equazioni dei fluidi, le equazioni di Eulero e Navier-Stokes. Premettiamo alcune nozioni di Meccanica dei Continui.

11.1 Nozione di sistema continuo

Supponiamo assegnato una volta per tutte un sistema di riferimento inerziale \mathcal{I} rispetto al quale valuteremo le coordinate spazio-temporali associate agli eventi relativi al sistema continuo. Supporremo inoltre fissate delle unità di misura macroscopiche (ad esempio i centimetri ed i secondi). Questa assunzione è coerente con la necessità di caratterizzare la scala macroscopica come quella tale che in ogni volume macroscopico, per quanto piccolo, sia contenuto un numero enorme di molecole. In tal modo osservazioni condotte su questa scala non riescono a distinguere l'individualità delle singole molecole ma percepiscono la distribuzione di materia come continua.

Per questa ragione diremo *sistema continuo* una distribuzione continua di massa in \mathbb{R}^3 cioè una distribuzione di massa tale che per ogni insieme misurabile $A \subset \mathbb{R}^3$ detta $m_t(A) \geq 0$ la massa contenuta nell'insieme A al tempo t , la misura $A \mapsto m_t(A)$ sia assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue¹.

Esiste quindi una funzione $\rho(x, t) \geq 0$ detta *densità (di massa)*, tale che

$$m(A) = \int_A dx \rho(x, t). \quad (11.1.1)$$

In altre parole, in ogni volume elementare dx centrato in un generico punto $x \in \mathbb{R}^3$ è contenuta una massa $\rho(x, t)dx$, corrispondente alla presenza di un enorme numero di molecole nell'elemento di volume dx . Il punto di vista continuo ignora l'individualità di tali particelle e studia il comportamento di questo elemento *macroscopico* nel suo insieme.

Una parte del sistema continuo, contenuta in un volume dx centrato intorno al punto x al tempo t sarà detta *elemento materiale* o *particella* del sistema continuo e x sarà detta *posizione*

¹Una misura $A \rightarrow \mu(A)$ si dice assolutamente continua rispetto alla misura $A \rightarrow \nu(A)$ se, per ogni insieme misurabile A l'essere $\nu(A) = 0$ implica $\mu(A) = 0$. In tal caso esiste una funzione misurabile e positiva $\gamma(x)$, detta derivata di Radon Nikodym, tale che $\mu(A) = \int_A \gamma(x) d\nu(x)$.

della particella al tempo t . Sottolineiamo ancora una volta che una particella del continuo non deve essere confusa con una molecola, rappresentando invece un agglomerato di un numero molto grande di molecole.

La posizione di ciascuna particella del sistema continuo varia nel tempo. Per individuare in modo univoco ciascuna particella del sistema continuo utilizzeremo ad esempio le coordinate $X \in \mathbb{R}^3$ della posizione occupata dalla particella al tempo $t = 0$. Al variare del tempo t inoltre $x = \Phi(X, t)$ denoterà la posizione al tempo t della particella che al tempo $t = 0$ si trovava in X . La funzione $X \rightarrow \Phi(X, t)$ è quindi tale che

$$\Phi(X, 0) = X. \quad (11.1.2)$$

Assumeremo che la funzione Φ sia differenziabile rispetto ad X e t e che, per ogni t , sia invertibile come funzione di X . Esiste cioè una funzione $x \rightarrow \Phi^{-1}(x, t)$ tale che

$$\Phi(\Phi^{-1}(x, t), t) = x \quad \forall x \in \mathbb{R}^3. \quad (11.1.3)$$

Questa assunzione, che implica che ciascuna particella (macroscopica) mantiene la sua individualità nel corso del tempo, traduce il fatto che due distinti elementi materiali non possono mai occupare la stessa posizione (*impenetrabilità dei corpi*). Le condizioni di regolarità sono essenziali agli sviluppi futuri e il loro venir meno corrisponde al verificarsi di fenomeni per i quali il modello che ci accingiamo a formulare diviene inadeguato. Ogni funzione regolare (in un senso che verrà specificato più avanti) $(X, t) \rightarrow \Phi(X, t)$ soddisfacente le suddette proprietà sarà detta un *moto* o un *flusso* del sistema continuo.

L'invertibilità di Φ mostra che possiamo indifferentemente individuare la generica particella del sistema continuo mediante le sue coordinate X all'istante iniziale oppure mediante le sue coordinate x al tempo t . La descrizione in termini delle X è detta *descrizione Lagrangiana* mentre quella in termini delle x è detta *descrizione Euleriana*.

Si consideri ora la matrice $F = \nabla_X \Phi$ di componenti

$$F_{i,j}(X, t) = \frac{\partial \Phi_i(X, t)}{\partial X_j}, \quad i, j = 1, \dots, 3. \quad (11.1.4)$$

La matrice F , che prende il nome di *gradiente di deformazione*, si riduce all'identità per $t = 0$ in conseguenza di (11.1.2). Si assumerà, conformemente all'ipotesi di invertibilità di Φ che F sia non singolare per ogni X e t e che

$$\det F(X, t) \neq 0 \quad \forall (X, t).$$

Per ogni X fissato la curva $t \rightarrow \Phi(X, t)$ si dice *traiettoria* della particella X . La velocità e l'accelerazione della particella X al tempo t sono date ovviamente dalle espressioni

$$\tilde{u}(X, t) = \frac{\partial \Phi(X, t)}{\partial t}, \quad \tilde{a}(X, t) = \frac{\partial^2 \Phi(X, t)}{\partial t^2}. \quad (11.1.5)$$

I campi vettoriali $X \rightarrow \tilde{u}(X, t)$ e $X \rightarrow \tilde{a}(X, t)$ sono detti rispettivamente *campo di velocità Lagrangiano* ed *campo di accelerazione Lagrangiano* al tempo t .

Si supponga ora fissato il punto x e si denotino con $u(x, t)$ ed $a(x, t)$ la velocità e l'accelerazione della particella che transita per x al tempo t :

$$u(x, t) = \tilde{u}(\Phi^{-1}(x, t), t), \quad a(x, t) = \tilde{a}(\Phi^{-1}(x, t), t). \quad (11.1.6)$$

I campi vettoriali $x)u(x, t)$ ed $x)a(x, t)$ sono detti rispettivamente *campo di velocità Euleriano* (o semplicemente *campo di velocità*) e *campo di accelerazione Euleriano* (o semplicemente *campo di accelerazione*) al tempo t .

Dalle definizioni suddette segue che

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi(X, t) = u(\Phi(X, t), t). \quad (11.1.7)$$

Quando il campo di velocità Euleriano $u(x, t)$ è noto, questa equazione, insieme alla condizione (11.1.2) può essere interpretato, come un problema ai valori iniziali nell'incognita $t)\Phi(X, t)$.

La relazione tra i campi di velocità ed accelerazione Lagrangiani ed Euleriani vale più in generale per una qualunque osservabile "Euleriana $g(x, t)$, (cioè un'osservabile misurata nell'ambito di una descrizione Euleriana) e la sua corrispondente osservabile "Lagrangiana" $\tilde{g}(X, t)$ (cioè la medesima osservabile misurata nella descrizione Lagrangiana). Esa è data da

$$\tilde{g}(X, t) = g(\Phi(X, t), t), \quad g(x, t) = \tilde{g}(\Phi^{-1}(x, t), t), \quad (11.1.8)$$

che estende in modo ovvio la (11.1.6):

$$u(x, t) = \tilde{u}(\Phi^{-1}(x, t), t) = \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\Phi^{-1}(x, t), t), \quad \tilde{u}(X, t) = u(\Phi(X, t), t) \quad (11.1.9)$$

e

$$a(x, t) = \tilde{a}(\Phi^{-1}(x, t), t) = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2}(\Phi^{-1}(x, t), t), \quad \tilde{a}(X, t) = a(\Phi(X, t), t) \quad (11.1.10)$$

Notiamo che tra le derivate temporali di un'osservabile Lagrangiana ed Euleriana sussiste la seguente relazione:

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{g}(X, t) = \frac{\partial}{\partial t}g(x, t) + u(x, t) \cdot \nabla_x g(x, t), \quad (11.1.11)$$

quando x ed X sono legati dalla relazione $x = \Phi(X, t)$. Per ottenere la relazione (11.1.11) basta differenziare la prima delle (11.1.8) con la regola di derivazione delle funzioni composte,

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{g}(X, t) = \left. \frac{\partial g(\Phi(X, t), t)}{\partial t} \right|_X = \left. \frac{\partial g(x, t)}{\partial t} \right|_x + \nabla_x g(x, t) \cdot \frac{\partial \Phi(X, t)}{\partial t}$$

e usare la prima delle (11.1.9).

La combinazione di derivate che appare nel membro destro della (11.1.11) rappresenta la derivazione lungo la traiettoria di una fissata particella del sistema e prende il nome di *derivata sostanziale*. Per indicarla si usa il simbolo

$$\frac{D}{Dt} = \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_x + u(x, t) \cdot \nabla_x.$$

In particolare, per $g(x, t) = u(x, t)$ si ottiene

$$a(x, t) = \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + u(x, t) \cdot \nabla_x u(x, t) = \frac{Du}{Dt}(x, t). \quad (11.1.12)$$

Una famiglia $\{A_t \subset \mathbb{R}^3 \mid t \in [0, \bar{t}]\}$ di sottoinsiemi di \mathbb{R}^3 si dice *volume materiale* se per ogni $t \in [0, \bar{t}]$, per ogni $x \in A_t$ risulta $x = \Phi(X, t)$ per qualche $X \in A_0$. In altri termini, un volume materiale è un volume che si muove insieme con il sistema continuo.

Nella formulazione delle equazioni del moto per i sistemi continui saremo interessati a considerare quantità che si esprimono come integrali di osservabili su volumi materiali, della forma

$$\int_{A_t} dxg(x, t)$$

e a valutarne la loro derivata temporale. Proviamo a questo scopo il seguente

Teorema 11.1.1 (del trasporto). : *Se g ed u sono differenziabili in A_t , per $t \in [0, \bar{t}]$ e Φ è regolare, allora*

$$\frac{d}{dt} \int_{A_t} dxg(x, t) = \int_{A_t} dx \left[\frac{Dg}{Dt} + g \operatorname{div} u \right] (x, t). \quad (11.1.13)$$

Osservazione 11.1.1. *Il teorema del trasporto nel caso $g = 1$ si riduce al calcolo della derivata temporale di un volume materiale ed il risultato è quello stabilito nel lemma preliminare alla dimostrazione del teorema di Liouville per i sistemi Hamiltoniani.*

Dimostrazione. La dimostrazione si basa sul passaggio da variabili Euleriane a variabili Lagrangiane. Si usa cioè la rappresentazione

$$\int_{A_t} dxg(x, t) = \int_{A_0} dXJ(X, t)\tilde{g}(X, t), \quad (11.1.14)$$

ove

$$J(X, t) = |\det F(X, t)|.$$

Differenziando la relazione (11.1.14) rispetto al tempo ed usando la 11.1.11 si ottiene

$$\frac{d}{dt} \int_{A_t} dxg(x, t) = \int_{A_0} dX \frac{\partial J(X, t)}{\partial t} \tilde{g}(X, t) + \int_{A_0} dX J(X, t) \frac{\partial \tilde{g}(X, t)}{\partial t} \quad (11.1.15)$$

$$= \int_{A_0} dX \frac{\partial J(X, t)}{\partial t} \tilde{g}(X, t) + \int_{A_t} dx \frac{Dg(x, t)}{Dt} \quad (11.1.16)$$

Per concludere la prova basta far vedere che risulta

$$\frac{\partial J(X, t)}{\partial t} = J(X, t) \operatorname{div} u(\Phi(X, t), t) \quad (11.1.17)$$

Per provare la (11.1.17), osserviamo anzitutto che, poichè $\det F(X, 0) = 1$ e la matrice F non è singolare per ogni t , per continuità $\det F > 0$ e quindi il valore assoluto è irrilevante. D'altra parte, per la 11.1.7

$$\Phi(X, t) = X + \int_0^t dsu(\Phi(X, s), s).$$

Differenziando rispetto ad X si ottiene

$$F(X, t) = \mathbb{I} + \int_0^t ds \nabla_x u(\Phi(X, s), s) F(X, s),$$

ove

$$[\nabla_x u F]_{i,j} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} F_{k,j}.$$

Pertanto

$$\frac{\partial F(X, t)}{\partial t} = \nabla_x u(\Phi(X, t), t) F(X, t) \quad (11.1.18)$$

Ricordando infine che la derivata di un determinante è data da una somma di determinanti di matrici che sono ottenute sostituendo di volta in volta ad una colonna la sua derivata e lasciando inalterate le altre, si ottiene

$$\frac{\partial J(X, t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^3 \det F^{(i)}(X, t),$$

dove $F^{(i)}$ è ottenuto sostituendo l' i -esima colonna di F con la sua derivata temporale. Dall'espressione della derivata temporale di F si ottiene allora

$$\det F^{(i)} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \det F$$

in quanto i contributi con $k \neq i$ annullano i rispettivi determinanti. La (11.1.17) è allora dimostrata e con essa il teorema del trasporto. \square

Passeremo ora a formulare le leggi fondamentali della Meccanica dei sistemi continui.

11.2 Conservazione della massa

Ricordiamo che la distribuzione di massa è caratterizzata dalla densità $\rho(x, t) \geq 0$ e che per ogni insieme misurabile A la quantità

$$m_t(A) = \int_A dx \rho(x, t)$$

rappresenta la massa contenuta nell'insieme A .

La legge di conservazione della massa stabilisce che *non vi è creazione o distruzione di massa* e, in altri termini, in un volume materiale $\{A_t \mid t \in [0, \bar{t}]\}$ la massa è costante. Si assume quindi

$$\frac{d}{dt} m_t(A_t) = 0 \tag{11.2.1}$$

per ogni t e per ogni volume materiale. Poichè la funzione ρ è assunta differenziabile, utilizzando il teorema del trasporto, otteniamo

$$\int_{A_t} dx \left[\frac{D}{Dt} \rho(x, t) + \rho(x, t) \operatorname{div} u(x, t) \right] = 0.$$

Questa equazione è valida qualunque sia il volume materiale A_t . In conseguenza risulta

$$\frac{D}{Dt} \rho(x, t) + \rho(x, t) \operatorname{div} u(x, t) = 0. \tag{11.2.2}$$

Ricordando la definizione di derivata sostanziale, la precedente equazione si scrive anche

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} [\rho u] = 0. \tag{11.2.3}$$

L'equazione (11.2.3) prende il nome di *equazione di continuità*. La sua validità è legata esclusivamente alla conservazione della massa e viene assunta in tutti i modelli che escludono la presenza di reazioni chimiche.

Al fine di fornire un'interpretazione dell'equazione di continuità, consideriamo piú in generale una funzione differenziabile $\psi(x, t)$ per la quale esista un campo vettoriale differenziabile $j_\psi(x, t)$ tale che risulti

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi + \operatorname{div} [j_\psi] = 0. \quad (11.2.4)$$

Quando la (11.2.4) è verificata, si dice che la funzione ψ soddisfa una *legge di conservazione*.

Consideriamo un insieme misurabile A fissato (non materiale) con frontiera regolare ∂A . Integrando la 11.2.4 sull'insieme A si ottiene allora

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_A dx \psi(x, t) + \int_A dx \operatorname{div} j_\psi(x, t) = 0.$$

Per il teorema di Gauss, stanti le ipotesi di regolarità fatte, risulta

$$\int_A dx \operatorname{div} j_\psi(x, t) = \int_{\partial A} d\sigma(x) j_\psi(x, t) \cdot n(x)$$

dove $n(x)$ rappresenta la normale esterna alla superficie ∂A nel punto x e $d\sigma(x)$ è la misura sulla superficie ∂A indotta dalla misura di Lebesgue. In conseguenza di ciò, per ogni insieme A dotato di frontiera regolare risulta

$$\frac{d}{dt} \int_A dx \psi(x, t) = - \int_{\partial A} d\sigma(x) j_\psi(x, t) \cdot n(x). \quad (11.2.5)$$

L'equazione (11.2.5) mostra che la variazione nel tempo dell'integrale della funzione ψ sull'insieme A è dovuta esclusivamente a fenomeni di trasferimento che avvengono sulla frontiera di A : *non vi sono fenomeni di creazione o distruzione di ψ nei punti interni di A* . Inoltre l'integrale di ψ decresce quando j_ψ forma un angolo acuto con la normale esterna a ∂A , cioè è diretto verso l'esterno di A , mentre cresce nel caso opposto. Per questa ragione il campo vettoriale j_ψ è detto *corrente* di ψ . Le considerazioni suddette giustificano il nome di legge di conservazione dato all'equazione (11.2.4) e forniscono un'interpretazione del campo vettoriale j_ψ . In particolare, l'equazione di continuità è la legge di conservazione per la densità ρ e la corrente $j_\rho = \rho u$ è detta *corrente di massa*.

Osservazione 11.2.1. *Se la funzione g del teorema del trasporto può scriversi come $g = \rho\psi$ con ψ differenziabile, allora per l'equazione di continuità, il teorema del trasporto assume la seguente forma piú semplice:*

$$\frac{d}{dt} \int_{A_t} dx \rho \psi = \int_{A_t} dx \rho \frac{D}{Dt} \psi. \quad (11.2.6)$$

Basta infatti osservare che

$$\frac{D}{Dt}(\rho\psi) + \rho\psi \operatorname{div} vu = \rho \frac{D}{Dt} \psi + \psi \left[\frac{D}{Dt} \rho + \rho \operatorname{div} /u \right] = \rho \frac{D}{Dt} \psi.$$

Osservazione 11.2.2. *La conservazione della massa fornisce la seguente relazione tra la densità al tempo $t = 0$ e quella all'istante generico:*

$$\rho(\Phi(X, t), t) J(X, t) = \rho(X, 0). \quad (11.2.7)$$

Infatti, la costanza di $m_t(A_t)$ implica $m_t(A_t) = m_0(A_0)$ per ogni $A \subset \mathbb{R}^3$ e cioè

$$\int_{A_t} dx \rho(x, t) = \int_{A_0} dX \rho(X, 0).$$

Riscrivendo il primo integrale in termini delle coordinate Lagrangiane X si ottiene

$$\int_{A_t} dx \rho(x, t) = \int_{A_0} dX J(X, t) \rho(\Phi(X, t), t)$$

e quindi

$$\int_{A_0} dX J(X, t) \rho(\Phi(X, t), t) = \int_{A_0} dX \rho(X, 0). \quad (11.2.8)$$

L'arbitrarietà di A_0 implica la (11.2.7).

L'equazione (11.2.7) che esprime la conservazione della massa in forma Lagrangiana, è detta anche equazione di continuità Lagrangiana.

11.3 Bilancio dell'impulso (equazione di Newton).

La massa $\rho(x, t)dx$ contenuta al tempo t in un volumetto dx centrato nel punto x si muove con velocità $u(x, t)$. L'impulso ad essa associato è $\rho(x, t)u(x, t)dx$. Per questa ragione, per ogni $A \subset \mathbb{R}^3$ si dice *impulso* di A al tempo t il vettore

$$P_t(A) = \int_A dx \rho(x, t)u(x, t).$$

Denoteremo inoltre con $F_t(A)$ il risultante di tutte le forze agenti su A al tempo t . In analogia con la prima equazione cardinale della Meccanica, si assume la seguente *legge di bilancio dell'impulso*: per ogni volume materiale $\{A_t \mid t \in [0, \bar{t}]\}$, la derivata temporale dell'impulso $P_t(A_t)$ è pari al risultante $F_t(A_t)$ delle forze agenti su A_t . In formule:

$$\frac{d}{dt} P_t(A_t) = F_t(A_t) \quad (11.3.1)$$

per ogni volume materiale.

Occorre ora formulare delle assunzioni sulla natura delle forze agenti su ciascuna parte A del sistema continuo. Si assume che le forze agenti su A siano di due tipi: un primo tipo, il cui risultante si denota con $F_t^V(A)$, rappresenta le azioni che vengono esercitate dall'esterno su tutte le particelle di A . Un esempio di forza di questo tipo è l'attrazione di gravità. La forza $F_t^V(A)$ è detta *forza di volume* e si assume che essa sia *assolutamente continua rispetto alla massa*, e cioè che esista un campo vettoriale $b(x, t)$ regolare, detto *forza specifica* (o *forza per unità di massa*) tale che

$$F_t^V(A) = \int_A dx \rho(x, t)b(x, t). \quad (11.3.2)$$

La funzione $b(x, t)$, rappresentando le forze agenti dall'esterno, si supponrà nota ed in particolare, sarà nulla per i sistemi isolati.

Le forze del secondo tipo, il cui risultante si denota con $F_t^S(A)$, rappresenta l'azione delle altre parti del sistema sulla parte A . Si suppone che queste forze siano a corto raggio e che si esplicino soltanto sulla frontiera ∂A di A . Pertanto $F_t^S(A)$ è assunta assolutamente continua rispetto alla superficie di A e cioè si suppone che esista una funzione vettoriale regolare $\varphi(x, n, t)$, detta *sforzo specifico agente in x al tempo t su una superficie unitaria di normale $n = n(x)$* , tale che

$$F_t^S(A) = \int_{\partial A} d\sigma(x) \varphi(x, t, n(x)). \quad (11.3.3)$$

L'ipotesi (11.3.3) è nota come *ipotesi di Eulero-Cauchy sugli sforzi*.

In conseguenza di queste assunzioni, ricordando inoltre il teorema del trasporto (11.2.6), la legge di bilancio dell'impulso si scrive

$$\int_{A_t} dx \rho(x, t) \frac{D}{Dt} u(x, t) = \int_{A_t} dx \rho(x, t) b(x, t) + \int_{\partial A_t} d\sigma(x) \varphi(x, t, n(x)). \quad (11.3.4)$$

Una prima conseguenza della (11.3.4) è il teorema di Cauchy sugli sforzi che stabilisce che la dipendenza dello sforzo specifico φ dalla direzione n è necessariamente lineare.

Teorema 11.3.1 (di Cauchy). *Esiste un campo di matrici*

$$S(x, t) = (S_{i,j}(x, t), i, j = 1, \dots, 3)$$

tale che

$$\varphi(x, t, n) = S(x, t)n, \quad (11.3.5)$$

e in termini di componenti,

$$\varphi_i(x, t, n) = \sum_{j=1}^3 S_{i,j}(x, t) n_j.$$

Il campo di matrici S è detto *tensore degli sforzi* (Non discuteremo il carattere tensoriale di questa quantità, peraltro ovvio al lettore familiare con la nozione di tensore.)

Dimostrazione. Osserviamo che, se A_t^ε è una famiglia di volumi materiali tale che

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{|A_t^\varepsilon|}{|\partial A_t^\varepsilon|} = 0,$$

ove $|A|$ denota il volume di A e $|\partial A|$ denota la superficie di ∂A , allora

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\partial A_t^\varepsilon|} \int_{\partial A_t^\varepsilon} d\sigma(x) \varphi(x, t, n(x)) = 0. \quad (11.3.6)$$

Infatti, applicando la (11.3.4) al volume materiale A_t^ε , notando che, se ρ , b e Du/Dt sono regolari,

$$\left| \int_{A_t^\varepsilon} dx \rho \frac{D}{Dt} u \right| \leq C |A_t^\varepsilon|, \quad \left| \int_{A_t^\varepsilon} dx \rho b \right| \leq C |A_t^\varepsilon|$$

e dividendo per $|\partial A_t^\varepsilon|$ si ottiene la (11.3.6).

In conseguenza di (11.3.6) si ha

$$\varphi(x, t, -n) = -\varphi(x, t, n) \quad (11.3.7)$$

che rappresenta il *principio di azione e reazione per gli sforzi*. Per dimostrare la (11.3.7), basta applicare la (11.3.6) ad una regione cilindrica (Il cilindro non ha frontiera regolare, ma basta ammorbidire gli spigoli corrispondenti al contatto tra le superfici di base e la superficie laterale per dare senso all'argomento che segue.)

\mathcal{C} centrata in x , le cui basi, di raggio ε , siano perpendicolari ad n e la cui altezza sia ε^2 . La frontiera di questa regione è allora costituita dall'unione dei cerchi C_1 e C_2 le cui normali esterne sono rispettivamente n e $-n$ e dalla superficie laterale Σ . Si ha

$$\int_{\mathcal{C}} \varphi_i(x, t, n) d\sigma(x) = \pi \varepsilon^2 (\varphi_i(\xi_1, t, n) + \varphi_i(\xi_2, t, -n)) + 2\pi \varepsilon^3 \varphi_i(\xi \lambda_3, t, -n_3),$$

dove ξ_α sono punti opportuni in C_α per $\alpha = 1, 2$, mentre ξ_3 ed n_3 sono un punto opportuno ed una direzione opportuna su Σ . Dividendo per ε^2 , prendendo il limite $\varepsilon \rightarrow 0$, ed usando la (11.3.6), per la continuità di φ si ottiene la (11.3.7).

La dimostrazione del teorema di Cauchy segue la stessa logica ma richiede l'uso di una regione piú complicata. Per costruire questa regione, che si denoterà con \mathcal{T} , detta *tetraedro di Cauchy* (Anche in questo caso, per ottenere una regione dotata di frontiera regolare occorre ammorbidire gli spigoli ed i vertici.), supponiamo che n non sia parallelo a nessun piano coordinato e consideriamo nel punto x tre rette r_i , $i = 1, \dots, 3$ parallele agli assi coordinati ed il piano perpendicolare ad n posto a distanza ε da x in modo tale che le intersezioni x_i di questo piano con le rette r_i ed il punto x costituiscano i vertici di un tetraedro \mathcal{T} e n sia la normale esterna alla faccia Σ_0 di \mathcal{T} non parallela ai piani coordinati. Denoteremo inoltre con Σ_i , $i = 1, \dots, 3$ le facce parallele ai piani coordinati ed aventi come normali esterne gli opposti dei vettori di base, $-e_i$. Per costruzione se n_i sono le componenti di n , si ha

$$|\Sigma_j| = |n_j| |\Sigma_0|.$$

Pertanto, $|\partial\mathcal{T}| = |\Sigma_0|(1 + \sum_{j=1}^3 |n_j|) = O(\varepsilon^2)$, mentre ovviamente $|\mathcal{T}| = O(\varepsilon^3)$. Con lo stesso argomento usato in precedenza si ottiene allora

$$\varphi(x, t, n) + \sum_{j=1}^3 \varphi(x, t, -e_j) |n_j| = 0.$$

Se $n_j > 0$ per $j = 1, \dots, 3$, la precedente relazione implica

$$\varphi(x, t, n) = \sum_{j=1}^3 \varphi(x, t, e_j) n_j$$

che coincide con la tesi del teorema di Cauchy quando si pone

$$S_{i,j}(x, t) = \varphi_i(x, t, e_j).$$

In pratica le $S_{i,j}$, al variare di i rappresentano le componenti dello sforzo su una superficie per x parallela al piano coordinato di normale e_j . Nel caso che qualcuno degli n_j sia negativo, basta sostituire il corrispondente vettore di base con il suo opposto per ottenere il risultato.

Infine, se n è parallelo ad un piano coordinato il risultato segue per continuità da quanto dimostrato. \square

Il teorema di Cauchy consente di esprimere le forze di superficie in termini di un integrale di volume mediante il teorema di Gauss:

$$F_t^S(A) = \int_{\partial A} d\sigma(x) \varphi(x, t, n(x)) = \int_{\partial A} d\sigma(x) S(x, t) n(x) = \int_A dx \operatorname{div} S(x, t),$$

ove

$$[\operatorname{div} S(x, t)]_i = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial S_{i,j}}{\partial x_j}(x, t).$$

Il bilancio dell'impulso diviene così

$$\int_{A_t} dx \rho(x, t) \frac{D}{Dt} u(x, t) = \int_{A_t} dx \rho(x, t) b(x, t) + \int_{A_t} dx \operatorname{div} S(x, t). \quad (11.3.8)$$

e l'arbitrarietà della regione A_t comporta

$$\rho(x, t) \frac{D}{Dt} u(x, t) = \operatorname{div} S(x, t) + \rho(x, t) b(x, t), \quad (11.3.9)$$

che è detta *legge di bilancio locale dell'impulso*. Ricordando la definizione di Du/Dt , l'equazione 11.3.9 si scrive anche

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla_x) u = \operatorname{div} S + \rho b, \quad (11.3.10)$$

ove si è usata la notazione abbreviata $(u \cdot \nabla_x) g = \sum_{i=1}^3 u_i \partial_{x_i} g$. Ricordando anche l'equazione di continuità, il bilancio locale dell'impulso può anche scriversi nella forma

$$\partial_t(\rho u_i) + \sum_{k=1}^3 \partial_{x_k} [\rho u_i u_k - S_{i,k}] = \rho b_i, \quad i = 1, \dots, 3. \quad (11.3.11)$$

Introducendo poi la matrice $u \otimes u$ di componenti

$$(u \otimes u)_{i,j} = u_i u_j, \quad i, j = 1, \dots, 3$$

che si legge “ u tensore u ”, la (11.3.11) può essere scritta più brevemente

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u - S] = \rho b. \quad (11.3.12)$$

Nel caso $b = 0$ (sistema isolato) la (11.3.11) mostra che l' i -esima componente dell'impulso soddisfa una legge di conservazione e la corrente corrispondente è data dal vettore $j_{\rho u_i}$ la cui k -esima componente è

$$(j_{\rho u_i})_k = \rho u_i u_k - S_{i,k}.$$

11.4 Bilancio del momento angolare.

Come in Meccanica, anche in Dinamica dei fluidi, a fianco della prima equazione cardinale, che traduce il bilancio dell'impulso, vi è una seconda equazione che traduce il bilancio del momento angolare. Per stabilirla definiamo *momento angolare di A al tempo t* la quantità

$$K_t(A) = \int_A dx \rho(x, t) [x \wedge u(x, t)],$$

avendo fissato una volta per tutte il polo nell'origine. Definiamo inoltre *momento delle forze di superficie* la quantità

$$M_t^S(A) = \int_{\partial A} d\sigma(x) [x \wedge \varphi(x, t, n(x))]$$

e *momento delle forze di volume* la quantità

$$M_t^V(A) = \int_A dx \rho(x, t) [x \wedge b(x, t)].$$

La *legge di bilancio del momento angolare* stabilisce che per ogni volume materiale A_t risulta

$$\frac{d}{dt} K_t(A_t) = M_t^S(A) + M_t^V(A). \quad (11.4.1)$$

Usando il teorema del trasporto e ricordando che $Dx/Dt = u$ e che $u \wedge u = 0$, otteniamo grazie al teorema di Cauchy

$$\int_{A_t} \rho(x, t) x \wedge \frac{D}{Dt} u(x, t) = \int_{\partial A_t} d\sigma(x) [x \wedge (S(x, t)n(x))] + \int_{A_t} dx \rho(x, t) [x \wedge b(x, t)]. \quad (11.4.2)$$

Il teorema di Gauss implica

$$\int_{\partial A_t} d\sigma(x) [x \wedge (S(x, t)n(x))] = \int_{A_t} dx \operatorname{div} [x \wedge S],$$

ove

$$(\operatorname{div} [x \wedge S])_\ell = \sum_{k, m, i=1}^3 \varepsilon_{\ell, m, i} \partial_{x_k} [x_m S_{i, k}] = (x \wedge \operatorname{div} S)_\ell + \sum_{i, k=1}^3 \varepsilon_{\ell, k, i} S_{i, k}$$

Sostituendo queste relazioni nella (11.4.2), la legge locale di bilancio dell'impulso implica, per l'arbitrarietà di A_t ,

$$\sum_{i, k=1}^3 \varepsilon_{\ell, k, i} S_{i, k} = 0,$$

relazione che è verificata se e solo se

$$S_{i, k} = S_{k, i}, \quad \forall i, k = 1, \dots, 3, \quad \text{ovvero } S^T = S \quad (11.4.3)$$

In conclusione, se vale il bilancio dell'impulso in forma locale, il bilancio del momento angolare è equivalente all'assunzione che *il tensore degli sforzi è una matrice simmetrica*.

11.5 Bilancio dell'energia (prima legge della Termodinamica).

Come in Meccanica il bilancio dell'energia gioca un ruolo fondamentale nella Dinamica dei fluidi. Poichè un sistema continuo è soggetto, oltre che a fenomeni meccanici, anche a fenomeni termici, la formulazione della legge di bilancio dell'energia va generalizzata in analogia a quanto si fa in Termodinamica.

Definiamo *energia cinetica di A al tempo t* la quantità

$$E_t^{(cin)}(A) = \int_A dx \frac{1}{2} \rho(x, t) u(x, t)^2.$$

Si definisce *potenza delle forze superficiali agenti su A al tempo t* la quantità

$$\mathcal{P}_t^S(A) = \int_{\partial A} d\sigma(x) u(x, t) \cdot S(x, t)n(x).$$

Si definisce *potenza delle forze di volume agenti su A al tempo t* la quantità

$$\mathcal{P}_t^V(A) = \int_A dx \rho(x, t) u(x, t) \cdot b(x, t).$$

In assenza di fenomeni termici il bilancio dell'energia stabilirebbe l'uguaglianza

$$\frac{d}{dt} E_t^{(cin)}(A_t) = \mathcal{P}_t^S(A_t) + \mathcal{P}_t^V(A_t).$$

Tuttavia, quando i fenomeni termici sono rilevanti, la relazione precedente è falsa. La Termodinamica suggerisce l'introduzione, a fianco dell'energia cinetica, di un'altra forma di energia,

detta *energia interna*, che verrà denotata con $E_t^{(int)}(A)$. L'energia interna è assunta assolutamente continua rispetto alla massa, nel senso che esiste una funzione regolare $e(x, t)$ detta *energia interna specifica*, tale che

$$E_t^{(int)}(A) = \int_A dx \rho(x, t) e(x, t).$$

Occorre introdurre inoltre la *potenza termica fornita ad A al tempo t*, che si denota con $\mathcal{Q}_t(A)$. In analogia a quanto fatto per la forza, si suppone che la potenza termica derivi da due tipi di contributi: uno, $\mathcal{Q}_t^V(A)$ assolutamente continuo rispetto alla massa, che tiene conto di eventuali trasferimenti di calore per irraggiamento, tale che esiste $r(x, t)$ regolare, detta *potenza termica specifica* in modo che

$$\mathcal{Q}_t^V(A) = \int_A dx \rho(x, t) r(x, t).$$

L'altro contributo, $\mathcal{Q}_t^S(A)$ che tiene conto di fenomeni di conduzione termica, è assunto assolutamente continuo rispetto alla superficie di A e quindi esiste una funzione regolare $h(x, t, n)$ detta *flusso termico attraverso una superficie unitaria passante per x di normale n* tale che

$$\mathcal{Q}_t^S(A) = \int_{\partial A} d\sigma(x) h(x, t, n(x)).$$

Il *principio di bilancio dell'energia o prima legge della Termodinamica* stabilisce allora che per ogni volume materiale A_t risulta

$$\frac{d}{dt} (E_t^{(cin)}(A_t) + E_t^{(int)}(A_t)) = \mathcal{P}_t^S(A_t) + \mathcal{Q}_t^S(A_t) + \mathcal{P}_t^V(A_t) + \mathcal{Q}_t^V(A_t). \quad (11.5.1)$$

Usando il teorema del trasporto, possiamo riscrivere la 11.5.1 come

$$\int_{A_t} dx \rho \frac{D}{Dt} \left[\frac{1}{2} u^2 + e \right] = \int_{\partial A_t} d\sigma(x) (u \cdot S n + h) + \int_{A_t} dx \rho (u \cdot b + r). \quad (11.5.2)$$

La prima conseguenza della (11.5.2) è l'analogo del teorema di Cauchy per il flusso termico: *esiste un campo vettoriale regolare $q(x, t)$ detto vettore flusso di calore, tale che*

$$h(x, t, n) = -q(x, t) \cdot n \quad (11.5.3)$$

Il segno nella precedente relazione è fissato in modo che, quando q forma un angolo acuto con la normale esterna, l'energia del sistema diminuisca e cioè vi sia un flusso di energia termica da A verso l'esterno. In tal modo q è effettivamente diretto concordemente al verso in cui fluisce l'energia.

Ricordando la definizione di D/Dt e usando l'arbitrarietà di A_t , la (11.5.2) implica

$$\rho \partial_t \left[\frac{1}{2} u^2 + e \right] + \rho (u \cdot \nabla_x) \left[\frac{1}{2} u^2 + e \right] = \operatorname{div} [u \cdot S - q] + \rho [u \cdot b + r], \quad (11.5.4)$$

ove

$$\operatorname{div} [u \cdot S] = \sum_{i,k=1}^3 \partial_{x_k} u_i S_{i,k} = u \cdot \operatorname{div} S + \operatorname{Tr} (\nabla_x u S),$$

e $\operatorname{Tr} (\nabla_x u S)$ è la traccia del prodotto tra matrici $\nabla_x u S$:

$$\operatorname{Tr} (\nabla_x u S) = \sum_{i,k=1}^3 \partial_{x_k} u_i S_{i,j}.$$

Si noti che, per la simmetria di S l'ordine degli indici nella matrice $\nabla_x u$ è irrilevante. Usando il bilancio locale dell'impulso e l'arbitrarietà di A_t , la (11.5.3) si scrive anche

$$\rho \frac{De}{Dt} = \text{Tr}(\nabla_x u S) - \text{div } q + \rho r. \quad (11.5.5)$$

che rappresenta il *bilancio locale dell'energia*. Un'altra utile forma dell'equazione di bilancio dell'energia si ottiene dalla (11.5.2) utilizzando l'equazione di continuità. Infatti la (11.5.2) può essere scritta anche nella forma

$$\partial_t [\rho(\frac{u^2}{2} + e)] + \text{div} [\rho u(\frac{u^2}{2} + e) - Su + q] = \rho(u \cdot b + r). \quad (11.5.6)$$

Quando $b = 0$ e $r = 0$ (sistema isolato) allora la 11.5.6 si presenta nella forma di una legge di conservazione per la densità di energia $\rho(\frac{u^2}{2} + e)$, la cui corrente j_E è data da

$$j_E = \rho(\frac{u^2}{2} + e)u - Su + q.$$

Riassumendo, i moti di un sistema continuo soddisfano un sistema di equazioni locali della forma

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \text{div } u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) &= \text{div } S + \rho b, \\ \rho(\partial_t e + u \cdot \nabla_x e) &= \text{Tr}(\nabla_x u S) - \text{div } q + \rho r. \end{aligned} \quad (11.5.7)$$

che rappresentano le leggi di bilancio della massa, dell'impulso e dell'energia. Una forma alternativa di queste equazioni che spesso risulta utile è

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \text{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \text{div} [\rho u \otimes u - S] &= \rho b, \\ \partial_t[\rho(\frac{u^2}{2} + e)] + \text{div} [\rho u(\frac{u^2}{2} + e) - Su + q] &= \rho(u \cdot b + r). \end{aligned} \quad (11.5.8)$$

Per i sistemi isolati ($b = 0$, $r = 0$) le equazioni 11.5.8 divengono

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \text{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \text{div} [\rho u \otimes u - S] &= 0, \\ \partial_t[\rho(\frac{u^2}{2} + e)] + \text{div} [\rho u(\frac{u^2}{2} + e) - Su + q] &= 0. \end{aligned} \quad (11.5.9)$$

Esse rappresentano un sistema di cinque leggi di conservazione.

È opportuno notare che le equazioni ottenute in una delle forme suddette (11.5.7) o (11.5.8), sono valide per un qualsiasi sistema continuo, ma contengono un numero eccessivo di funzioni incognite per poter essere effettivamente sufficienti alla determinazione dell'evoluzione del sistema. In esse infatti appaiono le funzioni ρ , u , e , S e q , per un totale di $1 + 3 + 1 + 6 + 3 = 14$ funzioni incognite, avendo supposto dati b e r . La discussione precedente infatti si limita a stabilire l'esistenza di tali funzioni ma non fornisce nessun metodo per determinarle. È evidente che occorre stabilire delle relazioni tra le incognite in modo da ridurre il loro numero a cinque, quante sono le equazioni. Queste relazioni, dette *equazioni costitutive*, a differenza dalle equazioni di bilancio, non sono di validità generale, ma dipendono dal modello di sistema continuo che si intende studiare.

11.6 Fluido ideale (o di Eulero)

I modelli di sistema continuo di cui ci occuperemo saranno esclusivamente i *fluidi*. La nozione intuitiva di fluido è evidente. Non forniremo qui definizioni generali di fluidi ma ci limiteremo a dare una caratterizzazione sufficiente per i nostri propositi.

Cominciamo con il definire *stato di equilibrio* di un sistema continuo *uno stato del sistema che, assunto inizialmente, persiste indefinitamente nel tempo*. Uno stato di equilibrio è necessariamente uno stato in cui non vi è moto ($u = 0$), non vi è flusso di calore ($q = 0$) e tutte le altre quantità (ρ , e e S) non dipendono dal tempo. Lo studio di questi stati è usualmente detto *Idrostatica*.

Diremo poi che il sistema *non esplica sforzi di taglio* se lo sforzo specifico $\varphi(x, t, n)$ esercitato dal sistema sulla superficie Σ di normale n non ha componenti tangenziali a Σ (*sforzi di taglio*) e cioè è puramente normale. Quando ciò si verifica, per il teorema di Cauchy, esiste una funzione reale regolare $p(x, t)$ tale che

$$\varphi(x, t, n) = -p(x, t)n \quad (11.6.1)$$

Il campo $p(x, t)$ è detto *pressione*.

Definizione Un sistema continuo è un *fluido* quando in (equilibrio) esso non esplica sforzi di taglio.

Questa definizione traduce la nota proprietà idrostatica dei fluidi di non essere in grado di conservare la *forma*. Infatti, per alterare localmente la forma di un corpo supponiamo di applicare una forza non normale alla superficie del corpo. A tale forza un fluido in equilibrio non è in grado di reagire per definizione di fluido e quindi la forma del fluido può essere alterata arbitrariamente

Denotata con $S^{(e)}$ la determinazione del tensore degli sforzi all'equilibrio, in modo che in ogni altro stato risulti

$$S = S^{(e)} + N, \quad (11.6.2)$$

ove N rappresenta la deviazione del tensore degli sforzi dalla sua determinazione idrostatica, in un fluido risulta allora

$$S_{i,j}^{(e)} = -p\delta_{i,j}. \quad (11.6.3)$$

La definizione data di fluido stabilisce in sostanza che *un fluido in condizioni idrostatiche può esplicare soltanto pressioni*.

Il fluido ideale è caratterizzato dalle seguenti proprietà:

1. *il fluido ideale non è in grado di esplicare sforzi di taglio;*
2. *il fluido ideale non è conduttore di calore.*

La condizione 1) vuol dire che l'assenza di sforzi di taglio non è ristretta soltanto alle situazioni idrostatiche ma si presenta in tutti gli stati del fluido ideale. Pertanto per un fluido ideale

$$N = 0, \quad S_{i,j} = -p\delta_{i,j} \quad (11.6.4)$$

La condizione 2) equivale ad assumere che non vi sia flusso di calore anche fuori dall'equilibrio (*fluido termicamente isolante*):

$$q = 0. \quad (11.6.5)$$

Le assunzioni 1) e 2) riducono le incognite per un fluido ideale a ρ , u , p ed e per un totale di $1 + 3 + 1 + 1 = 6$, e cioè una in più rispetto alle equazioni disponibili. Questa indeterminazione residua non è sorprendente in quanto, come sappiamo dalla Termodinamica, la natura di uno specifico fluido è determinata quando sia assegnata la sua *equazione di stato*, cioè una funzione regolare $\hat{p}(\rho, e)$ tale che per ogni x e t la pressione sia data dalla relazione

$$p = \hat{p}(\rho, e). \quad (11.6.6)$$

In realtà spesso risulta conveniente utilizzare, in luogo della variabile indipendente e un'altra variabile di più immediata interpretazione empirica, cioè la *temperatura assoluta* $T(x, t) > 0$. In tal caso, la Termodinamica fornisce due funzioni regolari $\tilde{p}(\rho, T)$ e $\tilde{e}(\rho, T)$ in modo che per ogni x e t l'energia interna specifica e la pressione siano date dalle relazioni

$$e(x, t) = \tilde{e}(\rho(x, t), T(x, t)), \quad p(x, t) = \tilde{p}(\rho(x, t), T(x, t)). \quad (11.6.7)$$

Utilizzando le precedenti assunzioni nelle (11.5.7) e (11.5.8), si ottengono le equazioni

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x \tilde{p}(\rho, T) &= \rho b, \\ \rho(\partial_t \tilde{e}(\rho, T) + u \cdot \nabla_x \tilde{e}(\rho, T)) + \tilde{p}(\rho, T) \operatorname{div} u &= \rho r. \end{aligned} \quad (11.6.8)$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t (\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + \tilde{p}(\rho, T) \mathbb{I}] &= \rho b, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \tilde{e}(\rho, T) \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + \tilde{e}(\rho, T) + \tilde{p}(\rho, T) \right) \right] &= \rho(u \cdot b + r). \end{aligned} \quad (11.6.9)$$

Le equazioni (11.6.9) appaiono come un sistema di cinque equazioni differenziali a derivate parziali nelle cinque funzioni incognite ρ , u e T . Nel caso $r = 0$ e $b = 0$ esse rappresentano un sistema di cinque leggi di conservazione. Ai due precedenti sistemi di equazioni viene dato il nome di *equazioni di Eulero per un fluido ideale*. Nel seguito ometteremo la *tilda* usata per distinguere le funzioni che esprimono le equazioni di stato dai corrispondenti valori.

(Fluido perfetto).

Come in Termodinamica il gas perfetto gioca un ruolo privilegiato per la sua semplicità, così in Dinamica dei fluidi un ruolo privilegiato è giocato dal fluido perfetto, caratterizzato dall'equazione di stato dei gas perfetti e dalla linearità della funzione che esprime l'energia interna specifica in termini della temperatura. Infatti, diremo *fluido perfetto* un fluido ideale tale che

$$p = R\rho T, \quad e = c_v T. \quad (11.6.10)$$

la costante R prende il nome di *costante dei gas perfetti* mentre

$$c_v = \frac{3}{2}R \quad (11.6.11)$$

è il cosiddetto *calore specifico a volume costante*. Con un'opportuna scelta delle unità di misura ci si può sempre ridurre al caso $R = 1$, in corrispondenza del quale $c_v = 3/2$. Nel

seguito supporremo di aver fissato unità di misura tali che la costante dei gas perfetti si riduce all'unità . Le equazioni di Eulero per un fluido perfetto si scrivono

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p &= \rho b, \\ \frac{3}{2} \rho(\partial_t T + u \cdot \nabla_x T) + p \operatorname{div} u &= \rho r,\end{aligned}\tag{11.6.12}$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p \mathbb{I}] &= \rho b, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \frac{3}{2} T \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + \frac{5}{2} T \right) \right] &= \rho(u \cdot b + r).\end{aligned}\tag{11.6.13}$$

con

$$p = \rho T.\tag{11.6.14}$$

Una notevole proprietà del fluido ideale, che segue dalle 11.6.12 è la seguente: si ponga

$$s(\rho, T) = -\log \left[\frac{\rho}{T^{3/2}} \right].\tag{11.6.15}$$

Risulta allora

$$\frac{Ds}{Dt} = \left(-\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{3}{2} \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} \right) = \frac{1}{T} \left(\frac{p}{\rho} \operatorname{div} u + \frac{3}{2} \frac{DT}{Dt} \right) = \frac{r}{T}.\tag{11.6.16}$$

Per ottenere l'equazione (11.6.16) basta differenziare la (11.6.15), sostituire la $D\rho/Dt$ usando l'equazione di continuità, usare le (11.6.10) ed infine l'ultima delle (11.6.12).

La quantità s è denominata *entropia specifica (termodinamica)*. La giustificazione di tale nome richiederebbe l'introduzione di un contesto più generale, nel quale la (11.6.16) è sostituita da una disuguaglianza (*disuguaglianza di Clausius-Duhem*) che esprime la seconda legge della Termodinamica e che, per sistemi reversibili si riduce all'uguaglianza

$$T\rho \frac{Ds}{Dt} = p \operatorname{div} u + \rho \frac{De}{Dt}.\tag{11.6.17}$$

Non discuteremo tale aspetto in queste note. Osserviamo soltanto che, nell'ambito della Teoria cinetica dei gas, la (11.6.16) è conseguenza del *Teorema H* di Boltzmann.

La (11.6.16) può sostituire la terza delle equazioni (11.6.12), in quanto è ad essa equivalente. È a volte conveniente considerare, in luogo di tale sistema, il sistema

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p &= \rho b, \\ \partial_t s(\rho, T) + u \cdot \nabla_x s(\rho, T) &= \frac{r}{T},\end{aligned}\tag{11.6.18}$$

In particolare, nel caso di sistemi in cui $r = 0$ (assenza di irraggiamento), ne consegue che *l'entropia specifica è costante lungo le traiettorie delle particelle di un fluido perfetto*. Inoltre, se i dati iniziali sono tali che l'entropia al tempo $t = 0$ è costante ($s_0(X) = s_0$), allora tale è anche l'entropia specifica all'istante generico t . In conseguenza di ciò si ottiene la relazione

$$\frac{T^{3/2}}{\rho} = \exp[s_0],$$

che permette di esprimere T in funzione di ρ :

$$T = \rho^{2/3} \exp\left[\frac{2s_0}{3}\right].$$

Utilizzando questa relazione nell'equazione di stato si ottiene allora

$$p = B\rho^\gamma, \quad (11.6.19)$$

con

$$\gamma = \frac{5}{3}, \quad B = \exp\left[\frac{2s_0}{3}\right]. \quad (11.6.20)$$

In queste condizioni le prime due equazioni (11.6.18) o (11.6.13) diventano un sistema di quattro equazioni nelle quattro incognite ρ ed u completamente disaccoppiato dall'equazione per l'energia o da quella per l'entropia. Esse si scrivono

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p(\rho) &= \rho b, \end{aligned} \quad (11.6.21)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p(\rho) \mathbb{I}] &= \rho b, \end{aligned} \quad (11.6.22)$$

con

$$p(\rho) = B\rho^\gamma.$$

I flussi del fluido perfetto che soddisfano le equazioni (11.6.21), (11.6.22) sono detti *flussi isoentropici*. Si denominano *equazioni di Eulero per un fluido isoentropico* equazioni della forma (11.6.21) o (11.6.22) anche se la funzione $p = p(\rho)$ non è data necessariamente dalla (11.6.19). Infatti anche se il fluido ideale non è perfetto, è possibile trovare ugualmente una funzione entropia specifica (in generale non data dalla (11.6.15)) che soddisfa la (11.6.17) (Basta infatti trovare $s(\rho, T)$ tale che

$$\frac{\partial s}{\partial T} = \frac{1}{T} \frac{\partial e}{\partial T}, \quad \frac{\partial s}{\partial \rho} = -\frac{p}{T\rho^2},$$

e questo non presenta difficoltà quando siano note $e(\rho, T)$ e $p(\rho, T)$). Ammetteremo comunque che risulti sempre $p'(\rho) \neq 0$. Le equazioni (11.6.18) sono una forma alternativa per le equazioni del fluido ideale, anche quando esso non è perfetto. Le considerazioni che seguono la (11.6.18) sono valide anche in questo contesto ed in particolare, se l'entropia è inizialmente costante, si può utilizzare la relazione $s(\rho, T) = s_0$ per eliminare la temperatura dall'equazione di stato per la pressione e pervenire in tal modo alle (11.6.21) e (11.6.22), con una pressione $p = p(\rho)$ più generale della (11.6.19).

11.7 Fluido viscoso di Navier-Stokes

. Si vedrà nel seguito che il modello di fluido ideale, pur essendo adeguato a descrivere un fluido in molte situazioni concrete, conduce in certi casi a conclusioni paradossali. Questi paradossi possono essere fatti risalire all'incapacità del fluido ideale di esercitare sforzi di taglio, la quale comporta il fatto che uno strato del fluido che si muove a velocità $u(x, t)$ possa scivolare su uno strato adiacente che si muove a velocità $u(x + \Delta x, t)$ senza nessuna resistenza a tale moto. In Meccanica sappiamo che, ad esempio una particella che si muove su una superficie, subisce una forza di attrito che può essere trascurata in situazioni idealizzate, ma invece produce effetti

significativi in molte situazioni concrete. Un fenomeno simile si presenta nei fluidi reali, nei quali lo scivolamento di uno strato di fluido su un altro è contrastato da una resistenza viscosa.

È questa uno sforzo di taglio che si manifesta nel fluido in condizioni non idrostatiche.

La necessità di includere fenomeni di questo tipo nel modello di fluido ha portato alla formulazione di numerosi modelli, tra i quali quello di gran lunga più utilizzato e più famoso (anche perchè il più semplice) è quello del fluido viscoso di Navier-Stokes che descriviamo qui di seguito.

Rinunceremo ad assumere $N = 0$, in quanto il modello deve esercitare sforzi di taglio. Pertanto per il fluido di Navier-Stokes si assumerà

$$S = -p\mathbf{I} + N. \quad (11.7.1)$$

La pressione p e l'energia interna specifica e saranno assunte ancora legate alla densità ρ ed alla temperatura T dalle relazioni (11.6.7) assunte per il fluido ideale, in quanto esse sono basate su considerazioni all'equilibrio. Invece non assumeremo più $q = 0$ in quanto, in presenza di attrito, si ha conversione di energia meccanica in calore che ha la tendenza a spostarsi verso le regioni a temperatura più bassa. Per caratterizzare completamente il modello, occorre fornire delle espressioni per N e q . Esse saranno dedotte da alcune assunzioni "naturali", che illustreremo nel seguito.

Cominciamo con l'osservare che, se il campo di velocità u fosse spazialmente omogeneo, non vi sarebbero fenomeni di attrito. In conseguenza, la quantità rilevante per la determinazione della presenza di attrito è la matrice $\nabla_x u$. In realtà non tutta la matrice $\nabla_x u$, ma solo la sua parte simmetrica ha un ruolo nel fenomeno di slittamento tra strati di fluido. Infatti, si decomponga

$$\nabla_x u = D + \Omega \quad (11.7.2)$$

ove D ed Ω denotano rispettivamente la parte simmetrica ed antisimmetrica di $\nabla_x u$:

$$D_{i,j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad \Omega_{i,j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \quad (11.7.3)$$

Se x ed x' sono punti sufficientemente prossimi ($|x - x'| < \delta$), si ha

$$u(x') = u(x) + D(x)(x' - x) + \Omega(x)(x' - x) + O(\delta^2).$$

Ponendo

$$\omega_i = \sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{i,l,m} \Omega_{l,m},$$

e cioè

$$\omega = \operatorname{rot} u := \nabla_x \wedge u, \quad \begin{cases} \omega_1 = \partial_{x_2} u_3 - \partial_{x_3} u_2 \\ \omega_2 = \partial_{x_3} u_1 - \partial_{x_1} u_3, \\ \omega_3 = \partial_{x_1} u_2 - \partial_{x_2} u_1 \end{cases} \quad (11.7.4)$$

si ha

$$u(x') = u(x) + D(x)(x' - x) + \frac{1}{2} \omega(x) \wedge (x' - x) + O(\delta^2). \quad (11.7.5)$$

La (11.7.5) mostra che, se $D = 0$, il moto è localmente coincidente con un *moto rigido* e $\omega/2$ rappresenta la velocità angolare di tale moto rigido. Il campo vettoriale $\omega = \operatorname{rot} u$ è detto *campo di vorticità* a causa di questa interpretazione. Poichè in un moto rigido le distanze tra i punti sono costanti, se $D = 0$ non vi sono moti relativi tra strati vicini del fluido. Siano X ed

X' le posizioni al tempo $t = 0$ delle particelle che sono rispettivamente in x ed x' al tempo t . Posto $h(t) = \Phi(X', t) - \Phi(X, t)$, si ha

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}h(t)^2 &= 2h(t) \cdot [u(\Phi(X', t), t) - u(\Phi(X, t), t)] \\ &= 2h(t) \cdot (\nabla_x u)h(t) + O(\delta^2) \\ &= 2h(t) \cdot D(x, t)h(t) + O(\delta^2). \end{aligned} \quad (11.7.6)$$

La precedente relazione mostra che D misura la velocità con cui variano le distanze tra i punti, ed è detto per questo *velocità di deformazione*. In base alla relazione (11.7.5), il moto si decompone localmente in una rotazione con velocità angolare $\omega/2$ ed in una deformazione con velocità D .

Le considerazioni precedenti portano ad assumere che N è una funzione esclusivamente di D nulla per $D = 0$. Per D piccoli sarà ragionevolmente approssimata da una funzione lineare. È pertanto “naturale” assumere

1. $N = N(D)$ è una funzione lineare di D .

D'altra parte, le matrici N e D dipendono dal riferimento prescelto, mentre è naturale presumere che la relazione che le lega sia indipendente dalla scelta del riferimento. Poiché un cambiamento di riferimento è indotto da una matrice ortogonale Q , si assume che

- 2.

$$N(QDQ^{-1}) = QN(D)Q^{-1} \quad \text{per ogni matrice ortogonale } Q.$$

Ricordando poi che N e D sono entrambe matrici simmetriche, si dimostra che

Proposizione 11.7.1. *Esistono λ e μ reali (Naturalmente il fattore 2 è del tutto inessenziale ed ha il solo scopo di bilanciare il fattore $\frac{1}{2}$ nella definizione di D), tali che*

$$N = 2\mu D + \lambda \operatorname{div} u \mathbf{I}. \quad (11.7.7)$$

Dimostrazione. Poiché N è funzione lineare di D , N e D commutano. D'altra parte sono simmetriche e pertanto possono essere diagonalizzate simultaneamente. Fissiamo la base comune di autovettori, visto che per l'ipotesi 2), la relazione che dedurremo sarà valida poi in ogni base. Denotiamo poi con n_i e d_i , $i = 1, \dots, 3$ i rispettivi autovalori. Gli n_i sono lineari nei d_i . Inoltre ancora l'ipotesi 2) assicura che la relazione tra loro è invariante per permutazioni degli assi (una permutazione può essere ottenuta combinando rotazioni e riflessioni). L'unica funzione lineare che soddisfa queste relazioni ha la forma

$$n_i = \lambda(d_1 + d_2 + d_3) + 2\mu d_i,$$

per λ e μ reali. Poiché $d_1 + d_2 + d_3 = \operatorname{Tr} D = \operatorname{div} u$, ritornando alla base originaria, la (11.7.7) è provata. \square

Il segno dei coefficienti λ e μ è di importanza fondamentale. Per fissarlo ricordiamo che σ rappresenta degli sforzi di tipo viscoso, in corrispondenza dei quali vi è perdita di energia meccanica ed aumento di energia interna. Dalla (11.5.6) si rileva che il contributo alla variazione di energia interna è

$$\operatorname{Tr}(D\sigma) = 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda(\operatorname{div} u)^2.$$

Questa quantità è positiva per ogni scelta di u non costante se $\mu > 0$ e $\lambda > 0$.

Si osservi inoltre che μ e λ , negli argomenti su esposti, potrebbero dipendere da ρ e T . Ma nei sistemi concreti tali dipendenze sono piuttosto deboli. È per questo motivo che nel seguito

li assumeremo costanti. I coefficienti λ e μ sono detti rispettivamente *coefficiente di viscosità di volume (bulk viscosity)* e *coefficiente di viscosità di slittamento (shear viscosity)*.

Per completare il modello occorre fornire l'espressione di q . Osserviamo che, quando la temperatura è costante, non vi è flusso di calore, in quanto il calore fluisce dalle parti del sistema a temperatura piú alta a quelle a temperatura piú bassa, mentre non vi è flusso di calore tra parti alla stessa temperatura (*in equilibrio termico*). In conseguenza di ciò assumeremo che q sia una funzione esclusivamente di $\nabla_x T$, nulla per $\nabla_x T = 0$. Per piccoli gradienti di temperatura la funzione $q = q(\nabla_x T)$ sarà bene approssimata da una funzione lineare e l'indipendenza dal riferimento implica che esista un numero reale κ tale che

$$q = -\kappa \nabla_x T. \quad (11.7.8)$$

Il fatto che il calore fluisce nel verso opposto al gradiente di temperatura implica poi $\kappa > 0$. Anche κ è assunta costante ed è detta *coefficiente di conduzione termica*. La relazione (11.7.8) è nota come *legge di Fourier*. Usando le precedenti relazioni nelle equazioni di bilancio (11.5.7) e (11.5.8), otteniamo le equazioni

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p(\rho, T) &= \mu \Delta_x u + (\lambda + \mu) \nabla_x \operatorname{div} u + \rho b, \\ \rho(\partial_t e(\rho, T) + u \cdot \nabla_x e(\rho, T)) + p(\rho, T) \operatorname{div} u \\ &= \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda(\operatorname{div} u)^2 + \rho r. \end{aligned} \quad (11.7.9)$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t (\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p(\rho, T) \mathbb{I}] &= \mu \Delta_x u + (\lambda + \mu) \nabla_x \operatorname{div} u + \rho b, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + e(\rho, T) \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + e(\rho, T) + p(\rho, T) \right) \right] \\ &= \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda(\operatorname{div} u)^2 + \rho(u \cdot b + r), \end{aligned} \quad (11.7.10)$$

ove

$$\Delta_x f = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2$$

è l'operatore *Laplaciano*.

Le precedenti equazioni sono dette *equazioni di Navier-Stokes*.

Se le relazioni tra p , e , ρ e T sono quelle del fluido perfetto allora le equazioni di Navier-Stokes divengono

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p &= \mu \Delta_x u + (\lambda + \mu) \nabla_x \operatorname{div} u + \rho b, \\ \frac{3}{2} \rho(\partial_t T + u \cdot \nabla_x T) + p \operatorname{div} u &= \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda(\operatorname{div} u)^2 + \rho r. \end{aligned} \quad (11.7.11)$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t (\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p \mathbb{I}] &= \mu \Delta_x u + (\lambda + \mu) \nabla_x \operatorname{div} u + \rho b, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \frac{3}{2} T \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + \frac{5}{2} T \right) \right] \\ &= \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda(\operatorname{div} u)^2 + \rho(u \cdot b + r). \end{aligned} \quad (11.7.12)$$

con

$$p = \rho T.$$

Valutiamo la derivata temporale dell'entropia specifica in corrispondenza di tali equazioni. Differenziando la (11.6.15) ed usando le (11.7.11), si ottiene

$$\rho \frac{Ds}{Dt} = - \operatorname{div} \left(\frac{q}{T} \right) + \frac{\rho r}{T} + \phi, \quad (11.7.13)$$

con

$$\phi = \frac{1}{T} \left(4\kappa (\nabla_x \sqrt{T})^2 + \lambda (\operatorname{div} u)^2 + 2\mu \operatorname{Tr} (D^2) \right). \quad (11.7.14)$$

La quantità ϕ è detta *produzione di entropia*. Essa è *non negativa*, come segue dall'esame della sua espressione esplicita. In conseguenza, il fluido ideale di Navier-Stokes soddisfa la *disuguaglianza di Clausius-Duhem*

$$\rho \frac{Ds}{Dt} \geq - \operatorname{div} \left(\frac{q}{T} \right) + \frac{\rho r}{T}, \quad (11.7.15)$$

che esprime la *seconda legge della Termodinamica* per i sistemi non reversibili.

11.8 Fluido incompressibile.

Nella pratica spesso si considerano situazioni nelle quali si possono trascurare le variazioni locali di volume. Quando ciò si verifica si parla di *fluido incompressibile*. Si denoti con

$$\mathcal{V}(A_t) = \int_{A_t} dx$$

la misura di Lebesgue del volume materiale $\{A_t\}$, detta anche *volume* di A_t . Ricordando il teorema del trasporto, si ha

$$\frac{d}{dt}\mathcal{V}(A_t) = \int_{A_t} dx \operatorname{div} u(x, t).$$

Pertanto il volume di ogni parte del fluido è costante nel tempo se e solo se $\operatorname{div} u = 0$. La condizione

$$\operatorname{div} u = 0 \tag{11.8.1}$$

è detta *condizione di incompressibilità*.

Accanto alla (11.8.1), sebbene ciò non sia strettamente indispensabile, assumeremo anche che la densità di massa sia costante nello spazio e nel tempo:

$$\rho(x, t) = \bar{\rho}. \tag{11.8.2}$$

Con tali assunzioni, evidentemente l'equazione di continuità è automaticamente soddisfatta dai fluidi incompressibili. Tuttavia, le altre equazioni per il fluido e cioè le (11.6.18)_{2,3} o le (11.7.11)_{2,3}, con p data dall'equazione di stato $p = p(\rho, T)$, non sono in generale compatibili con tali assunzioni, essendo la (11.8.1), l'equazione di bilancio dell'impulso e l'equazione di bilancio dell'energia un sistema di cinque equazioni nelle quattro incognite residue u e T . Per tale motivo si interpreta la condizione di incompressibilità 11.8.1 come un *vincolo* sui moti possibili del sistema ed in conseguenza si rinuncia all'equazione di stato per la pressione. Infatti la pressione viene considerata come una nuova incognita da interpretarsi come la *reazione vincolare* al vincolo di incompressibilità. In conseguenza di tale assunzione, l'equazione di bilancio dell'energia risulta disaccoppiata da quella dell'impulso e pertanto le equazioni del fluido incompressibile divengono

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u &= 0, \\ \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x \frac{p}{\bar{\rho}} &= b, \end{aligned} \tag{11.8.3}$$

nel caso di fluido perfetto e

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u &= 0, \\ \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x \frac{p}{\bar{\rho}} &= \frac{\mu}{\bar{\rho}} \Delta_x u + b, \end{aligned} \tag{11.8.4}$$

nel caso di fluido viscoso.

Nelle (11.8.3) scompare ogni traccia della densità costante $\bar{\rho}$, in quanto p è ora un'incognita e nel seguito denoteremo con p quello che in effetti è il rapporto $p/\bar{\rho}$, continuando a chiamarlo pressione. Infatti la densità risulta un parametro irrilevante nel moto di un fluido ideale incompressibile.

Nella (11.8.4) invece la densità $\bar{\rho}$ è presente anche nel rapporto $\mu/\bar{\rho}$. Per tale motivo si introduce la quantità

$$\nu = \frac{\mu}{\bar{\rho}}$$

che prende il nome di *coefficiente di viscosità cinematica* e le equazioni di (11.8.4) si scrivono, senza far apparire esplicitamente la densità, come

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u &= 0, \\ \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x p &= \nu \Delta_x u + b, \end{aligned} \quad (11.8.5)$$

Le (11.8.3) sono dette *equazioni di Eulero incomprimibili* mentre le (11.8.5) sono dette *equazioni di Navier-Stokes incomprimibili*. Poiché queste ultime rappresentano il caso più ampiamente studiato di equazioni viscose, ci si riferisce spesso ad esse semplicemente come *equazioni di Navier-Stokes* riservando alle (11.7.11) il nome di *equazioni di Navier-Stokes compressibili*.

La precedente discussione è puramente formale, non essendo a priori giustificata la rimozione dell'equazione di stato per la pressione e l'introduzione del vincolo di incomprimibilità. Si può però mostrare che le equazioni (11.8.3) e (11.8.5) possono essere giustificate in un opportuno limite, che corrisponde alla maggior parte dei liquidi in condizioni normali. Tuttavia, sebbene ciò possa apparire strano, anche l'aria in condizioni normali è ben approssimata dalle equazioni del fluido incomprimibile, quando si considerano velocità piccole rispetto a quella del suono, mentre i liquidi, in condizioni di pressione estreme, possono comportarsi come fluidi comprimibili. In conclusione *la proprietà di incomprimibilità non deve essere considerata come una proprietà assoluta di uno specifico fluido, ma come una proprietà dei flussi di tale fluido nelle condizioni specificate*. Ciononostante, in conformità con l'uso corrente, ci riferiremo alle equazioni precedenti come equazioni del *fluido* incompressibile.

11.9 Limite incomprimibile per le equazioni di Eulero isoentropiche.

Fissiamo il dominio spaziale limitato Ω con frontiera regolare e imponiamo la condizione al contorno $u \cdot n = 0$ se la frontiera non è vuota. Se $\Omega = \mathbb{T}^3$, assumiamo condizioni di periodicità.

Scriviamo le equazioni di Eulero per il fluido isoentropico nella forma

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -\nabla p(\rho) \end{aligned} \quad (11.9.1)$$

con $\rho \rightarrow p(\rho)$ differenziabile e con derivata prima strettamente positiva. Per fissare le idee si può pensare $p(\rho) = A\rho^\gamma$ con $A > 0$ e $\gamma > 1$. Sia $\rho(x, 0) = \rho_0 + \delta\rho_1(x, 0)$, $u(x, 0) = \delta u_1(x, 0)$ con ρ_0 una costante positiva e $\delta > 0$. Cerchiamo una soluzione $\rho(x, t) = \rho_0 + \delta\rho_1(x, t) + O(\delta^2)$, $u(x, t) = \delta u_1(x, t) + O(\delta^2)$. Ovviamente ρ_1 e u_1 dovranno soddisfare le equazioni lineari

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_1 + \rho_0 \operatorname{div} u_1 &= 0 \\ \rho_0 \partial_t u_1 + p'(\rho_0) \nabla \rho_1 &= 0 \end{aligned} \quad (11.9.2)$$

Differenziando la prima rispetto ad t e la seconda rispetto ad x si ottiene

$$\partial_{tt}^2 \rho_1 - p'(\rho_0) \Delta \rho_1 = 0. \quad (11.9.3)$$

Quindi ρ_1 rappresenta un'onda di compressione che si muove con velocità $c = \sqrt{p'(\rho_0)}$. c è detta velocità del suono.

Forma adimensionale delle equazioni di Eulero isoentropiche.

Introduciamo una lunghezza tipica L (ad esempio il diametro del dominio spaziale), una velocità tipica V (ad esempio il massimo del modulo della velocità iniziale), un tempo tipico τ

(ad esempio il tempo necessario per attraversare il dominio con velocità V e quindi $\tau = L/V$). Abbiamo inoltre già una densità tipica $\rho_0 \equiv R$ e in conseguenza una pressione tipica $P = p(R)$. Introduciamo allora le variabili adimensionali

$$\begin{aligned}x' &= \frac{x}{L}, \\t' &= \frac{t}{\tau}, \\u' &= \frac{\tau u}{V} = \frac{u\tau}{L}, \\\rho' &= \frac{\rho}{R}, \\p' &= \frac{p}{P} = \frac{p}{p(R)}\end{aligned}\tag{11.9.4}$$

Sostituendo e rimuovendo gli apici si ottiene

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -\lambda^2 \nabla p(\rho),\end{aligned}\tag{11.9.5}$$

con

$$\lambda = \frac{c}{V} \sqrt{\frac{1}{\gamma A}}$$

nel caso $p(\rho) = A\rho^\gamma$.

Il limite incomprimibile corrisponde a velocità V molto piccole rispetto a c e quindi $\lambda \rightarrow +\infty$. È conveniente riscrivere le (11.9.5) usando p come incognita invece di ρ :

$$\begin{aligned}\partial_t p + (u \cdot \nabla)p + g(p)\operatorname{div}(u) &= 0 \\ (\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -\lambda^2 \rho(p)^{-1} \nabla p,\end{aligned}\tag{11.9.6}$$

ove $g(p) = \rho(p)p'(\rho(p)) = \gamma p$ nel caso $p(\rho) = A\rho^\gamma$.

Espansione in λ^{-1} .

Si assuma

$$\begin{aligned}p &= p_0 + \lambda^{-1}p_1 + \lambda^{-2}p_2 + O(\lambda^{-3}), \\ u &= u_0 + \lambda^{-1}u_1 + \lambda^{-2}u_2 + O(\lambda^{-3}).\end{aligned}\tag{11.9.7}$$

Sostituendo tali espansioni nella seconda delle (11.9.6) ed uguagliando i coefficienti delle potenze di λ otteniamo:

$$\begin{aligned}\lambda^2 : & \quad \nabla p_0 = 0; \\ \lambda^1 : & \quad \nabla p_1 = 0; \\ \lambda^0 : & \quad \partial_t u_0 + (u_0 \cdot \nabla)u_0 = -\rho(p_0)^{-1} \nabla p_2; \\ \dots & \quad \dots\end{aligned}\tag{11.9.8}$$

Sostituendo nella prima delle (11.9.6) si ottiene invece

$$\begin{aligned}\lambda^0 : & \quad \partial_t p_0 + (u_0 \cdot \nabla)p_0 + g(p_0)\operatorname{div} u_0 = 0; \\ \lambda^1 : & \quad \partial_t p_1 + (u_0 \cdot \nabla)p_1 + (u_1 \cdot \nabla)p_0 + g(p_1)\operatorname{div} u_0 + g(p_0)\operatorname{div} u_1 = 0; \\ \dots & \quad \dots\end{aligned}\tag{11.9.9}$$

Le prime due delle (11.9.8) implicano che p_0 e p_1 non dipendono da x , ma possono dipendere da t . Usiamo tale informazione nella prima delle (11.9.9), integrata su Ω . Poichè

$$\int_{\Omega} dx \operatorname{div} u = \int_{\partial\Omega} d\sigma(x) u \cdot n = 0\tag{11.9.10}$$

per le condizioni al bordo assunte (o per la periodicità se $\Omega = \mathbb{T}^3$), ne consegue che

$$\int_{\Omega} dx \partial_t p_0 = \partial_t p_0 |\Omega| = 0. \quad (11.9.11)$$

Pertanto p_0 non dipende neanche da t . Inoltre, avendo provato che $\partial_t p_0 = 0$ abbiamo anche

$$\operatorname{div} u_0 = 0. \quad (11.9.12)$$

La seconda delle (11.9.8) e le precedenti informazioni riducono la (11.9.9) a

$$\partial_t p_1 g(p_0) \operatorname{div} u_1 = 0 \quad (11.9.13)$$

e l'argomento precedente mostra che $\partial_t p_1 = 0$ e $\operatorname{div} u_1 = 0$. In conclusione, all'ordine piú basso si ha

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u_0 &= 0, \\ \partial_t u_0 + (u_0 \cdot \nabla) u_0 &= -\nabla \hat{p}, \end{aligned} \quad (11.9.14)$$

ove abbiamo denotato $\hat{p} = \rho(p_0)^{-1} p_2$.

Il risultato può essere ottenuto rigorosamente seguendo [Majda].

Caso viscoso

In luogo delle equazioni di Eulero compressibili si considerino ora quelle di Navier-Stokes

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} (\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla) u) &= -\nabla p(\rho) + \eta \Delta u + \zeta \eta \operatorname{div} u \\ p(\partial_t s + u \cdot \nabla s) &= k \Delta T + \eta (\nabla u)^2 - \frac{2}{3} (\operatorname{div} u)^2. \end{aligned} \quad (11.9.15)$$

($\zeta = \frac{\eta}{3}$ per il gas perfetto). Per il gas perfetto $\lambda = \frac{c}{V}$ ed è detto numero di Mach e indicato con Ma.

Passando a variabili adimensionali, esse divengono

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} (\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla) u) &= -\lambda^2 \nabla p(\rho) + \frac{L}{RV} \eta \Delta u + \frac{L}{RV} \zeta \eta \operatorname{div} u, \\ p \frac{D}{Dt} s &= \frac{1}{RVL} k \Delta T + \frac{V^2}{c^2} \frac{1}{RVL} \eta [(\nabla u)^2 - \frac{2}{3} (\operatorname{div} u)^2] \end{aligned} \quad (11.9.16)$$

Introduciamo il numero di Reynolds Re e il numero di Prandtl Pr

$$Re = \frac{VL}{\eta}, \quad Pr = \frac{\eta}{k}$$

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} (\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla) u) &= -Ma^2 \nabla p(\rho) + \frac{1}{Re} \eta \Delta u + \frac{1}{Re} \zeta \eta \operatorname{div} u, \\ p(\partial_t s + u \cdot \nabla s) &= \frac{1}{Pr Re} \Delta T + \frac{Ma^2}{Re} \eta [(\nabla u)^2 - \frac{2}{3} (\operatorname{div} u)^2] \end{aligned} \quad (11.9.17)$$

Con gli argomenti precedenti le (11.9.8) e (11.9.9) vengono sostituite da

$$\lambda^2 : \quad \nabla p_0 = 0;$$

$$\begin{aligned}
\lambda^1 : & \quad \nabla p_1 = 0; \\
\lambda^0 : & \quad \partial_t u_0 + (u_0 \cdot \nabla) u_0 = -\rho(p_0)^{-1} \nabla p_2 + \frac{1}{Re} \Delta u_0 + \frac{1}{Re} \nabla \operatorname{div} u_0; \\
\dots & \quad \dots
\end{aligned} \tag{11.9.18}$$

$$\begin{aligned}
\lambda^0 : & \quad \partial_t p_0 + (u_0 \cdot \nabla) p_0 + g(p_0) \operatorname{div} u_0 = 0; \\
\lambda^1 : & \quad \partial_t p_1 + (u_0 \cdot \nabla) p_1 + (u_1 \cdot \nabla) p_0 + g(p_1) \operatorname{div} u_0 + g(p_0) \operatorname{div} u_1 = 0; \\
\dots & \quad \dots
\end{aligned} \tag{11.9.19}$$

$$\begin{aligned}
\lambda^0 : & \quad p_0 \left[\frac{\partial}{\partial t} s_0 + u_0 \cdot \nabla s_0 \right] = \frac{1}{Pr Re} \Delta T_0; \\
\dots & \quad \dots
\end{aligned} \tag{11.9.20}$$

L'equazione per l'entropia all'ordine piú basso si può riscrivere in due modi

$$\begin{aligned}
\frac{5}{2} \rho_0 [\partial_t T_0 + u_0 \cdot \nabla T_0] - \frac{\partial}{\partial t} P_0 &= \frac{1}{Pr Re} \Delta T_0 \\
\frac{5}{2} p_0 \operatorname{div} u_0 + \partial_t p_0 + u_0 \cdot \nabla p_0 &= \frac{1}{Pr Re} \Delta T_0
\end{aligned} \tag{11.9.21}$$

Dalla seconda delle (11.9.21) integrando sullo spazio e usando che p_0 è costante rispetto a x si ottiene che p_0 è costante nel tempo. La prima diventa una equazione di diffusione per la temperatura che ammette una soluzione costante se T_0 al tempo 0 è omogenea. Poiché $p_0 = \rho_0 T_0$ è costante si ha che anche la densità è costante. Di conseguenza dalla prima delle (11.9.19) si ha che $\operatorname{div} u = 0$. Le conclusioni su p_0 , p_1 , $\operatorname{div} u_0$ e $\operatorname{div} u_1$ non dipendono dalla terza delle (11.9.19) e quindi, procedendo come prima, si ottiene

$$\begin{aligned}
\operatorname{div} u_0 &= 0, \\
\partial_t u_0 + (u_0 \cdot \nabla) u_0 &= -\nabla \hat{p} + \eta \Delta u_0.
\end{aligned} \tag{11.9.22}$$

Anche tali equazioni si possono ottenere rigorosamente nel caso isoentropico (che è non fisico in presenza di dissipazione) seguendo [Kleinermann-Majda] o [Hoff] per un approccio alternativo.

Capitolo 12

Teoria Cinetica

Si consideri un sistema costituito da un numero N di particelle, interagenti mediante un potenziale assegnato. L'evoluzione temporale del sistema è regolata classicamente dalle equazioni di Newton. Seguire il moto delle singole particelle del sistema equivale a studiare quest'ultimo microscopicamente. Al contrario lo scopo della Meccanica Statistica è descrivere il sistema mediante grandezze macroscopicamente osservabili e collegare in modo matematicamente rigoroso la descrizione microscopica e quella macroscopica. In altre parole si immagini di possedere un microscopio infinitamente potente. Al variare del tipo di lente usata per osservare il sistema, quest'ultimo appare in modo differente. Se il sistema viene osservato troppo da vicino, sullo schermo compare sporadicamente - e subito scompare - una particella; la probabilità di osservare un urto tra due particelle è molto bassa. Se lo si guarda un po' più da lontano, sullo schermo compare sempre un certo numero medio di particelle, le quali impiegano un tempo più o meno lungo per attraversarlo e urtano le une con le altre. Se il sistema viene osservato da molto lontano, per esempio ad occhio nudo, esso mostra proprietà che al microscopio non si manifestano: ora le particelle non sono più distinguibili singolarmente ed il sistema assume l'aspetto di un continuo. Si osservano moti vorticosi, onde, etc. Nonostante il sistema sia sempre lo stesso, esso appare differente su differenti scale. Tali comportamenti sono descritti a livello macroscopico ad esempio da equazioni differenziali fenomenologiche (equazioni di Eulero e Navier-Stokes) o da equazioni integrodifferenziali (equazione di Boltzmann). Si vuole capire quale è la relazione tra queste descrizioni e la descrizione macroscopica basata sulle equazioni di Newton.

Si è parlato di equazioni differenziali senza precisare quali sono le funzioni incognite oggetto di tali equazioni. Queste funzioni dipendono dalla particolare scala rispetto alla quale si osserva il sistema. Due scale molto importanti (le sole di cui qui si discute) sono la scala cinetica e quella idrodinamica. Sulla scala *idrodinamica* (corrispondente all'osservazione ad occhio nudo del sistema) si assume che il sistema sia descritto da tre campi $\rho(x, t), u(x, t), T(x, t)$, i quali si interpretano fisicamente come *densità di massa*, *velocità* e *temperatura*. Le equazioni differenziali dell'idrodinamica sono le equazioni che descrivono l'evoluzione spatio-temporale dei campi suddetti. Sulla scala cinetica (una scala intermedia tra quella microscopica e quella idrodinamica) si assume che il sistema sia descritto da una distribuzione di probabilità $f(x, v; t)$, interpretata come densità di probabilità di trovare una particella in x al tempo t con velocità v . L'equazione differenziale che descrive l'evoluzione spatio-temporale della $f(x, v; t)$ è nota come equazione di Boltzmann.

12.1 Gas di Boltzmann.

Il primo passo nella costruzione della Meccanica Statistica del non equilibrio è costituito dallo studio della teoria cinetica dei gas e dall'equazione su cui essa si fonda, l'equazione di Boltzmann. La pubblicazione di questa risale al 1872, ad opera del fisico teorico austriaco Ludwig Boltzmann. Il nucleo della teoria è costituito dal tentativo di descrivere con metodi statistici l'approccio all'equilibrio di un gas rarefatto.

Il gas di Boltzmann è un gas rarefatto di sfere rigide di diametro d e massa m , interagenti a coppie esclusivamente mediante urti elastici. Si supponrà che il gas sia contenuto in un recipiente rigido, che gli urti delle particelle con le pareti del recipiente siano altresì elastici e che sul gas non agiscano ulteriori forze esterne.

Nel gas di Boltzmann il parametro che definisce la scala microscopica è il diametro d delle particelle (realisticamente $d \sim 10^{-8} \text{ cm}$). La scala cinetica è definita dall'introduzione di un parametro detto *cammino libero medio* definito come la distanza media percorsa da una particella del gas tra un urto ed il successivo. Per comprendere quali sono le dimensioni caratteristiche della scala cinetica, tentiamo di valutare l'ordine di grandezza del cammino libero medio. A tale scopo è sufficiente un semplice ragionamento di natura euristica. Si consideri una particella test. Si supponga che tale particella abbia appena subito un urto e viaggi alla volta dell'urto successivo. Si consideri ora la nuova particella bersaglio. Si costruisca il cilindro di collisione, definito nel modo seguente: esso ha come asse la retta passante per il centro della particella bersaglio e diretta come il vettore velocità della particella test; esso ha inoltre raggio pari a d e altezza pari al cammino libero medio λ . Poichè l'urto tra la particella test e quella bersaglio avviene, questo significa che all'interno del cilindro di collisione non è presente nessuna altra particella. Si deve quindi uguagliare il volume del cilindro di collisione al volume specifico del gas. Se V è il volume a disposizione del gas ed N è il numero di particelle del gas, il volume specifico è definito dalla relazione

$$v = \frac{1}{n} := \frac{V}{N} \quad (12.1.1)$$

La condizione suddetta conduce alla relazione

$$\frac{1}{n} = \pi d^2 \lambda \quad (12.1.2)$$

dalla quale si ricava la stima cercata per il cammino libero medio

$$\lambda \sim \frac{1}{\pi n d^2} \quad (12.1.3)$$

Poichè in condizioni normali una mole di gas occupa 22.4 litri, cioè $22.4 \times 10^3 \text{ cm}^3$, ed è costituita da $N = 6.02 \times 10^{23}$ molecole

$$n = \frac{6.02 \times 10^{23}}{22.4 \times 10^3} = 2.7 \times 10^{20} \frac{\text{molecole}}{\text{cm}^3} \quad (12.1.4)$$

e quindi

$$\lambda \sim 10^{-4} \text{ cm} \quad (12.1.5)$$

12.2 Derivazione euristica dell'equazione di Boltzmann.

Per descrivere statisticamente il gas di Boltzmann si introduce una funzione $f(x, v; t)$ in modo tale che, se Λ è una regione regolare e limitata in \mathbb{R}^3 , il numero $N(\Lambda, v; t)$ delle particelle del gas che al tempo t si trovano in Λ con velocità v è dato da

$$N(\Lambda, v; t) = N \int_{\Lambda} dx f(x, v; t) \quad (12.2.1)$$

Quindi $f(x, v; t)$ rappresenta la densità di probabilità di trovare una particella del gas in x al tempo t con velocità v . Siamo interessati a ricavare euristicamente l'equazione differenziale che regola l'evoluzione spazio-temporale della f , cioè l'equazione di Boltzmann. A tale scopo osserviamo che la f varia nel tempo per due ragioni distinte: le particelle del gas viaggiano per lo più in linea retta con velocità costanti, ma occasionalmente urtano producendo variazioni discontinue alle loro velocità. Ne segue che

$$\frac{\partial Nf}{\partial t} = \left(\frac{\partial Nf}{\partial t} \right)_{flusso} + \left(\frac{\partial Nf}{\partial t} \right)_{collisione} \quad (12.2.2)$$

Assumendo per il momento che le particelle non urtino, ma che, nell'entrare in contatto, esse si attraversino a vicenda, determiniamo la forma analitica del termine $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{flusso}$. La derivata del numero di particelle che al tempo t si trovano in Λ con velocità v è

$$N \frac{d}{dt} \int_{\Lambda} dx f(x, v; t) \quad (12.2.3)$$

Nell'ipotesi fatta, l'unico contributo a tale derivata è dato dal fatto che nell'intervallo di tempo dt ci sono particelle che attraversano con velocità v la superficie $\partial\Lambda$. Detto $n(x)$ il vettore normale esterno a $\partial\Lambda$ nel punto x e detto ds l'elemento di superficie su $\partial\Lambda$, il numero di particelle che nell'intervallo dt attraversano con velocità v l'elemento di superficie ds è

$$Nf(x, v; t)v \cdot n(x)dsdt$$

Il numero totale di particelle che nell'unità di tempo (al tempo t) attraversano la superficie $\partial\Lambda$ con velocità v si ottiene dividendo per dt ed integrando su $\partial\Lambda$:

$$N \int_{\partial\Lambda} ds f(x, v; t)v \cdot n(x)ds \quad (12.2.4)$$

Applicando il teorema della divergenza all'integrale (12.2.4), moltiplicando per (-1) (a causa dell'orientazione del vettore n) ed uguagliando l'espressione ottenuta alla derivata (12.2.3) si ottiene

$$N \frac{d}{dt} \int_{\Lambda} dx f(x, v; t) = -N \int_{\Lambda} dx v \cdot \nabla f(x, v; t) \quad (12.2.5)$$

da cui, data l'arbitrarietà di Λ , si ricava

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v \cdot \nabla f \quad (12.2.6)$$

A questo punto si assuma che le particelle collidono. Ponendo

$$Q(f, f) := N \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{collisione} \quad (12.2.7)$$

si riconosce che l'equazione di Boltzmann ha la forma

$$N \frac{\partial f}{\partial t} + N v \cdot \nabla f = Q(f, f) \quad (12.2.8)$$

Il termine di collisione $Q(f, f)$ a sua volta può essere decomposto nel seguente modo

$$Q(f, f) = Q^+(f, f) - Q^-(f, f) \quad (12.2.9)$$

dove $Q^+(f, f)$ rappresenta il numero di urti per unità di tempo che avvengono nel punto x al tempo t in modo tale che una delle particelle urtanti possieda velocità uscente v , e $Q^-(f, f)$ rappresenta il numero di urti per unità di tempo che avvengono nel punto x al tempo t in modo tale che una delle particelle urtanti possieda velocità entrante v . Si suppone che il numero di urti per unità di tempo ai quali partecipano tre o più particelle sia trascurabile.

Per determinare i termini $Q^\pm(f, f)$, ricordiamo brevemente le regole della collisione elastica. Consideriamo due particelle (1) e (2), che viaggiano con velocità v_1 e v_2 , urtano elasticamente ed emergono dall'urto con velocità v'_1 e v'_2 . Sia $\hat{\omega}$ il versore della retta congiungente i centri delle due particelle all'istante d'urto, diretto dalla (2) alla (1) per convenzione. Noti $v_1, v_2, \hat{\omega}$ è possibile ricavare v'_1 e v'_2 . Nel sistema di riferimento in cui la particella (1) è ferma, la (2) viaggia con velocità $\hat{v}_2 = v_2 - v_1$.

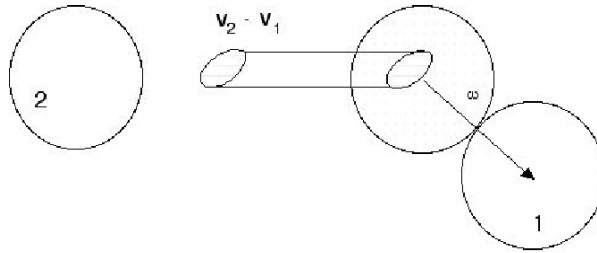


Figura 12.1: Urto tra due particelle.

Poichè le due particelle hanno uguale massa, all'istante d'urto c'è trasmissione totale della componente di \hat{v}_2 lungo $\hat{\omega}$. Quindi

$$\begin{cases} \hat{v}'_1 = (\hat{v}_2 \cdot \hat{\omega})\hat{\omega}; \\ \hat{v}'_2 = \hat{v}_2 - (\hat{v}_2 \cdot \hat{\omega})\hat{\omega}. \end{cases} \quad (12.2.10)$$

Nel sistema di riferimento iniziale risulta

$$\begin{cases} v'_1 = v_1 + [(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega}]\hat{\omega}; \\ v'_2 = v_2 - [(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega}]\hat{\omega}. \end{cases} \quad (12.2.11)$$

La trasformazione descritta è una trasformazione lineare da $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ in $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ che conserva il numero di particelle, l'impulso, l'energia e il volume nello spazio delle velocità .

Calcoliamo $Q^-(f, f)(x, v_1; t)$. Calcoliamo dapprima il numero di urti che avvengono nell'intervallo di tempo $[t, t + dt]$ in cui una particella si trova in x ed ha velocità entrante v_1 , mentre l'altra ha velocità entrante v_2 e in cui il parametro d'urto è tra $\hat{\omega}$ e $\hat{\omega} + d\hat{\omega}$. A tale scopo poniamoci nel sistema di riferimento in cui la particella (1) è ferma con il centro in x . Consideriamo la sfera d'azione di tale particella, cioè la sfera di centro x e raggio d . L'urto tra le particelle (1) e (2) soddisfa le condizioni poste se in un tempo compreso tra t e $t + dt$ il centro della particella (2) viene a trovarsi su un punto della superficie della sfera d'azione appartenente

all'elemento infinitesimo di tale superficie che ha come centro il punto corrispondente al versore $\hat{\omega}$ ed estensione pari a $d^2d\omega$. Consideriamo quindi il cilindro di collisione, cioè il cilindro che ha come base l'elemento di superficie considerato, il cui asse è diretto come $v_2 - v_1$ e di altezza pari a $|v_2 - v_1|dt$. Il numero di urti cercato è uguale al numero di particelle il cui centro si trova al tempo t all'interno del cilindro di collisione. Siamo quindi condotti a calcolare il volume del cilindro di collisione. Questo è semplice, in quanto l'altezza è pari a $|v_2 - v_1|dt$ e la base ha misura

$$\text{misura della base del cilindro di collisione} = d^2d\omega \frac{(v_2 - v_1)}{|v_2 - v_1|} \cdot \hat{\omega} \quad (12.2.12)$$

Dunque il volume del cilindro di collisione è

$$\text{volume del cilindro di collisione} = (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} d^2d\omega dt \quad (12.2.13)$$

Il numero di urti cercato è dato da

$$\rho_2(x, v_1; x - d\hat{\omega}, v_2; t)(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} d^2d\omega dt \quad (12.2.14)$$

dove $\rho_2(x, v_1; x - d\hat{\omega}, v_2; t)$ rappresenta la densità delle coppie di particelle che al tempo t si trovano in x e $x - d\hat{\omega}$ con velocità pari rispettivamente a v_1 e v_2 (cfr. (12.6.7) per la definizione di funzioni di correlazione). Per il momento non ci preoccupiamo del modo in cui la ρ_2 dipende dalla f .

Fino ad ora abbiamo mantenuta fissa la velocità v_2 . Se vogliamo contare il numero di urti che avvengono nelle stesse condizioni precedenti, ma con la velocità della particella (2) compresa tra v_2 e $v_2 + dv_2$, dobbiamo moltiplicare l'espressione (12.2.14) per dv_2 . Il numero totale di urti per unità di tempo (al tempo t) in cui la particella (1) è in x con velocità entrante v_1 si ottiene dividendo per dt ed integrando su v_2 ed ω :

$$Q^-(f, f)(x, t; v_1) = d^2 \int_{(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \rho_2(x, v_1; x - d\hat{\omega}, v_2; t) \quad (12.2.15)$$

Per determinare la relazione tra ρ_2 ed f si fa un'ipotesi fondamentale, detta ipotesi di caos molecolare o Stosszahlansatz. Si suppone cioè che valga la relazione

$$\rho_2(x, v_1; x - d\hat{\omega}, v_2; t) = \rho_1(x, v_1; t) \times \rho_1 f(x, v_2; t) = N f(x, v_1; t) \times N f(x, v_2; t) \quad (12.2.16)$$

In tal modo si ottiene

$$Q^-(f, f)(x, v_1; t) = N^2 d^2 \int_{(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} f(x, v_1; t) f(x, v_2; t) \quad (12.2.17)$$

L'ipotesi di caos molecolare, cioè l'ipotesi di fattorizzazione della densità di coppie, corrisponde a pensare le particelle del gas di Boltzmann scorrelate prima dell'urto.

Per calcolare il termine $Q^+(f, f)(x, v_1; t)$ utilizziamo un argomento di simmetria. Interpretiamo $Q^+(f, f)(x, v_1; t)$ come $Q^-(f, f)(x, v'_1; t)$, cioè il numero di urti in cui si ottiene come risultato una sfera di velocità v_1 è uguale al numero di urti in cui si perde una sfera con velocità v'_1 . Sia $\tilde{N}(x, t)$ il numero di urti per unità di tempo che avvengono nel punto x al tempo t . $\tilde{N}(x, t)$ si ottiene a partire da $Q^-(x, t; v'_1)$ integrando in v'_1 : Poichè v_1, v_2 sono variabili mute, possiamo sostituirle con v'_1, v'_2 , ottenendo

$$\tilde{N}(x, t) = N^2 d^2 \int_{(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv'_1 dv'_2 d\omega (v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} f(x, v'_1; t) f(x, v'_2; t) \quad (12.2.18)$$

In questo caso le variabili v'_1, v'_2 vanno interpretate come velocità entranti. Le velocità uscenti v_1, v_2 sono date dalle relazioni (12.2.11) a patto di sostituire i simboli primati con quelli non primati. Si ricordi che il volume nello spazio delle velocità è conservato dalla trasformazione (12.2.11) :

$$dv'_2 dv'_1 = dv_2 dv_1 \quad (12.2.19)$$

da cui

$$\tilde{N}(x, t) = N^2 d^2 \int_{(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} f(x, v'_1; t) f(x, v'_2; t) \quad (12.2.20)$$

In particolare, siamo interessati a conoscere $Q^+(f, f)(x, \hat{v}_1; t)$, cioè il numero di urti per unità di tempo che avvengono nel punto x al tempo t in modo tale da produrre $v_1 = \hat{v}_1$. Esso è dato da

$$Q^+(f, f)(x, \hat{v}_1; t) = N^2 d^2 \int_{\Gamma} dv_1 dv_2 d\omega (v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} f(x, v'_1; t) f(x, v'_2; t) \quad (12.2.21)$$

dove risulta

$$\Gamma = \{(v'_1, v'_2, \hat{\omega}) : (v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0 \quad e \quad v_1 = \hat{v}_1\} \quad (12.2.22)$$

Si osservi che è possibile dimostrare la relazione

$$(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} = -(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \quad (12.2.23)$$

Se dunque si effettua nella relazione (12.2.21) il cambiamento di variabili che manda le velocità entranti in quelle uscenti, considerando la particolare regione Γ d'integrazione, si ottiene

$$Q^+(f, f)(x, \hat{v}_1; t) = -N^2 d^2 \int_{(v_2 - \hat{v}_1) \cdot \hat{\omega} \leq 0} dv_2 d\omega (v_2 - \hat{v}_1) \cdot \hat{\omega} f(x, v'_1; t) f(x, v'_2; t) \quad (12.2.24)$$

dove le variabili v'_1, v'_2 sono da pensarsi come funzioni di v_1, v_2 mediante la legge di trasformazione degli urti. Effettuando nella (12.2.24) il cambiamento di variabile

$$\hat{\omega} \longrightarrow -\hat{\omega} \quad (12.2.25)$$

si ottiene

$$Q^+(f, f)(x, \hat{v}_1; t) = N^2 d^2 \int_{(v_2 - \hat{v}_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - \hat{v}_1) \cdot \hat{\omega} f(x, v'_1; t) f(x, v'_2; t) \quad (12.2.26)$$

Introducendo i termini $Q^\pm(f, f)$ nell'equazione (12.2.8), si ottiene la versione definitiva dell'equazione di Boltzmann

$$D_t f(x, v; t) = N d^2 \int_{(v_2 - v) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v) \cdot \hat{\omega} [f(x, v'_2; t) f(x, v'_1; t) - f(x, v_2; t) f(x, v; t)] \quad (12.2.27)$$

dove è stata introdotta la notazione

$$D_t := \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla \quad (12.2.28)$$

ed il simbolo D_t è detto *derivata sostanziale*.

Prima di chiudere questa sezione vogliamo discutere una importante proprietà dell'equazione (12.2.27): essa non possiede invarianza per inversione temporale. Ricordiamo che il procedimento d'inversione temporale è definito formalmente dalla trasformazione

$$t \longrightarrow -t \quad v \longrightarrow -v \quad (12.2.29)$$

Se si applica la (12.2.29) sul membro di sinistra della (12.2.27) si ottiene

$$\begin{aligned} D_t f(x, v; t) &= \frac{\partial f}{\partial t}(x, v; t) + v \cdot \nabla f(x, v; t) \longrightarrow \\ &\longrightarrow -\frac{\partial f}{\partial t}(x, -v; -t) - v \cdot \nabla f(x, -v; -t) = -D_t f(x, -v; -t) \end{aligned} \quad (12.2.30)$$

Se si applica la (12.2.29) sul membro di destra si ottiene

$$\begin{aligned} Q(f, f)(x, v; t) &\longrightarrow N d^2 \int_{(v_2+v) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 + v) \cdot \hat{\omega} \times \\ &\quad [f(x, v'_2; -t) f(x, v'_1; -t) - f(x, v_2; -t) f(x, -v; -t)] \end{aligned} \quad (12.2.31)$$

cioè

$$Q(f, f)(x, v; t) \longrightarrow Q(f, f)(x, -v; -t) \quad (12.2.32)$$

Come si riconosce dalle (12.2.30) e (12.2.32) l'equazione di Boltzmann non è invariante rispetto all'inversione temporale. Dunque essa è una equazione irreversibile. Il problema che si pone è capire in quale punto della derivazione venga introdotta l'irreversibilità. La risposta è che il punto in questione è l'ipotesi di caos molecolare. Infatti

1. In tutta la derivazione non abbiamo fatto altro che applicare le leggi della meccanica classica, tranne che nell'ipotesi di caos molecolare.
2. Si vede facilmente che l'ipotesi di caos molecolare privilegia una direzione nel tempo. Infatti l'equazione (12.2.16) si interpreta, come già detto riconoscendo che le particelle che urtano sono scorrelate prima dell'urto. È chiaro che le evoluzioni temporali delle due particelle non sono più indipendenti dopo l'urto, in quanto le direzioni e le velocità assunte dopo l'urto sono legate dalla trasformazione (12.2.11). Ne segue che dopo l'urto le due particelle non sono più scorrelate e l'ipotesi di caos molecolare non vale più. Questo rende l'equazione di Boltzmann irreversibile.

Osservazione 12.2.1. *Con argomenti analoghi a quelli utilizzati in questo paragrafo è possibile derivare euristicamente l'equazione di evoluzione della f per un sistema di particelle interagenti mediante un potenziale a coppie ϕ . Il risultato di una simile analisi è un'equazione formalmente identica alla (12.2.27), che differisce da quest'ultima per il fatto che, nell'operatore integrale $Q(f, f)$ compare la sezione d'urto differenziale relativa al potenziale ϕ .*

12.3 Il teorema H e gli stati d'equilibrio.

Diamo alcune proprietà dell'operatore integrale $Q(f, f)$. Nel seguito utilizziamo la seguente notazione. Sia data una funzione

$$\psi : \quad \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \quad \longrightarrow \quad \mathbb{R} \quad (12.3.1)$$

Poniamo convenzionalmente

$$\psi_i := \psi(x, v_i; t) \quad \psi'_i := \psi(x, v'_i; t) \quad i = 1, 2 \quad (12.3.2)$$

ed utilizziamo la notazione (12.3.2) tutte le volte che non sia necessario esprimere esplicitamente la dipendenza da x e t . In tal modo l'operatore $Q(f, f)$ di Boltzmann assume la forma

$$Q(f, f)(x, v_1; t) = N d^2 \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} [f'_2 f'_1 - f_2 f_1] \quad (12.3.3)$$

Per definizione un'osservabile ψ del gas di Boltzmann si dice conservata se essa soddisfa la relazione

$$\psi_1 + \psi_2 = \psi'_1 + \psi'_2 \quad (12.3.4)$$

per ogni insieme di velocità $\{v_1, v_2; v'_1, v'_2\}$ tale che le coppie $\{v_1, v_2\}$ e $\{v'_1, v'_2\}$ sono legate tra loro dalla legge degli urti elastici (12.2.11).

Nel caso del gas di Boltzmann esistono soltanto cinque osservabili conservate:

$$\psi^{(0)} = 1 \quad (\text{numero di particelle}) \quad (12.3.5)$$

$$\psi^{(i)} = v_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{componenti della velocità}) \quad (12.3.6)$$

$$\psi^{(4)} = v^2 \quad (\text{energia cinetica}) \quad (12.3.7)$$

Introduciamo ora un nuovo operatore integrale, estensione simmetrica a due funzioni dell'operatore di Boltzmann

$$Q(f, g)(x, v; t) := \frac{Nd^2}{2} \int_{(v_2-v) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v) \cdot \hat{\omega} [(f'_2 g'_1 + g'_2 f'_1 - f_2 g_1 - g_2 f_1)] \quad (12.3.8)$$

In virtù del fattore $1/2$ che compare nella (12.3.8) risulta

$$Q(f, g)|_{g=f} = Q(f, f) \quad (12.3.9)$$

L'importanza dell'operatore integrale $Q(f, g)$ è legata al seguente

Teorema 12.3.1. *Sia ψ un'osservabile conservata. Siano f, g due funzioni tali che $Q(f, g)$ ha senso ed è integrabile in v . Allora*

$$\int_{R^3} dv \psi(x, v; t) Q(f, g)(x, v; t) = 0 \quad (12.3.10)$$

Dimostrazione. Per dimostrare la formula (12.3.10) poniamo

$$\Omega(\psi, f, g)(x, t) := \int_{R^3} dv \psi(x, v; t) Q(f, g)(x, v; t) \quad (12.3.11)$$

Dalla definizione (12.3.8) risulta

$$\Omega(\psi, f, g)(x, t) = \frac{Nd^2}{2} \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega \psi(x, v_1; t) (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} [f'_2 g'_1 + g'_2 f'_1 - f_2 g_1 - g_2 f_1] \quad (12.3.12)$$

Effettuando nell'integrale (12.3.12) la trasformazione

$$v_2 \longrightarrow v_1 \quad v_1 \longrightarrow v_2 \quad (12.3.13)$$

si ottiene

$$\begin{aligned} \Omega(\psi, f, g)(x, t) &= -\frac{Nd^2}{2} \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \leq 0} dv_1 dv_2 d\omega \psi(x, v_2; t) (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \times \\ &\quad \times [f'_2 g'_1 + g'_2 f'_1 - f_2 g_1 - g_2 f_1] \end{aligned} \quad (12.3.14)$$

Effettuando nell'integrale (12.3.14) la trasformazione $\hat{\omega} \longrightarrow -\hat{\omega}$, si ottiene

$$\Omega(\psi, f, g)(x, t) = \frac{Nd^2}{2} \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega \psi(x, v_2; t) (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \times$$

$$\times [f'_2 g'_1 + g'_2 f'_1 - f_2 g_1 - g_2 f_1] \quad (12.3.15)$$

Effettuando nell'integrale (12.3.12) la trasformazione

$$v_1 \longrightarrow v'_1 \quad v_2 \longrightarrow v'_2 \quad (12.3.16)$$

dove $\{v_1, v_2\}$ sono le velocità prima dell'urto e $\{v'_1, v'_2\}$ quelle dopo l'urto, si ottiene

$$\begin{aligned} \Omega(\psi, f, g)(x, t) &= \frac{Nd^2}{2} \int_{(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv'_1 dv'_2 d\omega \psi(x, v'_1; t) (v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \times \\ &\quad \times [-f'_2 g'_1 - g'_2 f'_1 + f_2 g_1 + g_2 f_1] \\ &= \frac{Nd^2}{2} \int_{(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega \psi(x, v'_1; t) (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \times [-f'_2 g'_1 - g'_2 f'_1 + f_2 g_1 + g_2 f_1] \end{aligned} \quad (12.3.17)$$

Effettuando nell'integrale (12.3.12) la trasformazione

$$v_1 \longrightarrow v'_2 \quad v_2 \longrightarrow v'_1 \quad (12.3.18)$$

si ottiene

$$\begin{aligned} \Omega(\psi, f, g)(x, t) &= \frac{Nd^2}{2} \int_{(v'_1 - v'_2) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv'_1 dv'_2 d\omega \psi(x, v'_2; t) (v'_1 - v'_2) \cdot \hat{\omega} \times \\ &\quad \times [-f'_2 g'_1 - g'_2 f'_1 + f_2 g_1 + g_2 f_1] \end{aligned} \quad (12.3.19)$$

Usando la (12.2.23) si ha infine

$$\Omega(\psi, f, g)(x, t) = -\frac{Nd^2}{2} \int_{(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega \psi(x, v'_2; t) (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \times [f'_2 g'_1 + g'_2 f'_1 - f_2 g_1 - g_2 f_1] \quad (12.3.20)$$

□

A questo punto si sommano membro a membro le relazioni (12.3.12), (12.3.15), (12.3.17) e (12.3.20). Si ottiene in tal modo

$$\Omega(\psi, f, g)(x, t) = \frac{Nd^2}{8} \int_{(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (\psi_1 + \psi_2 - \psi'_1 - \psi'_2)(\dots) = 0 \quad (12.3.21)$$

che è nullo, poichè ψ è un'osservabile conservata.

Osservazione 12.3.1. *Una qualunque funzione, differenziabile 2 volte, invariante di collisione, si può scrivere come combinazione lineare delle ψ_j . Infatti, sia g tale che*

$$g(v'_1) + g(v'_2) = g(v_1) + g(v_2)$$

e siano $v'_1 = v_1 + \delta v$, $v'_2 = v_2 - \delta v$, con δv infinitesimo e

$$(v_1 + \delta v)^2 + (v_2 - \delta v)^2 = v_1^2 + v_2^2$$

Si ha che

$$\delta v \cdot \nabla g(v_1) = \delta v \cdot \nabla g(v_2)$$

se $\delta v \cdot v_1 = \delta v \cdot (v_2)$, cioè $\delta v \cdot \nabla g(v)$ non cambia se v cambia in una direzione ortogonale a δv e possiamo scrivere

$$\sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} g \delta v_i \delta v_j' = 0 \quad \text{se} \quad \delta v \cdot \delta v' = 0.$$

Perciò $\frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} g = \phi(v) \delta_{ij}$ e $\frac{\partial}{\partial v_i} g = h_i(v_i)$ dipende solo da v_i , per $j \neq i$. E ancora, $h_i'(v_i) = h_j'(v_j)$ per $j \neq i$ il che implica che $h_i'(v_i)$ sono tutte uguali ad una costante e integrando

$$\frac{\partial}{\partial v_i} g = \alpha v_i + \gamma_i$$

Integrando di nuovo

$$g(v_i) = \alpha v_i^2 + \gamma_i v_i + \omega$$

12.3.1 Entropia e Teorema H di Boltzmann

Definiamo il funzionale entropia nel modo seguente

$$H(f)(t) := \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv f(x, v; t) \log f(x, v; t) \quad (12.3.22)$$

dove Λ è un toro¹ Il seguente teorema mostra che $H(f)$ è un funzionale di Liapunov per l'equazione di Boltzmann, cioè decresce lungo il moto.

Teorema 12.3.2. *Teorema H* Sia $f(x, v; t)$ una soluzione dell'equazione di Boltzmann. Risulta

$$\frac{d}{dt} H(f)(t) \leq 0 \quad (12.3.23)$$

Dimostrazione. Per dimostrare la formula (12.3.23) deriviamo H rispetto alla variabile t e portiamo la derivata sotto il segno di integrale:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(f)(t) &= \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv \frac{\partial}{\partial t} (f(x, v; t) \log f(x, v; t)) = \\ &= \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv (1 + \log f(x, v; t)) \frac{\partial f}{\partial t}(x, v; t) \end{aligned} \quad (12.3.24)$$

Poichè f è soluzione dell'equazione di Boltzmann si ha

$$\frac{d}{dt} H(f)(t) = \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv [-v \cdot \nabla f + Q(f, f)] [\log f + 1] \quad (12.3.25)$$

Poichè Λ è un toro l'integrazione spaziale del termine $-v \cdot \nabla f$ dà zero. Inoltre si ha che

$$\int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv v \cdot \nabla f \log f = \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv v \cdot \nabla [f \log f - f]$$

e, siccome Λ è un toro, tale integrale si annulla. Altrimenti bisogna considerare delle condizioni al contorno e ci sarà anche un termine dovuto al flusso di entropia dall'esterno. Il termine

$$\int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv Q(f, f) = \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dv dx \psi_0(v) Q(f, f)$$

¹Il considerare un toro ci permette di lavorare sull'equazione di Boltzmann senza considerarne le condizioni al contorno. Si veda il teorema successivo.

è zero per le proprietà di Q . Si ha infine

$$\frac{d}{dt}H(f)(t) = \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv Q(f, f) \log f$$

Utilizzando la definizione di $Q(f, f)$ si ricava

$$\frac{d}{dt}H(f)(t) = Nd^2 \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv \log f(v; t) \int_{(v_2-v) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v) \cdot \hat{\omega} (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) \quad (12.3.26)$$

A questo punto si ripeta l'argomento illustrato nella dimostrazione del precedente teorema; facendo gli stessi opportuni cambi di variabile, si arriva facilmente alla relazione

$$\frac{d}{dt}H(f)(t) \quad (12.3.27)$$

$$= \frac{Nd^2}{4} \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv \int_{(v_2-v) \cdot \hat{\omega} \geq 0} (\dots) (\log f(v; t) + \log f(v_2; t) - \log f(v'; t) - \log f(v'_2; t)) \times \\ \times (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) \quad (12.3.28)$$

Raccogliendo i logaritmi, possiamo scrivere la precedente nella forma

$$\frac{d}{dt}H(f)(t) = \frac{Nd^2}{4} \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv \int_{(v_2-v) \cdot \hat{\omega} \geq 0} ((\log(f f_2) - \log f' f'_2))(f'_2 f'_1 - f_2 f_1)(\dots) \quad (12.3.29)$$

L'espressione scritta esplicitamente nell'integrando è della forma

$$(x - y)(\log y - \log x) \leq 0 \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R} \quad (12.3.30)$$

Poichè la quantità (...) nell'integrale (12.3.29) è sempre positiva, la tesi del teorema è provata. \square

Si deve osservare che nella (12.3.30) vale il segno = se e solo se $x = y$. Ne segue che

$$\frac{d}{dt}H(f)(t) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad f_1 f_2 = f'_1 f'_2 \quad (12.3.31)$$

Una soluzione dell'equazione di Boltzmann che soddisfi la (12.3.31) è detta una distribuzione cinetica d'equilibrio. Da tale relazione cerchiamo di ricavare la forma funzionale delle distribuzioni d'equilibrio. Prendendo il logaritmo di ambo i membri della (12.3.31) si ottiene

$$\log f_1 + \log f_2 = \log f'_1 + \log f'_2 \quad (12.3.32)$$

Dalla relazione precedente segue che la f è una distribuzione d'equilibrio se e solo se la funzione $\psi = \log f$ è un'osservabile conservata. La forma più generale per tale funzione è allora

$$\log f(x, v; t) = A(x, t) + \mathbf{B}(x, t) \cdot v + C(x, t)v^2 \quad (12.3.33)$$

dove i coefficienti A, \mathbf{B}, C sono, a priori, funzioni di x e t . Inoltre è sempre possibile scrivere la 12.3.33 nella forma

$$\log f(x, v; t) = \log \Xi(x, t) - \sigma(x, t)(v - u(x, t))^2 \quad (12.3.34)$$

dove Ξ, σ, u sono determinate funzioni di A, \mathbf{B}, c . Dalla (12.3.34) si ricava

$$f(x, v; t) = \Xi(x, t) \exp(-\sigma(x, t)(v - u(x, t))^2) \quad (12.3.35)$$

Una funzione della forma (12.3.35) è detta una maxwelliana locale. Si può verificare facilmente la relazione

$$\langle v \rangle := \frac{\int_{\mathbb{R}^3} dv v f(x, v; t)}{\int_{\mathbb{R}^3} dv f(x, v; t)} = u \quad (12.3.36)$$

In tal modo il vettore u viene interpretato come velocità media del gas. Assegnati inoltre i campi ρ (densità molecolare) ed e (densità di energia), le funzioni Ξ e σ sono determinate dalle relazioni

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv f(x, v; t) = \rho(x, t) \quad (12.3.37)$$

$$\frac{\int_{\mathbb{R}^3} dv \frac{(v-u)^2}{2} f(x, v; t)}{\int_{\mathbb{R}^3} dv f(x, v; t)} = e(x, t) \quad (12.3.38)$$

Calcolando gli integrali (12.3.37) e (12.3.38) si può verificare che

$$f(x, v; t) = \frac{\rho(x, t)}{(2\pi T(x, t))^{3/2}} \exp\left(-\frac{(v - u(x, t))^2}{2T(x, t)}\right) \quad (12.3.39)$$

dove

$$T(x, t) := \frac{2}{3}e(x, t) \quad (12.3.40)$$

è detta temperatura del gas.

La procedura descritta fin qui garantisce che l'entropia H calcolata sulla (12.3.39) sia stazionaria, ma non che la (12.3.39) sia soluzione dell'equazione di Boltzmann. Questa condizione può essere realizzata chiedendo che i campi $\rho(x, t), u(x, t), T(x, t)$ siano uniformi in x e in t . Per dimostrare che questa condizione è sufficiente a garantire che la (12.3.39) sia soluzione dell'equazione di Boltzmann basta osservare che in ogni caso la (12.3.39) rende nullo l'operatore $Q(f, f)$ (perchè $M'_1 M'_2 = M_1 M_2$ per la conservazione dell'energia della massa e del momento); se si vuol soddisfare l'equazione di Boltzmann si deve imporre $D_t f = 0$, condizione soddisfatta se ρ, u, T sono semplici parametri. In tal caso la (12.3.39) è detta una maxwelliana globale di parametri ρ, u, T ed in seguito sarà denotata con il simbolo $M(\rho, u, T)$.

Osservazione 12.3.2. *Anche nel caso di un sistema di particelle interagenti a coppie mediante un potenziale ϕ è possibile dimostrare un teorema analogo al teorema H. La distribuzione cinetica d'equilibrio è ancora una maxwelliana globale e le particelle sono staticamente scorrelate. Si deve osservare che, dalla meccanica statistica dell'equilibrio, ci si aspetta che lo stato di equilibrio per il gas sia dato dalla distribuzione di Gibbs. Il fatto che nella maxwelliana d'equilibrio compaia soltanto il termine cinetico e non quello potenziale è dovuto al fatto che nel limite di Grad-Boltzmann² il gas è rarefatto, e il contributo delle interazioni intermolecolari all'energia del gas è trascurabile. L'equazione di stato che si ottiene valutando ad esempio la pressione è quella del gas perfetto $P = \rho T$. La termodinamica che si ottiene dalla teoria di Boltzmann è quella dei gas perfetti.*

L'entropia di equilibrio (termodinamica) è anche essa quella dei gas perfetti. Infatti valutiamo $H_t(M)$ dove M è una Maxwelliana globale ($d = 3$)

$$H_t(M) := \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv M(\rho, u, T; v) \log M(\rho, u, T; v)$$

²Per limite di Grad-Boltzmann si intende $d \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$, con il vincolo $Nd^2 \rightarrow O(1)$, equivalente ad avere un libero cammino medio λ finito.

$$\begin{aligned}
&= \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx dv M(\rho, u, T : v) \left[\log \rho - \frac{3}{2} \log(2\pi T) - \frac{|v-u|^2}{2T} \right] \\
&= \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dx \left[\rho \log \rho - \frac{3}{2} \rho \log(2\pi) - \frac{3}{2} \rho \log T - \frac{3}{2} \rho \right] \\
&= |\Lambda| \left[\rho \log \rho - \frac{3}{2} \log(2\pi) - \frac{3}{2} \rho \log T - \frac{3}{2} T \rho \right]
\end{aligned}$$

da cui

$$s(x, t) = \log \rho - \frac{3}{2} \rho \log T - cost = \log \frac{\rho}{T^{3/2}}$$

poichè

$$\frac{H_t}{N} \frac{N}{|\Lambda|} = s(x, t) \rho$$

Un modo euristico di introdurre la distribuzione di Maxwell Boltzmann è quello di considerare un sistema di particelle non interagenti e confrontare lo spazio delle fasi a N particelle $\Gamma = (\Lambda \times \mathbb{R}^d)^N$ con quello a una particella $\mu = \Lambda \times \mathbb{R}^d$. Uno stato microscopico è un punto in Γ mentre uno stato "macroscopico" è una funzione $f(x, v)$ su μ . Detta Δ_i una cella elementare in μ e n_i il numero di particelle in Δ_i il numero di stati microscopici corrispondente ad una data distribuzione $\{n_i\}_{i=1\dots k}$ è

$$\Omega(\{n_i\}) = \frac{N!}{\prod_{i=1}^k n_i!} \prod_{i=1}^k (\Delta_i)^{n_i} \quad (12.3.41)$$

L'entropia è data dal $\frac{\log \Omega}{N}$ nel limite $N \rightarrow \infty$, e sullo stato di equilibrio deve essere massima. Massimizzando $\log \Omega$ sotto le condizioni sul numero di particelle e l'energia totale ($e_i = \frac{v_i^2}{2}$)

$$\sum_{i=1}^k n_i = N, \quad \sum_{i=1}^k e_i n_i = E$$

si caratterizza la distribuzione di equilibrio come la distribuzione di Maxwell-Boltzmann. Il difetto di questo argomento è che un gas di particelle non interagenti non può rilassare all'equilibrio. Si può dire che nel calcolo della equazione di stato si trascura il contributo dell'energia potenziale perchè il gas è rarefatto. La teoria di Boltzmann prevede invece rilassamento all'equilibrio e dà la termodinamica del gas perfetto.

In una situazione di non equilibrio possiamo partire dall'espressione (12.3.41) dove $\{n_i\}$ è una distribuzione al tempo t . Usando la formula di Stirling possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \log \Omega &\approx \frac{1}{N} \left[N \log N - \sum_{i=1}^k n_i \log n_i + \sum_{i=1}^k \log \Delta_i n_i \right] \\
&= - \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{N} \log \frac{n_i}{N \Delta_i} = - \Delta \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{N \Delta} \log \frac{n_i}{N \Delta}
\end{aligned}$$

prendendo tutte le celle della stessa dimensione.

La relazione tra la distribuzione sullo spazio delle fasi $f(x, v; t)$ e $\{n_i\}_{i=1\dots k}$ è

$$n_i \approx N \int_{\Delta_i} dx dv f(x, v; t)$$

da cui per grandi N la somma approssima un integrale

$$\frac{1}{N} \log \Omega \approx - \int_{\mu} dx dv f \log f = -H(f)$$

Poichè $H(f)$ diminuisce al passare del tempo il volume Ω occupato dagli stati microscopici aumenta e asintoticamente nel tempo raggiunge il valore massimo che corrisponde alla distribuzione di equilibrio (Maxwell-Boltzmann).

Per concludere vogliamo sottolineare che il fatto che H decresca non è una proprietà del sistema dinamico, ma del livello di descrizione che abbiamo scelto del sistema. Il limite di Grad-Boltzmann porta ad un'equazione che prevede moti con H decrescente, gli altri moti hanno probabilità zero nel limite. Questa descrizione a livello macroscopico è giustificata dal fatto che i moti che portano a H crescente avvengono dopo un tempo in media dell'ordine di e^N che per $N \approx 10^{23}$ è dell'ordine dell'età dell'universo.

12.4 Leggi di conservazione.

Si consideri la relazione (12.3.10) nel caso in cui $g \equiv f$ è una soluzione dell'equazione di Boltzmann. In questo caso l'operatore $Q(f, g)$ si riduce all'operatore di Boltzmann, e l'equazione di Boltzmann ci permette di scrivere la (12.3.10) nella forma

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv \psi(x, v; t) \left(\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f \right) (x, v; t) = 0 \quad (12.4.1)$$

La (12.4.1) è la forma più generale assunta dalle leggi di conservazione associate all'equazione di Boltzmann. Poichè relativamente al sistema di sfere rigide interagenti mediante urti elastici le uniche osservabili conservate sono il numero di particelle (o anche la massa), l'impulso e l'energia cinetica, in questo caso valgono solo tre leggi di conservazione, di cui due (numero ed energia) scalari ed una (impulso) vettoriale. Nel seguito vogliamo studiare in dettaglio queste leggi.

Legge di conservazione della massa

Ponendo $\psi = 1$ la (12.4.1) assume la forma

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv \left(\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f \right) (x, v; t) = 0 \quad (12.4.2)$$

Adottando la convenzione della somma sugli indici ripetuti, portando fuori dall'integrale le derivate spazio-temporali, si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^3} dv f(x, v; t) + \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{\mathbb{R}^3} dv v_i f(x, v; t) = 0 \quad (12.4.3)$$

Le relazioni (12.3.36) e (12.3.37) permettono di scrivere la (12.4.2) come un'equazione di continuità:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (12.4.4)$$

Legge di conservazione dell'impulso

Ponendo $\psi = v_i$ la (12.4.1) assume la forma

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv v_i \left(\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f \right) (x, v; t) = 0 \quad (12.4.5)$$

Come nel caso precedente, portando le derivate fuori dagli integrali si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^3} dv v_i f(x, v; t) + \frac{\partial}{\partial x_j} \int_{\mathbb{R}^3} dv v_i v_j f(x, v; t) = 0 \quad (12.4.6)$$

Sfruttando (12.3.36) e (12.3.37) si riconosce che l'argomento della derivata temporale è il prodotto $\rho u(x, t)$. Per quanto riguarda il secondo integrale, si definisce il *tensore di pressione, o degli sforzi*

$$\Pi_{ij}(x, t) := \rho \langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle (x, t) \quad (12.4.7)$$

dove si è introdotta la notazione

$$\langle h \rangle (x, t) := \frac{\int_{\mathbb{R}^3} dv h(x, v; t) f(x, v; t)}{\int_{\mathbb{R}^3} dv f(x, v; t)} \quad (12.4.8)$$

Dalla definizione (12.4.7) si ricava

$$\Pi_{ij} = \rho \langle v_i v_j \rangle - \rho u_i u_j = \int_{\mathbb{R}^3} dv v_i v_j f(x, v; t) - \rho u_i u_j \quad (12.4.9)$$

da cui

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv v_i v_j f(x, v; t) = \Pi_{ij} + \rho u_i u_j \quad (12.4.10)$$

Introducendo la (12.4.10) nella (12.4.7) si ottiene l'equazione

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\Pi_{ij} + \rho u_i u_j) = 0 \quad (12.4.11)$$

Per ottenere la legge di conservazione dell'impulso nella sua forma standard, applichiamo la regola di derivazione del prodotto:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \nabla \cdot \Pi_i + \rho u_i (\nabla \cdot u) + \rho (u \cdot \nabla) u_i + u_i (u \cdot \nabla) \rho = 0 \quad (12.4.12)$$

Inoltre, utilizzando la legge di conservazione della massa, possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) &= \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial t} = \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} - u_i \nabla \cdot (\rho u) = \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} - u_i \partial_j (\rho u_j) \\ &= \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} - u_i u_j \partial_j \rho - u_i \rho \partial_j u_j = \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} - u_i (u \cdot \nabla) \rho - \rho u_i (\nabla \cdot u) \end{aligned} \quad (12.4.13)$$

Introducendo la (12.4.13) nella (12.4.12) ed effettuando le dovute semplificazioni, il risultato, espresso in notazione vettoriale, è la legge di conservazione dell'impulso:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u + \nabla \cdot \Pi = 0 \quad (12.4.14)$$

Legge di conservazione dell'energia

Ponendo $\psi = \frac{(v-u)^2}{2}$ e moltiplicando ambo i membri per N , la 12.4.1 assume la forma

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv \frac{(v-u)^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f \right) (x, v; t) = 0 \quad (12.4.15)$$

Cominciamo a studiare il primo termine di tale equazione. Risulta

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} dv \frac{(v-u)^2}{2} \frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^3} dv \frac{(v-u)^2}{2} f - \int_{\mathbb{R}^3} dv f \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(v-u)^2}{2} \right) \\ &= \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho T) - \sum_{i=1}^3 \int_{\mathbb{R}^3} dv f \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(v_i - u_i)^2}{2} \right) \\ &= \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \sum_{i=1}^3 \int_{\mathbb{R}^3} dv f (v_i - u_i) \frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho T) \end{aligned} \quad (12.4.16)$$

dove sono state utilizzate le relazioni (12.3.38), (12.3.40) e, nell'ultimo passaggio, il fatto che

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv f (v_i - u_i) = 0 \quad (12.4.17)$$

essendo u il valore di aspettazione di v . Lavoriamo ora sul secondo termine dell'equazione (12.4.15). Risulta

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} dv \frac{(v-u)^2}{2} v \cdot \nabla f &= \partial_i \int_{\mathbb{R}^3} dv f v_i \frac{(v-u)^2}{2} - \int_{\mathbb{R}^3} dv f v_i \partial_i \frac{(v-u)^2}{2} \\ &= \partial_i \int_{\mathbb{R}^3} dv f (v_i - u_i) \frac{(v-u)^2}{2} + \partial_i \int_{\mathbb{R}^3} dv u_i f \frac{(v-u)^2}{2} \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^3} dv f v_i (v_j - u_j) \partial_i u_j \end{aligned} \quad (12.4.18)$$

Per semplificare la (12.4.18) si definisce il vettore *flusso di calore*

$$q := \rho \left\langle (v-u) \frac{(v-u)^2}{2} \right\rangle \quad (12.4.19)$$

In tal modo risulta

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv \frac{(v-u)^2}{2} v \cdot \nabla f = \nabla \cdot q + \frac{3}{2} \nabla \cdot (\rho u T) + \int_{\mathbb{R}^3} dv f v_i (v_j - u_j) \partial_i u_j \quad (12.4.20)$$

Per quanto riguarda l'integrale che compare nella (12.4.20), possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} dv f v_i (v_j - u_j) \partial_i u_j &= (\partial_i u_j) \int_{\mathbb{R}^3} dv f v_i (v_j - u_j) \\ &= (\partial_i u_j) \int_{\mathbb{R}^3} dv f (v_i - u_i) (v_j - u_j) + (\partial_i u_j) \int_{\mathbb{R}^3} dv f u_i (v_j - u_j) \\ &= (\partial_i u_j) \int_{\mathbb{R}^3} dv f (v_i - u_i) (v_j - u_j) = \\ &= \Pi_{ij} (\partial_i u_j) := \Pi \cdot (\nabla u) \end{aligned} \quad (12.4.21)$$

Introducendo la (12.4.21) nella (12.4.20) e quindi le (12.4.16) e (12.4.20) nella (12.4.15), si ottiene la legge di conservazione dell'energia

$$\frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \frac{3}{2} \nabla \cdot (\rho u T) + \nabla \cdot q + \Pi \cdot (\nabla u) = 0 \quad (12.4.22)$$

Per ottenere la legge di conservazione dell'energia nella sua forma standard, applichiamo la regola di derivazione del prodotto e la legge di conservazione della massa:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - T \nabla \cdot (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u T) + \frac{2}{3} \nabla \cdot q + \frac{2}{3} \Pi \cdot (\nabla u) = 0 \quad (12.4.23)$$

Del resto vale la relazione

$$\nabla \cdot (\rho u T) = \rho u \cdot \nabla T + T \nabla \cdot (\rho u) \quad (12.4.24)$$

Sostituendo la (12.4.24) nella (12.4.23) e semplificando, si ottiene la legge cercata

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla T + \frac{2}{3} \nabla \cdot q + \frac{2}{3} \Pi \cdot (\nabla u) = 0 \quad (12.4.25)$$

Definendo la derivata sostanziale lungo il campo u come nell'equazione (12.2.28), scriviamo le tre leggi di conservazione nella forma

$$\begin{cases} D_t \rho + \rho \nabla \cdot u = 0 \\ \rho(D_t u) + \nabla \cdot \Pi = 0 \\ \rho(D_t T) + \frac{2}{3} \nabla \cdot q + \frac{2}{3} \Pi \cdot (\nabla u) = 0 \end{cases} \quad (12.4.26)$$

12.5 Equazioni di Eulero

Consideriamo le leggi di conservazione (12.4.26). Si potrebbe tentare di leggere tali equazioni come equazioni differenziali che regolano l'evoluzione spazio-temporale dei campi ρ, u, T . Nel far questo si presenta una notevole difficoltà: le leggi di conservazione dell'impulso e dell'energia non sono chiuse nei campi ρ, u, T , nel senso che i tensori Π e q dipendono dalla distribuzione f in modo esplicito e non eliminabile mediante le definizioni dei suddetti campi. Dunque per risolvere le equazioni (12.4.26) è necessario e sufficiente assegnare la f , cioè i campi ρ, u, T (in base alle definizioni (12.3.36), (12.3.37), (12.3.38)). Oppure si può assegnare una particolare forma funzionale della f , cioè la sua dipendenza dai campi ρ, u, T , e cercare di capire se, rispetto a quella particolare forma funzionale le equazioni (12.4.26) si chiudono. In particolare ciò avviene scegliendo per la f la maxwelliana locale $M(\rho, u, T)(x, v; t)$ (12.3.39). Per stabilire quale forma assumono le leggi di conservazione in seguito a tale scelta, studiamo i tensori Π e q . Poichè risulta

$$\int_{\mathbb{R}^3} dv_i (v_i - u_i)^{(2k+1)} \exp(-\alpha(v_i - u_i)^2) = 0 \quad k \in \mathbf{N} \quad (12.5.1)$$

si riconosce che il tensore degli sforzi è diagonale rispetto alla maxwelliana locale:

$$\Pi_{ij} \Big|_{f=M(x,t)} = \delta_{ij} \rho \langle (v_i - u_i)^2 \rangle = \delta_{ij} \frac{1}{3} \rho \langle (v - u)^2 \rangle \quad (12.5.2)$$

dove l'ultima uguaglianza vale in quanto, nel caso di una distribuzione maxwelliana, la varianza non dipende dall'indice i . Sfruttando la definizione del campo di temperatura T , si dimostra facilmente che

$$\frac{1}{3} \rho \langle (v - u)^2 \rangle = \rho T \quad (12.5.3)$$

cosicchè risulta

$$\Pi_{ij}|_{f=M(x,t)} = \delta_{ij}P \quad (12.5.4)$$

dove

$$P := \rho T \quad (12.5.5)$$

è detta pressione del gas. La legge di conservazione dell'impulso ora si scrive nella forma

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u + \nabla P = 0 \quad (12.5.6)$$

Ancora in virtù della (12.5.1) si riconosce che

$$q|_{f=M(x,t)} = 0 \quad (12.5.7)$$

cosicchè l'equazione di conservazione dell'energia è data da

$$\rho(D_t T) + \frac{2}{3}P(\nabla \cdot u) = 0 \quad (12.5.8)$$

Le tre equazioni

$$\left\{ \begin{array}{l} D_t \rho + \rho \nabla \cdot u = 0 \\ \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u + \nabla P = 0 \\ \rho(D_t T) + \frac{2}{3}P(\nabla \cdot u) = 0 \end{array} \right. \quad (12.5.9)$$

sono dette *equazioni di Eulero per un fluido ideale* e sono le equazioni fondamentali dell'idrodinamica.

Si pone il problema di comprendere per quale motivo la particolare scelta fatta per la distribuzione f conduca alle equazioni di Eulero, cioè quale legame esista tra la teoria cinetica e l'idrodinamica. Rimandiamo la discussione di questo problema al Capitolo 14.

12.6 La gerarchia BBGKY

Il procedimento di derivazione dell'equazione di Boltzmann discusso nella sezione 1.1 riproduce abbastanza fedelmente quello seguito dallo stesso Boltzmann (1872). In esso il passaggio fondamentale è costituito dall'ipotesi di caos molecolare, che è un'ipotesi di natura statistica, apparentemente priva di connessioni con le leggi della meccanica newtoniana. Poichè si ritiene che tali leggi siano corrette (purchè sia possibile trascurare gli effetti quantistici), si pone il problema di stabilire la validità dell'equazione di Boltzmann, cioè di derivare l'equazione partendo dalla descrizione microscopica del gas.

Si vuole anzitutto studiare statisticamente l'evoluzione microscopica dei sistemi a molte particelle. A tale scopo consideriamo un sistema di N particelle di massa $m = 1$, confinate in una regione Λ regolare (in modo che l'evoluzione temporale sia ben definita), caratterizzato dall'hamiltoniana

$$H(q, v) = \sum_{i=1}^N \frac{v_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i,j:i \neq j} \phi(q_i - q_j) \quad (12.6.1)$$

dove ϕ è un potenziale regolare che decade rapidamente a zero. Supponiamo le particelle confinate in una regione Λ regolare e limitata di \mathbb{R}^3 . Lo stato x del sistema nello spazio delle fasi ad N particelle $\Gamma = (\Lambda \times \mathbb{R}^3)^N$ è definito dalla relazione

$$x := (x_1, \dots, x_N) = (q_1, v_1, \dots, q_N, v_N) \quad (12.6.2)$$

Si definisca $P_t(x)$ come la densità di probabilità che al tempo t il sistema si trovi nel punto x dello spazio delle fasi ad N particelle. Assumiamo P_t simmetrica rispetto ad una permutazione di (x_1, \dots, x_N) . L'evoluzione temporale della $P_t(x)$ è descritta dall'equazione di Liouville

$$\frac{\partial P_t}{\partial t}(x) = \{H, P_t\}(x) \quad (12.6.3)$$

dove

$$\{f, g\} := \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial v_i} - \frac{\partial g}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial v_i} \right) \quad (12.6.4)$$

è detta *parentesi di Poisson* delle osservabili f e g . Calcolando la (12.6.3) sull'hamiltoniana (12.6.1) e definendo l'operatore differenziale lineare

$$H_N f(x) := \sum_{i=1}^N \left(-v_i \frac{\partial f}{\partial q_i}(x) + \sum_{j:j \neq i} \frac{\partial \phi}{\partial q_i}(q_i - q_j) \frac{\partial f}{\partial v_i}(x) \right) \quad (12.6.5)$$

l'equazione di Liouville può essere scritta nella forma

$$\frac{\partial P_t}{\partial t}(x) = H_N P_t(x) \quad (12.6.6)$$

Definiamo le funzioni di correlazione a j particelle ($j = 1, \dots, N$) nel modo seguente

$$\rho_j(x_1, \dots, x_j; t) := \frac{N!}{(N-j)!} \int_{(\Lambda \times \mathbb{R}^3)^{(N-j)}} dx_{j+1} dx_{j+2} \dots dx_N P_t(x_1, \dots, x_N) \quad (12.6.7)$$

Per $j = N$ si ottiene $\rho_N = N! P_t$. Ricordiamo che $P_t(x_1, \dots, x_N)$ è la probabilità che la particella 1 è in x_1, \dots la particella N in x_N . Invece $\rho_j(x_1, \dots, x_j; t)$ è la probabilità che ci sia una particella in x_1 , un'altra in x_2 etc. . Poichè P_t è simmetrica nelle permutazioni degli indici delle particelle si ha la relazione precedente tra le due grandezze. Invece, calcolando la 12.6.7 per $j = 1$, si ottiene

$$\rho_1(x_1; t) = N \int dx_2 \dots dx_N P_t(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (12.6.8)$$

La funzione di correlazione ρ_1 ha sostanzialmente lo stesso significato fisico della f di Boltzmann, differendo da quest'ultima soltanto per la normalizzazione: la f è normalizzata ad 1, mentre la ρ_1 è normalizzata ad N e pertanto va interpretata come la densità di particelle del gas nel punto x_1 dello spazio delle fasi ad 1 particella al tempo t . In altri termini, $\int_{\Delta} dx \rho(x, t)$ e' il numero medio di particelle in Δ al tempo t rispetto alla misura μ_t e ρ_2 e' il valore medio di $n_{\Delta}(n_{\Delta} - 1)$, dove n_{Δ} e' il numero di particelle. Le equazioni differenziali che governano l'evoluzione spazio-temporale delle ρ_j si ottengono derivando ambo i membri della (12.6.7) rispetto a t , portando la derivata sotto il segno di integrale e applicando l'equazione di Liouville (12.6.6). Il risultato è

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t}(t; x_1, \dots, x_j) = \frac{N!}{(N-j)!} \int dx_{j+1} \dots dx_N \left[- \sum_{i=1}^N v_i \frac{\partial P_t}{\partial q_i} + \sum_{i,k:i \neq k}^{1,N} \frac{\partial \phi}{\partial q_i}(q_i - q_k) \frac{\partial P_t}{\partial v_i} \right] \quad (12.6.9)$$

È possibile semplificare tale equazione nel modo seguente. Cominciamo a lavorare sulla prima somma. Poniamo

$$\Theta(x_1, \dots, x_j; t) := -\frac{N!}{(N-j)!} \sum_{i=1}^N \int dx_{j+1} \dots dx_N v_i \frac{\partial P_t}{\partial q_i} \quad (12.6.10)$$

La somma che definisce Θ può essere sempre scritta nella forma

$$\Theta(x_1, \dots, x_j; t) = \sum_{i=1}^j (\dots) + \sum_{i=j+1}^N (\dots) = \quad (12.6.11)$$

$$-\sum_{i=1}^j v_i \frac{\partial \rho_j}{\partial q_i} - \frac{N!}{(N-j)!} \sum_{i=j+1}^N \int dx_{i=j+1} \dots dx_N v_i \frac{\partial P_t}{\partial q_i} \quad (12.6.12)$$

L'ultima somma nella (12.6.12) è identicamente nulla. Infatti

$$\int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dq_i dp_i v_i \frac{\partial P_t}{\partial q_i} = \int_{\mathbb{R}^3} dv_i \int_{\Lambda} dq_i \nabla \cdot (P_t v_i) = \int_{\mathbb{R}^3} dv_i \int_{\partial \Lambda} d\sigma(q_i) n \cdot v_i P_t \quad (12.6.13)$$

Quest'integrale è in ogni caso nullo: se per Λ si considera un toro (condizioni periodiche al bordo), allora $\partial \Lambda = \emptyset$. Se Λ è dotato di bordo, occorre mettere delle condizioni al contorno per la P_t . Se si scelgono condizioni al contorno riflettenti poichè l'integrale su v_i è esteso a tutto \mathbb{R}^3 , per ogni contributo in v_i se ne ha uno uguale ed opposto in $-v_i$. In definitiva

$$\Theta(x_1, \dots, x_j; t) = -\sum_{i=1}^j v_i \frac{\partial \rho_j}{\partial q_i}(x_1, \dots, x_j; t) \quad (12.6.14)$$

Lavoriamo ora sulla seconda somma nell'equazione (12.6.9). Poniamo

$$\Delta(x_1, \dots, x_j; t) := \frac{N!}{(N-j)!} \sum_{i,k:i \neq k}^{1,N} \int dx_{j+1} \dots dx_N \frac{\partial \phi}{\partial q_i}(q_i - q_k) \frac{\partial P_t}{\partial v_i} \quad (12.6.15)$$

Come nel caso precedente, scriviamo Δ nella forma

$$\Delta = \sum_{i=1}^j \sum_{k \neq i} (\dots) + \sum_{i=j+1}^N \sum_{k \neq i} (\dots) \quad (12.6.16)$$

Con un argomento analogo a quello utilizzato nella (12.6.13) dimostriamo che la somma su i da $j+1$ ad N è nulla.

$$\begin{aligned} \int dq_i dp_i \frac{\partial \phi}{\partial q_i}(q_i - q_k) \frac{\partial P_t}{\partial v_i} &= \int_{\Lambda} dq_i \int_{\mathbb{R}^3} dv_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left(P_t \frac{\partial \phi}{\partial q_i}(q_i - q_k) \right) = \\ &= \int_{\Lambda} dq_i \int_{S_{\infty}} d\sigma(v_i) \frac{\partial \phi}{\partial q_i}(q_i - q_k) \cdot n P_t = 0 \end{aligned} \quad (12.6.17)$$

in quanto sulla sfera all'infinito S_{∞} nello spazio delle velocità la P_t è identicamente nulla. Possiamo allora scrivere

$$\Delta(x_1, \dots, x_j; t) = \frac{N!}{(N-j)!} \left(\sum_{i,k:i \neq k}^{1,j} \frac{\partial \phi}{\partial q_i}(q_i - q_k) \frac{\partial}{\partial v_i} \int dx_{j+1} \dots dx_N P_t + \right.$$

$$+ \sum_{i=1}^j \sum_{k=j+1}^N \int dx_{j+1} \dots dx_N \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial P_t}{\partial v_i} \quad (12.6.18)$$

La prima somma nella (12.6.18) può essere scritta nella forma

$$\sum_{i,k:i \neq k}^{1,j} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial \rho_j}{\partial v_i}$$

Per quanto riguarda la seconda somma si deve osservare che, data la proprietà di simmetria della P_t , tutti i termini della somma su k contribuiscono nello stesso modo, cosicchè possiamo scrivere la seconda somma nella forma

$$\begin{aligned} & \frac{N!}{(N-j-1)!} \sum_{i=1}^j \int dx_{j+1} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_{j+1}) \frac{\partial}{\partial v_i} \int dx_{j+2} \dots dx_N P_t = \\ & = \sum_{i=1}^j \int dx_{j+1} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_{j+1}) \frac{\partial \rho_{j+1}}{\partial v_i} \end{aligned} \quad (12.6.19)$$

Raccogliendo tutti i termini sviluppati, possiamo scrivere l'equazione differenziale per la ρ_j nella forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_j}{\partial t}(x_1, \dots, x_j; t) &= - \sum_{i=1}^j v_i \frac{\partial \rho_j}{\partial q_i} + \sum_{i,k:i \neq k}^{1,j} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial \rho_j}{\partial v_i} \\ &+ \sum_{i=1}^j \int dx_{j+1} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_{j+1}) \frac{\partial \rho_{j+1}}{\partial v_i} \end{aligned} \quad (12.6.20)$$

ovvero

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} = H_j \rho_j + C_{j,j+1} \rho_{j+1} \quad j = 1, \dots, N \quad (12.6.21)$$

dove si è posto

$$C_{j,j+1} h = \sum_{i=1}^j \int dx_{j+1} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_{j+1}) \frac{\partial h}{\partial v_i} \quad (12.6.22)$$

Il sistema di equazioni (12.6.21) è detto *gerarchia BBGKY* (da Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon). Esso è un sistema di equazioni differenziali accoppiate: non è possibile risolvere separatamente tali equazioni. Inoltre si può verificare facilmente che la (12.6.21) è invariante per inversione temporale. Infine, poichè risulta

$$\rho_N = N! P_t \quad \text{e} \quad \rho_{N+1} \equiv 0 \quad (12.6.23)$$

l'equazione per ρ_N coincide con l'equazione di Liouville.

Quanto detto fino ad ora vale nel caso in cui l'interazione tra le particelle è descritta da un potenziale regolare ϕ . Ora vogliamo studiare il modo in cui la gerarchia BBGKY si adatta al caso di sfere rigide che interagiscono soltanto attraverso urti elastici. Ripartiamo dunque dall'equazione di Liouville, definita ora non più sullo spazio Γ , ma su $\Gamma' = \Gamma \setminus \Sigma^d$, dove

$$\Sigma^d := \{x \in \Gamma : |q_i - q_j| < d \text{ per qualche } 1 \leq i, j \leq N \text{ e } i \neq j\} \quad (12.6.24)$$

Lo studio di tale equazione richiede l'assegnazione di una condizione al contorno su

$$\partial\bar{\Sigma}^d = \{x \in \Gamma : |q_i - q_j| = d \text{ per qualche } 1 \leq i, j \leq N \text{ e } i \neq j\} \quad (12.6.25)$$

(\bar{A} denota la chiusura di A). La condizione al contorno che scegliamo è precisata nel modo seguente. Supponiamo che x_1 ed x_2 siano due punti nello spazio delle fasi della forma

$$x_1 = (q_1, v_1, \dots, \tilde{q}, k_1, \dots, \tilde{q} - d\hat{\omega}, k_2, \dots, q_N, v_N) \quad (12.6.26)$$

$$x_2 = (q_1, v_1, \dots, \tilde{q}, k'_1, \dots, \tilde{q} - d\hat{\omega}, k'_2, \dots, q_N, v_N) \quad (12.6.27)$$

dove le coppie $\{k_1, k_2\}$ e $\{k'_1, k'_2\}$ vanno interpretate rispettivamente come coppie di velocità entranti ed uscenti in un urto. In tal caso imponiamo

$$P_t(x_1) = P_t(x_2) \quad (12.6.28)$$

Il significato fisico della condizione (12.6.28) è il seguente. Per un sistema di sfere rigide la dinamica microscopica del punto rappresentativo del sistema nello spazio delle fasi è discontinua negli istanti in cui avviene un urto tra due particelle. Ciò perchè le velocità delle due particelle che collidono variano bruscamente. È possibile eliminare questa discontinuità identificando statisticamente i punti d'urto x_1 e x_2 . Non è difficile verificare che lo spazio così ottenuto è una varietà regolare e che l'evoluzione temporale del sistema è un flusso regolare, pur di eliminare dal nuovo spazio i punti dello spazio delle fasi corrispondenti a collisioni triple o di ordine superiore. Rimangono alcuni problemi: non tutte le orbite possono essere estese indefinitamente nel tempo (poichè alcune di esse conducono ai punti di fase esclusi). Del resto si può dimostrare che l'insieme di queste orbite non è troppo grande, così che l'evoluzione temporale degli stati statistici è ancora governata dall'equazione di Liouville. Se si ripete lo stesso procedimento di integrazione discusso nella prima parte di questa sezione, si trova che anche per il sistema di sfere rigide vale una gerarchia BBGKY

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t}(t) = H_j \rho_j(t) + C_{j,j+1} \rho_{j+1}(t) \quad (12.6.29)$$

dove, in questo caso

$$C_{j,j+1} \rho_{j+1}(x_1, \dots, x_j; t) = -d^2 \sum_{i=1}^j \int dv_{j+1} d\omega \hat{\omega} \cdot (v_{j+1} - v_i) \rho_{j+1}(x_1, \dots, x_j, q_i - d\hat{\omega}, v_{j+1}) \quad (12.6.30)$$

e l'integrale su $\hat{\omega}$ è esteso a tutta la sfera unitaria. Non dimostriamo la formula (12.6.29). Naturalmente siamo interessati a studiare l'equazione (12.6.29) nel caso $j = 1$. Perciò osserviamo che

$$H_1 = -v_1 \frac{\partial}{\partial q_1} \quad (12.6.31)$$

e che

$$C_{1,2} \rho_2 = -d^2 \int dv_2 d\omega \hat{\omega} \cdot (v_2 - v_1) \rho_2(q_1, v_1, q_1 - d\hat{\omega}, v_2; t) \quad (12.6.32)$$

L'integrale 12.6.32 può essere scritto come

$$\begin{aligned} C_{1,2} \rho_2 &= -d^2 \int_{(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega \hat{\omega} \cdot (v_2 - v_1) \rho_2(q_1, v_1, q_1 - d\hat{\omega}, v_2; t) - \\ &- d^2 \int_{(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \leq 0} dv_2 d\omega \hat{\omega} \cdot (v_2 - v_1) \rho_2(q_1, v_1, q_1 - d\hat{\omega}, v_2; t) \end{aligned} \quad (12.6.33)$$

Poichè nel secondo integrale ρ_2 è calcolata su una coppia di punti di collisione, grazie all'identificazione fatta precedentemente possiamo rimpiazzare le velocità $\{v_1, v_2\}$ con $\{v'_1, v'_2\}$. Effettuando poi il cambiamento di variabile $\hat{\omega} \rightarrow -\hat{\omega}$, si ottiene

$$C_{1,2}\rho_2 = d^2 \int_{(v_2-v_1)\cdot\hat{\omega}\geq 0} dv_2 d\omega \hat{\omega} \cdot (v_2 - v_1) \times (\rho_2(q_1, v'_1, q_1 + d\hat{\omega}, v'_2; t) - \rho_2(q_1, v_1, q_1 - d\hat{\omega}, v_2; t)) \quad (12.6.34)$$

Sostituendo le (12.6.31) e (12.6.34) nella (12.6.29) calcolata per $j = 1$, si riconosce che l'equazione ottenuta si riduce all'equazione di Boltzmann se

1. rimpiazziamo $\rho_2(x_1, x_2; t)$ con $\rho_1(x_1; t)\rho_1(x_2; t)$
2. poniamo $\rho_1(x; t) = Nf(x; t)$
3. facciamo tendere $d \rightarrow 0$ ed $N \rightarrow \infty$ in modo tale che $Nd^2 = \text{cost}$ (limite di Grad-Boltzmann).

Il limite di Grad-Boltzmann è singolare in quanto determina il passaggio da un'equazione reversibile ad una irreversibile. Il fatto che l'irreversibilità dell'equazione di Boltzmann sia legata a tale limite si riconosce osservando che, esprimendo la (12.6.34) in termini delle velocità uscenti invece di quelle entranti e ripetendo le operazioni 1), 2) e 3) si ottiene l'equazione di Boltzmann con l'operatore $Q(f, f)$ cambiato di segno.

12.7 La gerarchia di Boltzmann.

Il secondo passo nella derivazione microscopica dell'equazione di Boltzmann consiste nel dimostrare che tale equazione è equivalente ad una gerarchia di infinite equazioni differenziali accoppiate. Ciò è espresso dal seguente

Teorema 12.7.1. *Sia*

$$f_j(x_1, \dots, x_j; t) := \prod_{i=1}^j f_1(x_i; t) \quad j = 1, 2, \dots \quad (12.7.1)$$

f_1 soddisfa l'equazione di Boltzmann se e solo se le f_j soddisfano la gerarchia di Boltzmann

$$\frac{\partial f_j}{\partial t} = H_j^{(0)} f_j + C_{j,j+1}^{(0)} f_{j+1} \quad (12.7.2)$$

dove

$$H_j^{(0)} f_j = - \sum_{i=1}^j v_i \frac{\partial f_j}{\partial q_i}, \quad (12.7.3)$$

$$C_{j,j+1} f_j = Nd^2 \sum_{i=1}^j \int_{(v_{j+1}-v_i)\cdot\hat{\omega}\geq 0} dv_{j+1} (v_{j+1} - v_i) \cdot \hat{\omega} \times (f_{j+1}(x_1, \dots, q_i, v'_i, \dots, q_i, v'_{j+1}) - f_{j+1}(x_1, \dots, q_i, v_i, \dots, q_i, v_{j+1})) \quad (12.7.4)$$

Dimostrazione. Dimostriamo il teorema. Supponiamo dapprima che f_1 soddisfi l'equazione di Boltzmann. Dalla regola di derivazione del prodotto risulta

$$\frac{\partial f_j}{\partial t} = \sum_{k=1}^j \frac{\partial f_1}{\partial t}(x_k; t) \prod_{i \neq k}^{1,j} f_1(x_i; t) \quad (12.7.5)$$

Applicando l'equazione di Boltzmann nella (12.7.5) si ottiene

$$\frac{\partial f_j}{\partial t} = \sum_{k=1}^j \left(-v_k \frac{\partial f_1}{\partial q_k}(x_k; t) + Q(f_1, f_1)(x_k; t) \right) \prod_{i \neq k}^{1,j} f_1(x_i; t) \quad (12.7.6)$$

Poichè la funzione $\prod_{i \neq k} f_1(x_i; t)$ non dipende da q_k , possiamo portarla sotto il segno di derivata nel primo termine a secondo membro. Per quanto riguarda il secondo termine scriviamo

$$\begin{aligned} Q(f_1, f_1)(x_k; t) &= Nd^2 \sum_{k=1}^j \int_{(v_{j+1}-v_k) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_{j+1} d\omega \hat{\omega} \cdot (v_{j+1} - v_k) \times \\ &\times (f_1(q_k, v'_{j+1}; t) f_1(q_k, v'_k; t) - f_1(q_k, v_{j+1}; t) f_1(q_k, v_k; t)) \end{aligned} \quad (12.7.7)$$

Poichè risulta

$$f_1(q_k, v'_{j+1}; t) f_1(q_k, v'_k; t) \prod_{i \neq k}^{1,j} f_1(x_i; t) = f_{j+1}(x_1, \dots, q_k, v'_k, \dots, q_k, v'_{j+1}; t) \quad (12.7.8)$$

e

$$f_1(q_k, v_{j+1}; t) f_1(q_k, v_k; t) \prod_{i \neq k}^{1,j} f_1(x_i; t) = f_{j+1}(x_1, \dots, q_k, v_k, \dots, q_k, v_{j+1}; t) \quad (12.7.9)$$

la tesi è dimostrata. \square

Se si suppone che la f_j di (12.7.1) sia soluzione della gerarchia di Boltzmann, possiamo ripetere a ritroso il ragionamento fatto e concludere che vale anche la tesi inversa.

Osservazione 12.7.1. *Concludiamo osservando che il limite di Grad-Boltzmann può essere visto come una legge dei grandi numeri. Consideriamo l'osservabile $b = \frac{n_\Delta}{N}$ dove n_Δ è il numero di particelle in una cella dello spazio delle fasi a una particella Δ di centro x, v e N è il numero totale di particelle. Tale osservabile converge nel limite di Grad-Boltzmann ad una variabile certa $f(x, v, t)$. Infatti sia $E^{(d)}$ l'attesa rispetto alla misura di Liouville del sistema di sfere dure di diametro d . Si ha*

$$E^{(d)} \left[\frac{n_\Delta}{N} \right] = \int_{\Delta} dx_1 dv_1 f_1^{(d)}(x_1, v_1, t)$$

dove $f_1^{(d)}$ è la funzione di correlazione ad una particella nella gerarchia di Bogolubov per un sistema di N sfere dure di diametro d . Consideriamo

$$E^{(d)} \left[\frac{n_\Delta n_{\Delta-1}}{N(N-1)} \right] = \int_{\Delta \times \Delta} dx_1 dv_1 dx_2 dv_2 f_2^{(d)}(x_1, v_1, x_2, v_2; t)$$

Nel limite di Grad-Boltzmann che indichiamo simbolicamente con $d \rightarrow 0$ si ha

$$\lim_{d \rightarrow 0} E^{(d)} \left[\frac{n_\Delta}{N} \right] = \int_{\Delta} dx dv f(x, v, t), \quad \lim_{d \rightarrow 0} E^{(d)} \left[\frac{n_\Delta n_{\Delta-1}}{N(N-1)} \right] = \left[\int_{\Delta} dx dv f(x, v, t) \right]^2$$

da cui la fluttuazione di b tende a zero

$$\lim_{d \rightarrow 0} \left[E^{(d)} \left[\left(\frac{n_\Delta}{N} \right)^2 \right] - \left(E^{(d)} \left[\frac{n_\Delta}{N} \right] \right)^2 \right] = 0$$

Capitolo 13

Dalla Teoria Cinetica all'Idrodinamica

13.1 Perturbazione di un gas in equilibrio cinetico

L'idrodinamica studia il comportamento fisico dei sistemi di particelle in fase liquida. Le prime ricerche in questo campo risalgono al sec. XVIII e sono legate ai nomi di Eulero, Bernoulli, D'Alambert, Lagrange ed altri. Esse sono rivolte alla comprensione del fluido ideale, per definizione privo di viscosità. Soltanto nel secolo scorso, grazie a Navier, Stokes, Reynold ed altri, viene affrontato teoricamente il problema dei liquidi reali, problema che resta ancora per molti aspetti insoluto. I risultati più importanti prodotti da tali ricerche sono costituiti dalle equazioni di Eulero (nell'ambito dello studio dei fluidi ideali) e dalle equazioni di Navier-Stokes (per la descrizione dei fluidi reali). Attualmente una parte importante della ricerca nel campo dell'idrodinamica è rivolta alla giustificazione di tali equazioni a partire dalle descrizioni hamiltoniana e cinetica.

È possibile ricavare fenomenologicamente le equazioni di Eulero, sfruttando principi meccanici quali la conservazione della massa, dell'impulso e dell'energia. È inoltre possibile ricavare tali equazioni facendo uso di un principio variazionale, nello stesso modo in cui in meccanica si ricavano le equazioni di Eulero-Lagrange. Le equazioni di Navier-Stokes sono ricavate fenomenologicamente da quelle di Eulero osservando che queste ultime sono equazioni conservative e introducendo in esse termini additivi che producono buone proprietà di dissipazione. Non discutiamo la derivazione fenomenologica delle equazioni di Eulero.

L'argomento principale di questo capitolo è la connessione tra la teoria cinetica e l'idrodinamica, cioè la derivazione delle equazioni idrodinamiche a partire dall'equazione di Boltzmann.

Consideriamo un gas rarefatto, descrivibile in termini dell'equazione di Boltzmann. Supponiamo che esso si trovi inizialmente in equilibrio, cioè che la sua distribuzione cinetica sia una maxwelliana globale $M(v)$. Supponiamo che ad un determinato istante il fluido venga perturbato, in modo tale che la distribuzione cinetica del gas sia della forma

$$f(x, v; t) = M(v)(1 + \alpha g(x, v; t)) \quad (13.1.1)$$

dove α è un parametro che misura l'intensità della perturbazione $g(x, v; t)$. Siamo interessati a conoscere l'equazione differenziale che regola l'evoluzione spazio-temporale di $g(x, v; t)$. A tale scopo imponiamo che $f(x, v; t)$ sia soluzione dell'equazione di Boltzmann:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(M(1 + \alpha g) \right) + v \cdot \nabla \left(M(1 + \alpha g) \right) = Q \left(M(1 + \alpha g), M(1 + \alpha g) \right) \quad (13.1.2)$$

Considerando che M soddisfa l'equazione di Boltzmann, la (13.1.2) si semplifica, per α finito, nel modo seguente

$$M \left(\frac{\partial g}{\partial t} + v \cdot \nabla g \right) = Q(M, Mg) + Q(Mg, M) + \alpha Q(Mg, Mg) \quad (13.1.3)$$

L'equazione ottenuta è debolmente non lineare per $\alpha \ll 1$. Essa può essere linearizzata formalmente mediante il limite $\alpha \rightarrow 0$, corrispondente ad una perturbazione infinitamente piccola. Il procedimento di linearizzazione è utile, oltre che per la comprensione fisica della perturbazione g , anche per la risoluzione dell'equazione non linearizzata. Il risultato di questo procedimento è l'equazione

$$M \left(\frac{\partial g}{\partial t} + v \cdot \nabla g \right) = \mathcal{L}Mg \quad (13.1.4)$$

dove abbiamo definito l'operatore integrale

$$\mathcal{L}h := Q(M, h) + Q(h, M) \quad (13.1.5)$$

Poichè l'operatore \mathcal{L} interviene nella teoria che svilupperemo in questo capitolo, cominciamo a studiarlo in dettaglio. Osserviamo che \mathcal{L} dipende dai parametri ρ, u, T della maxwelliana M anche se non è esplicitamente indicato. Le principali proprietà dell'operatore \mathcal{L} sono illustrate nelle seguenti proposizioni

Proposizione I

Sia $h(x, v; t)$ una funzione per cui $\mathcal{L}h$ ha senso ed è integrabile in v . Se ψ è un invariante collisionale, allora

$$\int_{R^3} dv \psi \mathcal{L}h = 0 \quad (13.1.6)$$

La dimostrazione di questa proposizione è identica a quella data nella sezione 1.2.

Definiamo ora uno spazio di Hilbert assegnando il prodotto scalare

$$(f, g)(x; t) := \int_{R^3} dv \frac{1}{M(v)} f(x, v; t) g(x, v; t) \quad (13.1.7)$$

dove $M(v)$ è la *stessa* maxwelliana che compare nella definizione di \mathcal{L} .

Proposizione II

\mathcal{L} è un operatore autoaggiunto rispetto al prodotto scalare (13.1.7):

$$(g, \mathcal{L}f) = (\mathcal{L}g, f) \quad (13.1.8)$$

La dimostrazione della proposizione richiede alcuni conti algebrici. Per definizione

$$\mathcal{L}f(x, v; t) = \int_{(v_2-v) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v) \cdot \hat{\omega} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.9)$$

Dunque

$$(g, \mathcal{L}f) = \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g_1}{M_1} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.10)$$

Eseguendo nella (13.1.10) la trasformazione

$$v_1 \longrightarrow v_2 \quad v_2 \longrightarrow v_1 \quad (13.1.11)$$

si ottiene

$$(g, \mathcal{L}f) = - \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \leq 0} dv_1 dv_2 d\omega(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g_2}{M_2} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.12)$$

Eseguendo nella (13.1.12) la trasformazione $\hat{\omega} \longrightarrow -\hat{\omega}$, si ottiene

$$(g, \mathcal{L}f) = \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega(v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g_2}{M_2} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.13)$$

Eseguendo nella (13.1.13) la trasformazione

$$v_1 \longrightarrow v'_1 \quad v_2 \longrightarrow v'_2 \quad (13.1.14)$$

si ottiene

$$(g, \mathcal{L}f) = \int_{(v'_2-v'_1) \cdot \hat{\omega} \leq 0} dv'_1 dv'_2 d\omega(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g'_2}{M'_2} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.15)$$

Eseguendo nella (13.1.15) la trasformazione $\hat{\omega} \longrightarrow -\hat{\omega}$, si ottiene

$$(g, \mathcal{L}f) = - \int_{(v'_2-v'_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv'_1 dv'_2 d\omega(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g'_2}{M'_2} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.16)$$

Eseguendo nella (13.1.16) la trasformazione

$$v'_1 \longrightarrow v'_2 \quad v'_2 \longrightarrow v'_1 \quad (13.1.17)$$

si ottiene

$$(g, \mathcal{L}f) = \int_{(v'_2-v'_1) \cdot \hat{\omega} \leq 0} dv'_1 dv'_2 d\omega(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g'_1}{M'_1} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.18)$$

Eseguendo nella (13.1.18) la trasformazione $\hat{\omega} \longrightarrow -\hat{\omega}$, si ottiene

$$(g, \mathcal{L}f) = - \int_{(v'_2-v'_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv'_1 dv'_2 d\omega(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g'_1}{M'_1} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.19)$$

Si esegua ora nelle (13.1.16) e (13.1.19) il cambiamento di variabili $v'_1 \longrightarrow v_1$ e $v'_2 \longrightarrow v_2$, lasciando però invariate le espressioni g'_1/M'_1 e g'_2/M'_2 , da pensarsi come funzioni di v_1, v_2 . Quindi si effettui la trasformazione $\hat{\omega} \longrightarrow -\hat{\omega}$. Si ottengono in tal modo le formule

$$(g, \mathcal{L}f) = - \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g'_2}{M'_2} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.20)$$

$$(g, \mathcal{L}f) = - \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \frac{g'_1}{M'_1} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \quad (13.1.21)$$

Sommando le (13.1.10), (13.1.13), (13.1.20) e (13.1.21) si ottiene

$$(g, \mathcal{L}f) = -\frac{1}{4} \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} (f'_2 M'_1 + M'_2 f'_1 - f_2 M_1 - M_2 f_1) \times \left(\frac{g'_1}{M'_1} + \frac{g'_2}{M'_2} - \frac{g_1}{M_1} - \frac{g_2}{M_2} \right) \quad (13.1.22)$$

Ripetendo lo stesso tipo di argomenti usati fino a questo punto si può facilmente provare che

$$(g, \mathcal{L}f) = \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} M_2 f_1 \left(\frac{g'_1}{M'_1} + \frac{g'_2}{M'_2} - \frac{g_1}{M_1} - \frac{g_2}{M_2} \right) \\ = \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} f_1 \left(\frac{M_2 g'_1}{M'_1} + \frac{M_2 g'_2}{M'_2} - \frac{M_2 g_1}{M_1} - g_2 \right) \frac{M_1}{M_1} \\ = \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \frac{f_1}{M_1} \left(\frac{M_1 M_2 g'_1}{M'_1} + \frac{M_1 M_2 g'_2}{M'_2} - M_2 g_1 - M_1 g_2 \right) \quad (13.1.23)$$

Poichè risulta

$$M_1 M_2 = M'_1 M'_2 \quad (13.1.24)$$

per la conservazione dell'energia, segue che

$$(g, \mathcal{L}f) = \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_1 dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} \frac{f_1}{M_1} (M'_2 g'_1 + M'_1 g'_2 - M_2 g_1 - M_1 g_2) \\ = (\mathcal{L}g, f) \quad (13.1.25)$$

Proposizione III

$$\mathcal{L}M\psi = 0 \quad (13.1.26)$$

se e solo se la funzione $\psi(x, v; t)$ è un invariante collisionale.

Risulta

$$\mathcal{L}M\psi = \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} (\psi'_2 M'_1 M'_2 + \psi'_1 M'_1 M'_2 - \psi_1 M_1 M_2 - \psi_2 M_1 M_2) = \\ \int_{(v_2-v_1) \cdot \hat{\omega} \geq 0} dv_2 d\omega (v_2 - v_1) \cdot \hat{\omega} M_1 M_2 (\psi'_1 + \psi'_2 - \psi_1 - \psi_2) = 0 \quad (13.1.27)$$

e quindi si annulla se e solo se $\psi(x, v; t)$ è un invariante collisionale.

Osservazione 13.1.1. *La Proposizione III caratterizza completamente il nucleo dell'operatore \mathcal{L} .*

Osservazione 13.1.2. *Le proposizioni I,II,III continuano a valere sostituendo alla maxwelliana globale $M(v)$ una maxwelliana locale $M(x, v; t)$.*

13.2 L'espansione di Hilbert

Nella sezione 1.5 abbiamo provato che le leggi di conservazione associate all'equazione di Boltzmann per sfere rigide si riducono alle equazioni di Eulero nel caso in cui il sistema sia descritto sulla scala cinetica da una maxwelliana locale. Dunque per comprendere quale relazione esista tra le equazioni di Eulero e l'equazione di Boltzmann è necessario stabilire in quali condizioni quest'ultima ammetta come soluzione una tale distribuzione. Poichè una maxwelliana locale in generale non soddisfa l'equazione di Boltzmann, ma l'equazione

$$Q(M, M) = 0 \quad (13.2.1)$$

il problema è in termini matematici quello di stabilire in quale limite formale l'equazione di Boltzmann si riduca alla (13.2.1). Per risolvere questo problema si osserva che le descrizioni cinetica (basata sull'equazione di Boltzmann) e idrodinamica (basata sulle equazioni di Eulero) di un dato sistema si svolgono su scale spazio-temporali nettamente distinte. La scala cinetica possiede una lunghezza tipica dell'ordine del libero cammino medio λ , mentre la lunghezza caratteristica della scala idrodinamica è dell'ordine della dimensione lineare L della regione in cui il sistema è confinato. Realisticamente $\lambda \sim 10^{-4}cm$ mentre $L \sim 1cm$. Si definisce allora il fattore di scala

$$\epsilon := \frac{\lambda}{L} \quad \text{numero di Knudsen} \quad (13.2.2)$$

che permette di collegare le due scale nel modo seguente. Indichiamo con ξ, τ le coordinate spazio-temporali cinetiche, in modo tale che, con notazione diversa da quella utilizzata nelle precedenti sezioni, l'equazione di Boltzmann si scrive nella forma

$$\frac{\partial f}{\partial \tau}(\xi, v; \tau) + v \cdot \frac{\partial f}{\partial \xi} = Q(f, f) \quad (13.2.3)$$

Le coordinate spazio temporali idrodinamiche x, t sono definite dalla relazione

$$\xi = \epsilon^{-1}x \quad \tau = \epsilon^{-1}t \quad (13.2.4)$$

Poichè siamo interessati alla descrizione idrodinamica, studiamo l'equazione di Boltzmann nelle coordinate x, t . Il risultato del riscaldamento (13.2.4) è l'equazione

$$\epsilon \left(\frac{\partial f^\epsilon}{\partial t}(x, v; t) + v \cdot \nabla f^\epsilon \right) = Q(f^\epsilon, f^\epsilon) \quad (13.2.5)$$

dove

$$f^\epsilon(x, v; t) := f(\epsilon^{-1}x, v; \epsilon^{-1}t) \quad (13.2.6)$$

Si riconosce che, formalmente, nel limite $\epsilon \rightarrow 0$ l'equazione (13.2.5) si riduce alla (13.2.1). Del resto il limite $\epsilon \rightarrow 0$ è fortemente singolare, poichè per $\epsilon \rightarrow 0$ la definizione (13.2.6) perde senso. Dunque bisogna eseguire con grande attenzione tale limite.

Ciò costituisce l'obiettivo principale dell'espansione di Hilbert, che ora ci proponiamo di descrivere in dettaglio. Per cominciare dividiamo ambo i membri dell'equazione (13.2.5) per ϵ e scriviamo l'equazione di Boltzmann riscalata nella forma

$$\frac{\partial f^\epsilon}{\partial t}(x, v; t) + v \cdot \nabla f^\epsilon = \frac{1}{\epsilon} Q(f^\epsilon, f^\epsilon) \quad (13.2.7)$$

L'espansione di Hilbert consiste nel cercare una soluzione della (13.2.7) della forma

$$f^\epsilon(x, v; t) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n f_n(x, v; t) \quad (13.2.8)$$

Sostituendo la (13.2.8) nella (13.2.7) si ottiene

$$\begin{aligned} D_t f_0 + \epsilon D_t f_1 + \epsilon^2 D_t f_2 + \dots &= \frac{1}{\epsilon} Q(f_0, f_0) + Q(f_0, f_1) + Q(f_1, f_0) + \epsilon Q(f_1, f_1) + \\ &+ \epsilon Q(f_0, f_2) + \epsilon Q(f_2, f_0) + \dots \end{aligned} \quad (13.2.9)$$

Uguagliando i termini di ugual potenza in ϵ , si ottengono equazioni integro-differenziali per le funzioni f_n . Scriviamo quelle relative agli ordini più bassi:

$$Q(f_0, f_0) = 0 \quad (13.2.10)$$

$$D_t f_0 = Q(f_0, f_1) + Q(f_1, f_0) \quad (13.2.11)$$

$$D_t f_1 = Q(f_0, f_2) + Q(f_2, f_0) + Q(f_1, f_1) \quad (13.2.12)$$

L'equazione (13.2.10) si interpreta riconoscendo che f_0 è una maxwelliana locale. Poniamo dunque

$$f_0(x, v; t) = M(\rho, u, T)(x, v; t) \quad (13.2.13)$$

e poniamoci il problema di determinare i campi ρ, u, T o per lo meno (ciò che si sa fare) le equazioni differenziali per tali campi. Introducendo l'operatore \mathcal{L} relativo alla maxwelliana M , possiamo scrivere l'equazione per la generica f_n nella forma

$$D_t f_n = \mathcal{L} f_{n+1} + S_{n+1} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (13.2.14)$$

dove

$$S_n = \sum_{k=1}^{n-1} Q(f_k, f_{n-k}) \quad n \geq 2, \quad S_n = 0 \quad n = 0, 1 \quad (13.2.15)$$

La teoria degli operatori lineari ci insegna che un'equazione della forma

$$Ax = y \quad (13.2.16)$$

dove A è un operatore lineare, può essere risolta rispetto a x soltanto se y appartiene al sottospazio ortogonale al nucleo di A . Pertanto per risolvere la (13.2.14) dobbiamo imporre la condizione

$$D_t f_n - S_{n+1} \perp Ker(\mathcal{L}) \quad (13.2.17)$$

A tale scopo introduciamo l'insieme degli invarianti collisionali ϕ_α ($\alpha = 0, 1, \dots, 4$) ortonormalizzati rispetto al prodotto scalare (13.1.7) (con maxwelliana data dalla (13.2.13)). Definiamo quindi l'operatore

$$\mathcal{P}\bullet := \sum_{\alpha=0}^4 M\phi_\alpha(\bullet, M\phi_\alpha) \quad (13.2.18)$$

È facile riconoscere in \mathcal{P} il proiettore sul sottospazio ortogonale a $Ker(\mathcal{L})$. Infatti supponiamo $h \in Im(\mathcal{L})$. In tal caso esiste g tale che $\mathcal{L}g = h$. Quindi

$$\mathcal{P}h = \sum_{\alpha=0}^4 M\phi_{\alpha}(\mathcal{L}g, M\phi_{\alpha}) = \sum_{\alpha=0}^4 M\phi_{\alpha}(g, \mathcal{L}M\phi_{\alpha}) = 0 \quad (13.2.19)$$

In particolare l'equazione (13.2.11) ammette soluzione se risulta

$$\mathcal{P}D_tM = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (D_tM, M\phi_{\alpha}) = 0 \quad (13.2.20)$$

cioè se

$$\int_{R^3} dv\phi_{\alpha}D_tM = 0 \quad (13.2.21)$$

La (13.2.21) coincide con le leggi di conservazione calcolate su una distribuzione maxwelliana. Essa pertanto riproduce le equazioni di Eulero. Detta M^* la maxwelliana M con la condizione (13.2.21), la funzione f_1 si ottiene invertendo l'equazione (13.2.11)

$$f_1 = \mathcal{L}^{-1}D_tM^* \quad (13.2.22)$$

Del resto si osservi che la f_1 non è univocamente determinata dalla (13.2.22), in quanto la funzione

$$f_1 = \mathcal{L}^{-1}D_tM^* + \sum_{\alpha=0}^4 c_{\alpha}^{(1)}M\phi_{\alpha} \quad (13.2.23)$$

con coefficienti $c_{\alpha}^{(1)}$ arbitrari è ancora soluzione della (13.2.11). Per determinare i coefficienti $c_{\alpha}^{(1)}$ è necessario studiare l'equazione (13.2.12). Ripetendo lo stesso ragionamento fatto precedentemente si riconosce che tale equazione può essere risolta soltanto imponendo la condizione

$$\mathcal{P}(D_t f_1 - Q(f_1, f_1)) = 0 \quad (13.2.24)$$

Essendo \mathcal{P} un operatore lineare ed essendo $Q(f_1, f_1)$ ortogonale al nucleo di \mathcal{L} , la (13.2.24) si riduce alla condizione

$$\mathcal{P}D_t f_1 = 0 \quad (13.2.25)$$

Questa equazione viene utilizzata per determinare i coefficienti $c_{\alpha}^{(1)}$. Detta f_1^* la funzione f_1 con la condizione (13.2.25), la f_2 si ottiene invertendo l'equazione (13.2.12)

$$f_2 = \mathcal{L}^{-1}(D_t f_1^* - Q(f_1^*, f_1^*)) + \sum_{\alpha=0}^4 c_{\alpha}^{(2)}M\phi_{\alpha} \quad (13.2.26)$$

I coefficienti $c_{\alpha}^{(2)}$ sono a priori arbitrari. Per determinarli si utilizza l'equazione successiva nell'espansione di Hilbert, nello stesso modo visto relativamente agli ordini ϵ^0 ed ϵ^1 . La struttura dell'espansione di Hilbert si ripete identicamente ad ogni passo.

È necessario fare alcune osservazioni

1) Si è visto che la condizione di compatibilità (13.2.21) dà luogo alle equazioni di Eulero, che, come è noto, sono non lineari nei campi ρ, u, T . È possibile verificare che le condizioni di compatibilità relative agli ordini successivi

$$\mathcal{P}D_t f_n = 0 \quad (13.2.27)$$

danno luogo ad equazioni differenziali lineari. Ne segue che, in linea di principio, tutti i coefficienti $c_\alpha^{(n)}$ possono essere determinati risolvendo equazioni lineari.

2) Nel realizzare il programma esposto fino a questo punto si incontrano notevoli difficoltà. Una è legata al fatto che è necessario conoscere l'operatore *non locale* \mathcal{L}^{-1} . Un'altra è legata al fatto che per risolvere tutte le equazioni differenziali incontrate è necessario assegnare delle condizioni al bordo, e questo complica il procedimento di risoluzione. Ancora un'altra difficoltà è legata al fatto che l'equazione di Boltzmann è non lineare e quindi le sue soluzioni in generale non manifestano proprietà di analiticità. Ci si aspetta dunque di incontrare, nel contesto dell'espansione di Hilbert, problemi di convergenza della serie (13.2.8). In effetti attualmente non è noto se e in quale norma tale serie converga. Tutto ciò che si sa dire è che essa esibisce una proprietà di asintoticità, cioè soddisfa una condizione del tipo

$$\|f^\epsilon - \sum_{k=0}^n \epsilon^k f_k\| \sim O(\epsilon^n) \quad (13.2.28)$$

3) A dispetto delle difficoltà esposte la derivazione delle equazioni di Eulero a partire dalla teoria cinetica è ora realizzata. Infatti nel limite $\epsilon \rightarrow 0$, quando le scale cinetica e idrodinamica sono infinitamente separate, l'equazione di Boltzmann in variabili idrodinamiche è soddisfatta da una maxwelliana locale di parametri ρ, u, T soluzioni delle equazioni di Eulero.

13.3 Le equazioni di Navier-Stokes

In numerose circostanze le equazioni di Eulero non possono essere utilizzate per descrivere il comportamento di un fluido reale. Ciò avviene quando la viscosità del fluido - cioè le forze di taglio che si esercitano tra due elementi di fluido adiacenti - non può più essere trascurata. In questo caso avviene uno scambio di impulso e di energia tra le diverse parti del fluido. Inoltre l'azione delle forze di taglio è tale da condurre il fluido verso uno stato di equilibrio, e ciò non avviene in un fluido ideale. Per evidenziare le conseguenze fenomenologiche di questa differenza, basta osservare che, per esempio, la presenza di vortici caratterizza entrambi i tipi di fluido, ma mentre in un fluido ideale, se un vortice esiste al tempo t_0 , esso esiste a qualunque altro tempo, nel caso di un fluido reale il vortice è frenato dalla viscosità fino a sparire completamente. Matematicamente l'inadeguatezza delle equazioni di Eulero nella descrizione di un fluido reale è espressa dal fatto che esse sono invarianti sotto la trasformazione di inversione temporale

$$t \rightarrow -t \quad u \rightarrow -u \quad (13.3.1)$$

e quindi sono equazioni conservative. Il fatto che un fluido reale evolva verso uno stato di equilibrio garantisce che le equazioni differenziali che lo descrivono sono dissipative, cioè non invarianti per inversione temporale. D'altra parte la struttura di queste equazioni non può essere troppo diversa da quella delle equazioni di Eulero (poichè in ogni caso l'oggetto da descrivere è un fluido), cosicchè si può pensare di ricavarle modificando opportunamente queste ultime. A ben guardare gli oggetti matematici che nelle equazioni di Eulero descrivono l'interazione tra le diverse parti del fluido sono il tensore degli sforzi Π_{ij} e il vettore flusso di calore q_i (nullo nel caso del gas di Boltzmann). Per passare ad equazioni dissipative si può dunque provare a modificare tali oggetti.

Consideriamo dapprima il tensore degli sforzi. Se vogliamo che esso descriva uno scambio di impulso, dobbiamo aggiungere ad esso termini che dipendano dalla differenza di velocità tra

i diversi elementi del fluido, ovvero dalle derivate spaziali della velocità nel limite in cui tali elementi sono pensati infinitamente prossimi. Poniamo quindi

$$\Pi'_{ij} := \Pi_{ij} + \sigma_{ij} \quad (13.3.2)$$

dove

$$\sigma_{ij} := -\eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \eta' \delta_{ij} \nabla \cdot u \quad (13.3.3)$$

I coefficienti η, η' sono in generale funzionali di ρ e T e dipendono dal fluido in considerazione. Tuttavia in molti casi possono essere considerati semplici parametri, indipendenti da x e t . Il tensore σ_{ij} è stato costruito in modo tale da essere simmetrico (sotto uno scambio degli indici), semplice (contiene solo derivate del prim'ordine) e completo (contiene tutti i modi possibili di derivare spazialmente la velocità). Talvolta è conveniente utilizzare un tensore σ_{ij} in cui l'oggetto che moltiplica η sia un tensore a traccia nulla. In questo caso si ridefinisce il coefficiente η' in modo tale che

$$\sigma_{ij} := -\eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot u \right) - \eta' \delta_{ij} \nabla \cdot u \quad (13.3.4)$$

Analogamente se vogliamo che il vettore q_i descriva uno scambio di energia tra le diverse parti del fluido, dobbiamo aggiungere ad esso termini che dipendano dalla differenza di temperatura tra i diversi elementi del fluido, ovvero dalle derivate spaziali della temperatura nel limite in cui tali elementi sono pensati infinitamente prossimi. Poniamo quindi

$$q'_i := q_i - k \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (13.3.5)$$

Possiamo così scrivere le equazioni corrette per un fluido reale

$$D_t \rho + \rho \nabla \cdot u = 0 \quad (13.3.6)$$

$$\rho(D_t u) + \nabla P = \eta \Delta u + (\eta + \eta') \nabla(\nabla \cdot u) \quad (13.3.7)$$

$$\rho(D_t T) + \frac{2}{3} P \nabla \cdot u = \frac{2}{3} k \Delta T - \frac{2}{3} \sigma \cdot (\nabla u) \quad (13.3.8)$$

Le equazioni (13.3.6), (13.3.7), (13.3.8) sono dette *equazioni di Navier-Stokes*. I coefficienti η, η', k sono detti complessivamente coefficienti di trasporto. η è detto *primo coefficiente di viscosità*, η' è detto *secondo coefficiente di viscosità* e k è detto *coefficiente di conducibilità termica*.

13.4 L'espansione di Chapmann-Enskog

Rispetto a quanto discusso nelle sezioni 3.2 e 3.3 si pone il problema di stabilire se e in quale misura sia possibile derivare le equazioni di Navier-Stokes a partire dall'equazione di Boltzmann. La risposta a questo problema è negativa, e il motivo è legato al fatto che le equazioni di Navier-Stokes (13.3.6)-(13.3.8) non sono invarianti sotto nessun tipo di riscaldamento spazio temporale. La proprietà di invarianza sotto uno scaling spazio-temporale fa pensare che esista la possibilità di derivare tale equazione da un modello microscopico mediante una procedura limite da eseguire

sulle equazioni del modello microscopico del tipo seguente: si prendono le equazioni del modello microscopico; si effettua su di esse un riscaldamento delle coordinate spazio-temporali dello stesso tipo di quello che lascia le equazioni macroscopiche invarianti; si studiano le soluzioni delle equazioni microscopiche riscalate nel limite in cui il parametro di scala tende a zero e si dimostra che in tale limite si producono le giuste condizioni di validità delle equazioni macroscopiche. Le equazioni di Navier-Stokes non presentano proprietà di invarianza e non è possibile derivarle microscopicamente. In effetti si osserva che a differenza delle equazioni di Eulero, che presentano solo derivate del prim'ordine rispetto al tempo e rispetto alle coordinate spaziali, le equazioni di Navier-Stokes contengono derivate del primo e del second'ordine rispetto alle coordinate spaziali. In particolare i termini di viscosità o contengono derivate seconde, oppure contengono prodotti di due derivate prime rispetto alle coordinate spaziali. La conseguenza di ciò è che se si tenta di eseguire il riscaldamento 13.2.4 sulle equazioni di Navier-Stokes, si ottengono termini di viscosità di ordine ϵ . Ancora per lo stesso oscuro discorso di prima questo significa che il meglio che ci si aspetta di poter fare è derivare dall'equazione di Boltzmann delle equazioni di Navier-Stokes in cui i termini di viscosità sono di ordine ϵ .

La procedura che consente di ottenere questo risultato è nota come espansione di Chapman - Enskog. Lo scopo di questa sezione è descrivere nei dettagli tale procedura. Per cominciare consideriamo l'equazione di Boltzmann riscalata

$$D_t f^\epsilon(x, v; t) = \frac{1}{\epsilon} Q(f^\epsilon, f^\epsilon) \quad (13.4.1)$$

Cerchiamo una soluzione della (13.4.1) della forma

$$f^\epsilon(x, v; t) = M(x, v; t) + \epsilon F(x, v; t) \quad (13.4.2)$$

dove $M(x, v; t)$ è una maxwelliana locale. Detti \mathcal{L} e \mathcal{P} gli operatori relativi alla maxwelliana M , imponiamo sulla (13.4.2) la condizione supplementare

$$\mathcal{P}F = 0 \quad (13.4.3)$$

La proposta (13.4.2) decompone la soluzione dell'equazione di Boltzmann riscalata nella somma di due termini ortogonali: uno, la maxwelliana M , appartenente al nucleo dell'operatore \mathcal{L} ; l'altro, la funzione F , ortogonale ad esso e di ordine ϵ . Sostituendo la (13.4.2) nella (13.4.1) e considerando che $Q(M, M) = 0$, si ottiene

$$D_t(M + \epsilon F) = \mathcal{L}F + \epsilon Q(F, F) \quad (13.4.4)$$

Applicando ad ambo i membri della (13.4.4) gli operatori $(1 - \mathcal{P})$ e \mathcal{P} , si ottengono le proiezioni di tali equazioni rispettivamente sul nucleo di \mathcal{L} e sul sottospazio ad esso ortogonale:

$$(1 - \mathcal{P})(D_t(M + \epsilon F)) = \mathcal{L}F + \epsilon Q(F, F) \quad (13.4.5)$$

$$\mathcal{P}(D_t(M + \epsilon F)) = 0 \quad (13.4.6)$$

Il sistema di equazioni (13.4.5)-(13.4.6) è equivalente all'equazione (13.4.4) ed è conveniente lavorare su di esso. L'espansione di Chapman-Enskog consiste nel cercare di risolvere tale sistema mediante una successione di funzioni $\{f_i^\epsilon\}$ che tenda alla f^ϵ . La successione è costruita nel modo seguente. Definiamo

$$f_i^\epsilon := M_i + \epsilon F_i \quad i \geq 1 \quad , \quad f_0^\epsilon := 0 \quad (13.4.7)$$

dove

$$M_i(x, v; t) := \frac{\rho_i(x; t)}{(2\pi T_i(x; t))^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{(v - u_i(x; t))^2}{2T_i(x; t)}\right) \quad (13.4.8)$$

Detti \mathcal{L}_i e \mathcal{P}_i gli operatori relativi ad M_i , imponiamo che F_i soddisfi la condizione

$$\mathcal{P}_i F_i = 0 \quad (13.4.9)$$

Imponiamo inoltre che le funzioni M_i ed F_i soddisfino le equazioni

$$(1 - \mathcal{P}_i)(D_t(M_i + \epsilon F_{i-1})) = \mathcal{L}_i F_i + \epsilon Q(F_{i-1}, F_{i-1}) \quad (13.4.10)$$

$$\mathcal{P}_i(D_t(M_i + \epsilon F_i)) = 0 \quad (13.4.11)$$

Ammettiamo infine che le successioni $\{\rho_i\}$, $\{u_i\}$, $\{T_i\}$ ed $\{F_i\}$ siano convergenti nel limite $i \rightarrow \infty$. Si riconosce allora che in tale limite le equazioni (13.4.10) e (13.4.11) convergono alle (13.4.5)-(13.4.6) rispettivamente. Dalla convergenza delle equazioni deduciamo quella delle soluzioni:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} f_i^\epsilon = f^\epsilon \quad \text{soluzione dell'eq.ne di Boltzmann riscalata} \quad (13.4.12)$$

Il sistema (13.4.10)-(13.4.11) può essere risolto ricorsivamente. Infatti f_0^ϵ è nota. Supponiamo di conoscere f_{i-1}^ϵ . In linea di principio dalla (13.4.10) possiamo ricavare F_i in funzione di M_i (F_{i-1} è nota). Sostituendo nella (13.4.11) possiamo ricavare M_i e quindi anche F_i .

Prima di proseguire ricordiamo che gli invarianti collisionali ortonormalizzati sono dati da

$$\phi_\alpha = \left\{ \frac{1}{\sqrt{\rho}}, \frac{v - u}{\sqrt{\rho T}}, \frac{(v - u)^2 - 3T}{2T\sqrt{3\rho}} \right\} \quad (13.4.13)$$

e quindi l'equazione (13.4.9) si traduce esplicitamente nelle seguenti condizioni

$$\int_{R^3} dv F_i = 0 \quad (13.4.14)$$

$$\int_{R^3} dv (v - u) F_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \int_{R^3} dv v F_i = 0 \quad (13.4.15)$$

$$\int_{R^3} dv (v - u)^2 F_i = 0 \quad (13.4.16)$$

Consideriamo ora il sistema (13.4.10)-(13.4.11) per $i = 1$:

$$(1 - \mathcal{P}_1)D_t M_1 = \mathcal{L}_1 F_1 \quad (13.4.17)$$

$$\mathcal{P}_1(D_t(M_1 + \epsilon F_1)) = 0 \quad (13.4.18)$$

Dalla (13.4.17) proviamo a ricavare F_1 in funzione dei campi ρ_1, u_1, T_1 che caratterizzano la maxwelliana M_1 . Introduciamo nell'equazione (13.4.18) la F_1 ottenuta e troviamo le equazioni differenziali per tali campi. Poichè come è noto la condizione

$$\mathcal{P}_1 D_t M_1 = 0 \quad (13.4.19)$$

genera le equazioni di Eulero, si riconosce che la (13.4.18) genera equazioni di Eulero corrette all'ordine ϵ . Rimane da verificare che le correzioni, a parte il fattore di scala ϵ , coincidono coi termini di viscosità che compaiono nelle equazioni di Navier-Stokes. Ciò costituisce l'oggetto d'indagine delle prossime righe.

Cominciamo a sviluppare la (13.4.17) osservando che

$$D_t M_1 = \frac{\delta M_1}{\delta u_1} D_t u_1 + \frac{\delta M_1}{\delta T_1} D_t T_1 + \frac{\delta M_1}{\delta \rho_1} D_t \rho_1 \quad (13.4.20)$$

Il calcolo delle derivate funzionali di M_1 dà come risultati

$$\frac{\delta M_1}{\delta u_1} = \frac{v - u_1}{T_1} M_1 \quad \frac{\delta M_1}{\delta T_1} = \frac{M_1}{T_1^2} \left(\frac{(v - u_1)^2}{2} - \frac{3}{2} T_1 \right) \quad \frac{\delta M_1}{\delta \rho_1} = \frac{M_1}{\rho_1} \quad (13.4.21)$$

Poichè risulta

$$\frac{\delta M_1}{\delta \rho_1} D_t \rho_1 = \frac{M_1}{\rho_1} \left(\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho_1 \right) \quad (13.4.22)$$

è facile riconoscere che

$$(1 - \mathcal{P}_1) \left(\frac{\delta M_1}{\delta \rho_1} D_t \rho_1 \right) = 0 \quad (13.4.23)$$

Ciò è dovuto al fatto che nelle parentesi a secondo membro della (13.4.22) compaiono soltanto combinazioni lineari di invarianti collisionali. Per quanto riguarda i termini

$$(1 - \mathcal{P}_1) \left(\frac{\delta M_1}{\delta u_1} D_t u_1 \right) \quad \text{e} \quad (1 - \mathcal{P}_1) \left(\frac{\delta M_1}{\delta T_1} D_t T_1 \right)$$

non effettuiamo esplicitamente i conti, fornendo soltanto i risultati

$$(1 - \mathcal{P}_1) \left(\frac{\delta M_1}{\delta u_1} D_t u_1 \right) = \frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} \frac{M_1}{T_1} \left((v_{1i} - u_{1i})(v_{1j} - u_{1j}) - \frac{(v_1 - u_1)^2}{3} \delta_{ij} \right) \quad (13.4.24)$$

$$(1 - \mathcal{P}_1) \left(\frac{\delta M_1}{\delta T_1} D_t T_1 \right) = \frac{1}{T_1^2} \frac{\partial T_1}{\partial x_i} M_1 \left[(v_{1i} - u_{1i}) \left(\frac{1}{2} (v_1 - u_1)^2 - \frac{5}{2} T_1 \right) \right] \quad (13.4.25)$$

Alla fine possiamo scrivere

$$(1 - \mathcal{P}_1) D_t M_1 = \frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} \frac{M_1}{T_1} B_{ij} + \frac{1}{T_1^2} \frac{\partial T_1}{\partial x_i} M_1 A_i \quad (13.4.26)$$

dove

$$B_{ij} := (v_{1i} - u_{1i})(v_{1j} - u_{1j}) - \frac{(v_1 - u_1)^2}{3} \delta_{ij} \quad (13.4.27)$$

$$A_i := (v_{1i} - u_{1i}) \left(\frac{(v_1 - u_1)^2}{2} - \frac{5}{2} T_1 \right) \quad (13.4.28)$$

Considerando che l'operatore \mathcal{L}_1^{-1} è lineare ed agisce soltanto sulle velocità, possiamo invertire la (13.4.17) e scrivere l'inversa nella forma

$$F_1 = \frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} \frac{1}{T_1} \mathcal{L}_1^{-1}(M_1 B_{ij}) + \frac{1}{T_1^2} \frac{\partial T_1}{\partial x_i} \mathcal{L}_1^{-1}(M_1 A_i) \quad (13.4.29)$$

Argomenti di simmetria suggeriscono che

$$\mathcal{L}_1^{-1}(M_1 B_{ij}) = -B_{ij} \alpha(\rho_1, T_1, v^2) \quad (13.4.30)$$

$$\mathcal{L}_1^{-1}(M_1 A_i) = -A_i \beta(\rho_1, T_1, v^2) \quad (13.4.31)$$

dove α e β sono funzioni semidefinite positive, la cui forma analitica non è nota, e tali che la condizione (13.4.9) sia soddisfatta. Introducendo le (13.4.30)-(13.4.31) nella (13.4.26), si ottiene

$$F_1 = -\frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} \frac{1}{T_1} B_{ij} \alpha - \frac{1}{T_1^2} \frac{\partial T_1}{\partial x_i} A_i \beta \quad (13.4.32)$$

A questo punto siamo in grado di studiare l'equazione (13.4.18). Scrivendo esplicitamente l'operatore \mathcal{P}_1 , si riconosce che le equazioni differenziali che regolano l'evoluzione dei campi ρ_1, u_1, T_1 sono della forma

$$(M_1 \phi_\alpha, D_t(M_1 + \epsilon F_1)) = 0 \quad \alpha = 0, 1, \dots, 4 \quad (13.4.33)$$

Dall'equazione (13.4.33) risulta evidente che le correzioni di ordine ϵ alle equazioni di Eulero provengono dal termine

$$(M_1 \phi_\alpha, D_t F_1) \quad (13.4.34)$$

e quindi vogliamo studiare tale oggetto per i diversi valori assunti da α . Per semplificare i conti successivi introduciamo la notazione

$$\tilde{v}_1 := v - u_1 \quad (13.4.35)$$

Discutiamo per primo il caso $\alpha = 0$. Risulta

$$\begin{aligned} (M_1 \phi_0, D_t F_1) &= \frac{1}{\sqrt{\rho}} \int_{R^3} dv \left(\frac{\partial F_1}{\partial t} + v \cdot \nabla F_1 \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\rho}} \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{R^3} dv F_1 + \frac{\partial}{\partial x_j} \int_{R^3} dv v_j f_1 \right) = 0 \end{aligned} \quad (13.4.36)$$

in virtù delle condizioni (13.4.14)-(13.4.15). Ne segue che l'equazione di continuità rimane invariata. Discutiamo ora il caso $\alpha = i = 1, 2, 3$. Risulta

$$(M_1 \phi_i, D_t F_1) = \frac{1}{\sqrt{\rho T}} \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \left(\frac{\partial F_1}{\partial t} + v \cdot \nabla F_1 \right) \quad (13.4.37)$$

Per il primo termine possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \frac{\partial F_1}{\partial t} &= \int_{R^3} dv \left(\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{v}_{1i} F_1) + F_1 \frac{\partial u_{1i}}{\partial t} \right) = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} F_1 + \frac{\partial u_{1i}}{\partial t} \int_{R^3} dv F_1 = 0 \end{aligned} \quad (13.4.38)$$

ancora in virtù delle condizioni (13.4.14)-(13.4.15). Per il secondo termine possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
\int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} v \cdot \nabla F_1 &= \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} v_j \partial_j F_1 = \int_{R^3} dv \partial_j (\tilde{v}_{1i} v_j F_1) + \\
&+ \int_{R^3} dv v_j F_1 \partial_j u_{1i} = \partial_j \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} v_j F_1 = \\
&= \partial_j \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} F_1
\end{aligned} \tag{13.4.39}$$

dove l'ultima uguaglianza è permessa dalla condizione (13.4.15). Dunque l'equazione di conservazione dell'impulso deve essere corretta mediante l'aggiunta del termine

$$(M_1 \phi_i, D_t F_1) = \frac{1}{\sqrt{\rho T}} \partial_j \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} F_1 \tag{13.4.40}$$

Infine discutiamo il caso $\alpha = 4$. Risulta

$$(M \phi_4, D_t F_1) = \frac{1}{2T\sqrt{3\rho}} \int_{R^3} dv [\tilde{v}_1^2 - 3T] D_t F_1 = \frac{1}{2T\sqrt{3\rho}} \int_{R^3} dv \tilde{v}_1^2 \left(\frac{\partial F_1}{\partial t} + v \cdot \nabla F_1 \right) \tag{13.4.41}$$

Per il primo termine possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
\int_{R^3} dv \tilde{v}_1^2 \frac{\partial F_1}{\partial t} &= \int_{R^3} dv \frac{\partial}{\partial t} (\tilde{v}_1^2 F_1) - \int_{R^3} dv F_1 \frac{\partial}{\partial t} \tilde{v}_1^2 = 2 \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \frac{\partial u_{1i}}{\partial t} F_1 = \\
&= \frac{\partial u_{1i}}{\partial t} \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} F_1 = 0
\end{aligned} \tag{13.4.42}$$

Per il secondo termine possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
\int_{R^3} dv \tilde{v}_1^2 v \cdot \nabla F_1 &= \int_{R^3} dv \tilde{v}_1^2 v_i \partial_i F_1 = \partial_i \int_{R^3} dv \tilde{v}_1^2 v_i F_1 - \int_{R^3} dv v_i F_1 \partial_i \tilde{v}_1^2 = \\
&= \partial_i \int_{R^3} dv \tilde{v}_1^2 \tilde{v}_{1i} F_1 + 2 \int_{R^3} dv v_i \tilde{v}_{1k} (\partial_i u_{1k}) F_1 = \partial_i \int_{R^3} dv \tilde{v}_1^2 \tilde{v}_{1i} F_1 + \\
&+ 2(\partial_i u_{1k}) \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1k} F_1
\end{aligned} \tag{13.4.43}$$

Dunque l'equazione di conservazione dell'energia deve essere corretta mediante l'aggiunta del termine

$$(M_1 \phi_4, D_t F_1) = \frac{1}{2T\sqrt{3\rho}} \left(\partial_i \int_{R^3} dv \tilde{v}_1^2 \tilde{v}_{1i} F_1 + 2(\partial_i u_{1k}) \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1k} F_1 \right) \tag{13.4.44}$$

Ora proviamo a calcolare l'integrale (13.4.40). Utilizzando la 13.4.32 si ottiene

$$\int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} F_1 = -\frac{\partial u_{1l}}{\partial x_k} \frac{1}{T_1} \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} B_{kl} \alpha - \frac{1}{T_1} \frac{\partial T_1}{\partial x_k} \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} A_k \beta \tag{13.4.45}$$

Per l'integrale contenente B_{kl} possiamo utilizzare la definizione 13.4.27 e scrivere

$$\int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} B_{kl} \alpha = \int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} \left(\tilde{v}_{1k} \tilde{v}_{1l} - \frac{\tilde{v}_1^2}{3} \delta_{kl} \right) \alpha \tag{13.4.46}$$

È chiaro che, essendo tale integrale esteso a tutto R^3 , si può *shiftare* la variabile d'integrazione da v a \tilde{v}_1 senza pagar prezzo:

$$\begin{aligned}
\int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} B_{kl} \alpha &= \int_{R^3} d\tilde{v}_1 \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} \left(\tilde{v}_{1k} \tilde{v}_{1l} - \frac{\tilde{v}_1^2}{3} \delta_{kl} \right) \alpha = \\
&= \int_{R^3} d\tilde{v}_1 \alpha \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} \tilde{v}_{1k} \tilde{v}_{1l} - \frac{1}{3} \int_{R^3} d\tilde{v}_1 \alpha \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} \delta_{kl} \tilde{v}_1^2
\end{aligned} \quad (13.4.47)$$

Inoltre si riconosce che, in virtù della semipositività definita di α risulta

$$\int_{R^3} d\tilde{v}_1 \alpha \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} \tilde{v}_{1k} \tilde{v}_{1l} = (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \int_{R^3} d\tilde{v}_1 \alpha \tilde{v}_1^4 \quad (13.4.48)$$

e che

$$\int_{R^3} d\tilde{v}_1 \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} \delta_{kl} \alpha \tilde{v}_1^2 = \delta_{ij} \delta_{kl} \int_{R^3} d\tilde{v}_1 \alpha \tilde{v}_1^4 \quad (13.4.49)$$

Si ponga

$$\bar{\alpha} := \int_{R^3} d\tilde{v}_1 \alpha \tilde{v}_1^4 \quad (13.4.50)$$

Per l'integrale contenente A_k , utilizzando la definizione (13.4.28), possiamo scrivere

$$\int_{R^3} d\tilde{v} \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} A_k \beta = \frac{1}{2} \int_{R^3} d\tilde{v}_1 \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} \tilde{v}_{1k} \tilde{v}_1^2 \beta - \frac{5T_1}{2} \int_{R^3} d\tilde{v}_1 \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} \tilde{v}_{1k} \beta = 0 \quad (13.4.51)$$

in virtù della semipositività definita di β . In definitiva

$$\begin{aligned}
\int_{R^3} dv \tilde{v}_{1i} \tilde{v}_{1j} F_1 &= -\frac{\partial u_{1l}}{\partial x_k} \frac{\bar{\alpha}}{T_1} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \frac{1}{3} \frac{\partial u_{1l}}{\partial x_k} \frac{\bar{\alpha}}{T_1} \delta_{ij} \delta_{kl} = \\
&= -\frac{2\bar{\alpha}}{3T_1} \nabla \cdot u_1 \delta_{ij} - \frac{\bar{\alpha}}{T_1} \left(\frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{1i}}{\partial x_j} \right)
\end{aligned} \quad (13.4.52)$$

Introducendo questo risultato nella (13.4.40) si ottiene

$$(M_1 \phi_i, D_t F_1) = \frac{\bar{\alpha}}{T_1 \sqrt{\rho_1 T_1}} \partial_j \left[-\frac{2}{3} \nabla \cdot u_1 \delta_{ij} - \left(\frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{1i}}{\partial x_j} \right) \right] \quad (13.4.53)$$

Si definiscano i coefficienti

$$\eta := \frac{\bar{\alpha}}{T_1 \sqrt{\rho_1 T_1}} \quad \text{e} \quad \eta' := \frac{2\bar{\alpha}}{3T_1 \sqrt{\rho_1 T_1}} \quad (13.4.54)$$

In tal modo possiamo scrivere la correzione alle equazioni di conservazione dell'impulso nella forma

$$(M_1 \phi_i, D_t F_1) = -\eta \Delta u_{1i} - (\eta + \eta') \nabla_i (\nabla \cdot u_1) \quad (13.4.55)$$

cioè nella forma prevista dalle equazioni di Navier-Stokes.

Analogamente si calcola l'integrale (13.4.44) e si verifica che esso produce le correzioni previste dalla (13.3.8), con un coefficiente di conducibilità pari a

$$k = \int dv \frac{1}{2} v^2 (v - 5T) \mathcal{L}^{-1} \frac{1}{2} v^2 (v - 5T) M(v). \quad (13.4.56)$$

Bisogna osservare che i coefficienti di trasporto η ed η' non sono indipendenti. Questo è dovuto al fatto che la procedura di derivazione discussa non vale in generale, ma per il gas di Boltzmann. Ne segue che i coefficienti (13.4.54)-(13.4.56) si riferiscono a tale sistema fisico.

Si può infine pensare di proseguire l'espansione cercando di ricavare le equazioni differenziali per i campi ρ_i, u_i, T_i per $i > 1$. Le equazioni corrispondenti ad $i = 2$ sono dette equazioni di Burnett, quelle corrispondenti ad $i > 2$ sono dette equazioni di super-Burnett. Le prime contengono derivate seconde e terze rispetto alle coordinate spaziali. Nessuno crede che tali equazioni descrivano correttamente l'idrodinamica dei fluidi reali.

13.5 Equazioni di Navier-Stokes incomprimibili

Consideriamo l'equazione di Boltzmann riscalata secondo lo scaling

$$x \rightarrow \varepsilon^{-1}x, \quad t \rightarrow \varepsilon^{-2}t, \quad u \rightarrow \varepsilon u$$

$$\frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon}v \cdot \nabla f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2}Q(f^\varepsilon, f^\varepsilon)$$

Cerchiamo una soluzione nella forma

$$f^\varepsilon = M + \varepsilon g^\varepsilon, \quad M = \frac{\rho_0}{(2\pi\theta_0)^{3/2}} \exp \frac{|v|^2}{2\theta_0} \quad (13.5.1)$$

con l'assunzione che g^ε tenda ad un limite finito g per ε che tende a zero

$$g^\varepsilon \rightarrow g$$

Sostituendo nell'equazione di Boltzmann riscalata si ha

$$\frac{\partial g^\varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon}v \cdot \nabla g^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2}\mathcal{L}g^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon}Q(g^\varepsilon, g^\varepsilon) \quad (13.5.2)$$

dove

$$\mathcal{L}g^\varepsilon = 2Q^s(M, g^\varepsilon)$$

Le autofunzioni di \mathcal{L} sono gli invarianti di collisione ψ^α moltiplicati per la Maxwelliana M :

$$\mathcal{L}\psi^\alpha M = 0$$

Moltiplicando la (13.5.2) per ε^2 si ha

$$\varepsilon^2 \frac{\partial g^\varepsilon}{\partial t} + \varepsilon v \cdot \nabla g^\varepsilon = 2\mathcal{L}g^\varepsilon + \varepsilon Q(g^\varepsilon, g^\varepsilon) \quad (13.5.3)$$

e poichè esiste il limite $g^\varepsilon \rightarrow g$ si ha nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\mathcal{L}g = 0$$

Quindi g è una combinazione degli invarianti di collisione che scriviamo nella forma

$$g = M(\rho + v \cdot u + \frac{1}{2}(|v|^2 - 3)\theta) \quad (13.5.4)$$

Ricordando la (13.5.1) si vede che ρ, u, θ sono le correzioni di ordine ε alla densità, velocità e temperatura all'ordine zero date da $(\rho_0, 0, \theta_0)$. Per semplicità d'ora in poi poniamo $\rho_0 = 1 = \theta_0$.

Moltiplichiamo scalarmente la (13.5.2) per gli invarianti di collisione $\psi^\alpha, \alpha = 0, \dots, 3$ e poniamo

$$\langle g, h \rangle = \int dvgh$$

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \langle 1, g^\varepsilon \rangle + \nabla \cdot \langle v, g^\varepsilon \rangle = 0 \quad (13.5.5)$$

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \langle v, g^\varepsilon \rangle + \nabla \cdot \langle g^\varepsilon, v \otimes v \rangle = 0 \quad (13.5.6)$$

Nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$ (13.5.5) dà

$$\nabla \cdot \langle v, g \rangle = 0 \quad (13.5.7)$$

e (13.5.6) dà

$$\nabla \cdot \langle g, v \otimes v \rangle = 0 \quad (13.5.8)$$

Usando l'espressione di g (13.5.4) si ha

$$\nabla_j u_i \langle v_i, v_j \rangle = \delta_{ij} \nabla_i u_i \langle 1, v_i^2 \rangle = \frac{\delta_{ij}}{2} \text{div} u = 0$$

$$\nabla_j \langle v_j v_k, [\rho + \frac{1}{2}\theta(|v|^2 - 3)] \rangle = \delta_{jk} \nabla_j [\rho + \theta] = 0$$

Abbiamo usato

$$\langle v_k^2, |v|^2 \rangle = \langle 1, v_k^4 + 2v_k^2 v_j^2 \rangle = 3 + 2$$

Abbiamo così ottenuto le prime due equazioni la condizione di incomprimibilità

$$\text{div} u = 0 \quad (13.5.9)$$

e la condizione di Boussinesq

$$\nabla[\rho + \theta] = 0 \quad (13.5.10)$$

Riscriviamo l'equazione (13.5.6) nella forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle v, g^\varepsilon \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot \langle g^\varepsilon, v \otimes v \rangle = 0 \quad (13.5.11)$$

Questa equazione darà nel limite l'equazione per u .

L'equazione per la temperatura si ottiene moltiplicando scalarmente la (13.5.2) per $\frac{1}{2}(|v|^2 - 5)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \frac{1}{2}(|v|^2 - 5), g^\varepsilon \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot \langle g^\varepsilon, \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v \rangle = 0 \quad (13.5.12)$$

Osserviamo che il primo termine in (13.5.11) diventa nel limite

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle v, g^\varepsilon \rangle \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} u \quad (13.5.13)$$

mentre il primo termine in (13.5.12) diventa nel limite

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \frac{1}{2}(|v|^2 - 5), g^\varepsilon \rangle \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \langle \frac{1}{2}(|v|^2 - 5), [\rho + \theta \frac{1}{2}(|v|^2 - 3)] \rangle = -\frac{1}{2}\rho + \frac{3}{2}\theta$$

La (13.5.10) implica che $\rho = -\theta$ per cui

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \frac{1}{2}(|v|^2 - 5), g^\varepsilon \rangle \rightarrow \frac{5}{2}\theta \quad (13.5.14)$$

Per calcolare i termini divergenti di ordine $\frac{1}{\varepsilon}$ in 13.5.11 e (13.5.12) si usa un trucco. Poniamo

$$A(v) = \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v, \quad B(v) = v \otimes v - \frac{1}{3}|v|^2 I \quad (13.5.15)$$

Per l'autoaggiuntezza di L possiamo scrivere

$$\langle A, g \rangle = \langle \mathcal{L}^{-1}A, \mathcal{L}g \rangle, \quad \langle B, g \rangle = \langle \mathcal{L}^{-1}B, \mathcal{L}g \rangle \quad (13.5.16)$$

Questa identità ci permette di sostituire il termine $\frac{1}{\varepsilon}Lg^\varepsilon$ in (13.5.11) e (13.5.12) usando l'equazione (13.5.2).

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} \langle A, g^\varepsilon \rangle &= \frac{1}{\varepsilon} \langle \mathcal{L}^{-1}A, \mathcal{L}g^\varepsilon \rangle = \varepsilon \langle \mathcal{L}^{-1}A, \partial_t \rho \rangle + \frac{1}{2} \langle \mathcal{L}^{-1}A, v \cdot \nabla g^\varepsilon \rangle \\ &+ \langle \mathcal{L}^{-1}A, Q(g^\varepsilon, g^\varepsilon) \rangle \end{aligned} \quad (13.5.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} \langle B, g^\varepsilon \rangle &= \frac{1}{\varepsilon} \langle \mathcal{L}^{-1}B, \mathcal{L}g^\varepsilon \rangle = \varepsilon \langle \mathcal{L}^{-1}B, \partial_t \rho \rangle + \frac{1}{2} \langle \mathcal{L}^{-1}B, v \cdot \nabla g^\varepsilon \rangle \\ &+ \langle \mathcal{L}^{-1}B, Q(g^\varepsilon, g^\varepsilon) \rangle \end{aligned} \quad (13.5.18)$$

Nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\frac{1}{\varepsilon} \langle A, g \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \langle \mathcal{L}^{-1}A, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}^{-1}A, v \cdot \nabla g \rangle \quad (13.5.19)$$

$$+ \langle \mathcal{L}^{-1}A, Q(g, g) \rangle \quad (13.5.20)$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \langle B, g \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \langle \mathcal{L}^{-1}B, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}^{-1}B, v \cdot \nabla g \rangle \quad (13.5.21)$$

$$+ \langle \mathcal{L}^{-1}B, Q(g, g) \rangle \quad (13.5.22)$$

Usando l'espressione di g si ottiene

$$\langle \mathcal{L}^{-1}A, v \cdot \nabla g \rangle = \langle 1, \mathcal{L}^{-1}A \otimes \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v \rangle \cdot \nabla \theta = -k \nabla \theta \quad (13.5.23)$$

dove k è la conducibilità ed è data da

$$k = - \langle \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v_i, \mathcal{L}^{-1} \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v_i \rangle \quad (13.5.24)$$

Inoltre per la (13.5.4) si ha

$$\langle \mathcal{L}^{-1}B, v \cdot \nabla g \rangle = \langle 1, \mathcal{L}^{-1}B \otimes v \rangle \cdot \nabla u = -\nu \nabla u$$

dove ν è la viscosità ed è data da

$$\nu = - \langle (|v_i v_j - \frac{1}{3}|v|^2 I) \mathcal{L}^{-1}(|v_i v_j - \frac{1}{3}|v|^2 I) \rangle \quad (13.5.25)$$

Nota. I coefficienti di trasporto non dipendono dagli indici i e j . Infatti la funzione che appare nel termine di secondo ordine nell'equazione per la temperatura è

$$\langle \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v_i, \mathcal{L}^{-1}\frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v_j \rangle \quad (13.5.26)$$

Per motivi di simmetria si ha che $\mathcal{L}^{-1}B = -\beta B$ e $\mathcal{L}^{-1}A = -\alpha A$ con α e β funzioni positive di ω e del modulo della velocità relativa.

L'integrale (13.5.26) si riduce quindi a

$$- \langle \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v_i, \beta \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v_j \rangle = -\delta_{ij} \langle \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v_i, \beta \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v_i \rangle$$

e non dipende da i per l'isotropia della Maxwelliana.

Analogamente per la viscosità si ha

$$D_{ijkl} = \langle (|v_i v_j - \frac{1}{3}|v|^2 I) \mathcal{L}^{-1}(|v_l v_k - \frac{1}{3}|v|^2 I) \rangle = - \langle (|v_i v_j - \frac{1}{3}|v|^2 I) \alpha (|v_l v_k - \frac{1}{3}|v|^2 I) \rangle$$

$$= - \langle (|v_i v_j \beta v_l v_k \rangle [\delta_{ij} \delta_{lk} + \delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{lj}] \quad (13.5.27)$$

$$+ \delta_{ij} \delta_{lk} [\langle \frac{1}{3}|v|^2 \beta v_i v_j \rangle + \langle \frac{1}{3}|v|^2 \beta v_l v_k \rangle - \langle \frac{1}{9}|v|^4 \alpha \rangle] \quad (13.5.28)$$

Nell'equazione per la componente j della velocità questo termine appare nella forma

$$\nabla_i (D_{ijkl} \nabla_l u_k)$$

e solo il secondo termine (con il fattore $\delta_{il} \delta_{jk}$) contribuisce come $\nabla_i ((D_{ijij} \nabla_i u_j))$. Infatti in tutti gli altri termini appare la $\text{div } u$ che è zero.

Per ricostruire tutti i termini nell'equazione limite resta solo da calcolare i secondi termini a destra di 13.5.20 e 13.5.22.

Vale la seguente identità

$$Q(g, g) = -\mathcal{L} \frac{g^2}{M} \quad (13.5.29)$$

Infatti, sia $M^\varepsilon = M(\rho + \varepsilon \rho_1, u + \varepsilon u_1, \theta + \varepsilon \theta_1)$. Allora

$$0 = \frac{d^2}{d\varepsilon^2} Q(M^\varepsilon, M^\varepsilon)|_{\varepsilon=0} = Q^s(\frac{g^2}{M}, M) + Q(g, g)$$

Usando la (13.5.29) si ottiene

$$- \langle \mathcal{L}^{-1}A, Q(g, g) \rangle = \langle \mathcal{L}^{-1}A, \mathcal{L} \frac{g^2}{M} \rangle = \langle A, \frac{g^2}{M} \rangle = \frac{5}{2} u \theta$$

$$- \langle \mathcal{L}^{-1}B, Q(g, g) \rangle = \langle \mathcal{L}^{-1}B, \mathcal{L} \frac{g^2}{M} \rangle = \langle B, \frac{g^2}{M} \rangle = 2? u \otimes u - \frac{1}{3} |u|^2 I$$

In conclusione si ha

$$\frac{1}{\varepsilon} \langle B, g \rangle = -\nu \nabla u + (u \otimes u - \frac{1}{3}|u^2|I) \quad (13.5.30)$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \langle A, g \rangle = -k \nabla \theta + \frac{5}{2} u \theta \quad (13.5.31)$$

Riscriviamo la (13.5.11) nella forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle v, g^\varepsilon \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot \langle g^\varepsilon, B \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot \langle g^\varepsilon, \frac{1}{3}|v^2|I \rangle = 0 \quad (13.5.32)$$

Identificando la pressione come

$$\frac{1}{\varepsilon} \langle g^\varepsilon, \frac{1}{3}|v^2|I \rangle = P$$

e sostituendo in (13.5.32) la (13.5.13) e la (13.5.30) si ottiene l'equazione di Navier-Stokes

$$\frac{\partial}{\partial t} u + u \cdot \nabla u + \nabla P = \nabla(\nu \nabla u)$$

Sostituendo in (13.5.12) la (13.5.14) e la (13.5.31) si ottiene l'equazione per la temperatura

$$\frac{\partial}{\partial t} u + u \cdot \nabla \theta = \nabla(k \nabla \theta)$$

Capitolo 14

Dalla Dinamica Newtoniana all'Idrodinamica

14.1 Descrizione microscopica

Nei capitoli precedenti abbiamo esaminato in dettaglio le relazioni esistenti tra la teoria cinetica e l'idrodinamica. Possiamo riassumere brevemente il percorso logico seguito in tale occasione. Assumendo come punto di partenza l'equazione di Boltzmann, abbiamo ricavato le leggi di conservazione ad essa connesse. Tali leggi si presentano a priori in forma di equazioni differenziali non chiuse per i campi ρ, u, T . Abbiamo visto che una distribuzione cinetica di tipo maxwelliano, corrispondente all'assunzione di equilibrio locale, permette di chiudere tali equazioni e che le equazioni chiuse coincidono con quelle di Eulero. Per poter dare significato fisico a tale risultato è stato necessario affrontare due questioni. Abbiamo poi discusso la validità dell'equazione di Boltzmann, dimostrando che tale equazione può essere derivata in modo matematicamente rigoroso a partire da un modello microscopico. Infine abbiamo giustificato l'assunzione di una distribuzione cinetica di tipo maxwelliano dimostrando che tale distribuzione costituisce una soluzione dell'equazione di Boltzmann letta in coordinate idrodinamiche nel limite in cui le scale cinetica ed idrodinamica sono infinitamente separate.

In questo capitolo dimostriamo che le equazioni di Eulero possono essere derivate, senza passare per la scala cinetica, direttamente dalla scala microscopica, cioè a partire dalla descrizione newtoniana. Gli ingredienti per ottenere questo risultato sono sostanzialmente analoghi a quelli richiesti per il passaggio dalla scala cinetica a quella idrodinamica. Il procedimento che seguiremo può essere riassunto brevemente come segue. Assumendo come punto di partenza le equazioni di Newton ricaviamo le leggi di conservazione locali per un sistema di particelle interagenti mediante un potenziale a coppie. Mediando tali equazioni rispetto alla distribuzione di probabilità soluzione dell'equazione di Liouville (2.1.3), si ottengono equazioni differenziali non chiuse per i campi macroscopici ρ, u, e . Tali equazioni si chiudono sotto l'assunzione di equilibrio locale, in questo contesto descritto da una *distribuzione di Liouville* di tipo Gibbsiano. Le equazioni chiuse coincidono con quelle di Eulero.

Tale procedimento, in un certo senso ricopia quello discusso nel passaggio dalla teoria di Boltzmann all'idrodinamica, presentando a sua volta vantaggi e svantaggi rispetto a quest'ultimo. Il vantaggio più evidente è il fatto che non si pone il problema di stabilire la validità delle equazioni di partenza, che in questo caso sono le equazioni di Newton. Del resto si riconosce che nell'assunzione di un equilibrio locale di tipo Gibbsiano l'ipotesi ergodica fa la sua comparsa

nella meccanica statistica del non equilibrio. Inutile sottolineare che i risultati prodotti nella giustificazione di tale ipotesi sono scarsi.

Consideriamo un sistema di N particelle di massa $m = 1$, interagenti mediante un potenziale a coppie V di range finito l in d dimensioni. Supponiamo che il sistema sia confinato in un toro Λ di dimensione lineare L . Definiamo il fattore di scala

$$\epsilon := \frac{l}{L} \quad (14.1.1)$$

Lo stato del sistema è definito sulla scala microscopica assegnando il vettore di stato

$$(q, v) := (q_1, v_1; \dots; q_N, v_N) \quad (q_i, v_i) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \quad (14.1.2)$$

L'evoluzione temporale del sistema è governata dalle equazioni di Newton

$$\frac{dq_i}{d\tau} = v_i \quad , \quad \frac{dv_i}{d\tau} = - \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i}(|q_i - q_j|) \quad i = 1, \dots, N \quad (14.1.3)$$

dove τ è il tempo espresso in coordinate microscopiche. Le coordinate spazio-temporali macroscopiche sono definite ϵ -riscalando quelle microscopiche:

$$x_i := \epsilon q_i \quad t := \epsilon \tau \quad (14.1.4)$$

Assumendo che in coordinate microscopiche $l \sim 1$, ne segue che, ancora in coordinate microscopiche

$$|\Lambda| \sim \epsilon^{-d} \quad (14.1.5)$$

Se vogliamo che il sistema abbia densità unitaria (stiamo descrivendo un fluido), dobbiamo imporre che

$$N \sim [\epsilon^{-d}] \quad [x] := \text{parte intera di } x \quad (14.1.6)$$

Definiamo ora il vettore delle osservabili conservate

$$Z_i^\mu(\{x_i, v_i\}) := \left\{ 1, v_i, \frac{1}{2}(v_i^2 + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} V(|q_i - q_j|)) \right\} \quad i = 1, \dots, N \quad \mu = 0, \dots, d+1 \quad (14.1.7)$$

e quindi

$$Z^\mu(x, \{x_i, v_i\}) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) Z_i^\mu(\{x_i, v_i\}) \quad (14.1.8)$$

I campi Z^μ sono *microscopici* nel senso che dipendono, oltre che dal punto fisico $x \in \mathbf{R}^3$, dal punto rappresentativo del sistema nello spazio delle fasi ad N particelle. Per una corretta interpretazione fisica di tali campi, si consideri una regione $A \subset \Lambda$. Integrando su A rispetto ad x possiamo dire che

$$\int_A dx Z^0(x, \{x_i, v_i\}) \quad (14.1.9)$$

rappresenta la frazione di particelle presenti nella regione A quando il sistema si trova nella configurazione $\{x_i, v_i\}$. Analogamente

$$\int_A dx Z^\alpha(x, \{x_i, v_i\}) = \int_A dx Z^0 \frac{\int_A dx Z^\alpha}{\int_A dx Z^0} \quad \alpha = 1, \dots, d \quad (14.1.10)$$

rappresenta il prodotto della frazione di particelle presenti in A per la velocità media di tali particelle quando il sistema si trova nella configurazione $\{x_i, v_i\}$. Infine

$$\int_A dx Z^{d+1}(x, \{x_i, v_i\}) = \int_A dx Z^0 \frac{\int_A dx Z^{d+1}}{\int_A dx Z^0} \quad (14.1.11)$$

rappresenta il prodotto della frazione di particelle presenti in A per l'energia media di tali particelle quando il sistema si trova nella configurazione $\{x_i, v_i\}$. Nel seguito vogliamo indagare l'evoluzione temporale dei campi Z^μ . A tale scopo supporremo sempre di calcolare la (14.1.8) nel punto $\{x_i(t), v_i(t)\}$ soluzione delle equazioni di Newton al tempo macroscopico t . Inoltre, per non appesantire troppo la notazione, non esprimeremo più la dipendenza di Z^μ dallo stato del sistema, scrivendo soltanto $Z^\mu(x)$. Tale dipendenza deve tuttavia essere tenuta in considerazione.

14.2 Leggi di conservazione locali.

Legge di conservazione della massa

Esaminiamo per prima l'evoluzione temporale del campo

$$Z^0(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) \quad (14.2.1)$$

A tale scopo consideriamo una funzione

$$f: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R} \quad f \in \mathcal{C}^{(\infty)}(\mathbf{R}) \quad (14.2.2)$$

Integrando su Λ il prodotto $Z^0 f$ si ottiene

$$\int_\Lambda dx Z^0(x) f(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (14.2.3)$$

Si derivino ambo i membri della (14.2.3) rispetto al tempo macroscopico t . Per il primo membro possiamo scrivere

$$\frac{d}{dt} \int_\Lambda dx Z^0(x) f(x) = \int_\Lambda dx f(x) \frac{dZ^0}{dt}(x) \quad (14.2.4)$$

Applicando al secondo membro la regola di derivazione delle funzioni composte e la convenzione di Einstein sugli indici *di componente* ripetuti, si ottiene

$$\frac{1}{N} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N f(x_i) = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha}(x_i) \frac{dx_i^\alpha}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha}(x_i) v_i^\alpha \quad (14.2.5)$$

Del resto risulta

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha}(x_i) v_i^\alpha = \int_{\Lambda} dx \frac{\partial f}{\partial x^\alpha}(x) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) v_i^\alpha = \int_{\Lambda} dx \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} Z^\alpha(x) \quad (14.2.6)$$

Integrando per parti la (14.2.6) ed osservando che $\partial\Lambda = \emptyset$, si ottiene

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^0}{dt}(x) = - \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{\partial Z^\alpha}{\partial x^\alpha} \quad (14.2.7)$$

da cui si ricava l'equazione

$$\frac{dZ^0}{dt}(x) = - \frac{\partial Z^\alpha}{\partial x^\alpha}(x) \quad (14.2.8)$$

cioè l'equazione di continuità. Essa, come è noto, esprime la legge di conservazione della massa.

Legge di conservazione dell'impulso

In modo analogo a quanto visto nella sezione precedente, studiamo l'evoluzione temporale del campo

$$Z^\alpha(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) v_i^\alpha \quad \alpha = 1, \dots, d \quad (14.2.9)$$

Integrando Z^α contro f si ottiene

$$\int_{\Lambda} f(x) Z^\alpha(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) v_i^\alpha \quad (14.2.10)$$

Si derivino ambo i membri della (14.2.10) rispetto al tempo macroscopico t . Per il primo membro possiamo scrivere

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda} f(x) Z^\alpha(x) = \int_{\Lambda} f(x) \frac{dZ^\alpha}{dt}(x) \quad (14.2.11)$$

Per il secondo membro possiamo scrivere

$$\frac{1}{N} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N f(x_i) v_i^\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\beta}(x_i) v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \frac{dv_i^\alpha}{dt} \quad (14.2.12)$$

Riscalando il tempo nella (14.1.3) si ottiene

$$\frac{dv_i}{dt} = -\epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i}(|q_i - q_j|) \quad (14.2.13)$$

Sfruttando la (14.2.13) possiamo scrivere

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^\alpha}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\beta}(x_i) v_i^\alpha v_i^\beta - \frac{1}{N} \epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|) \quad (14.2.14)$$

Ora si osservi che vale la seguente proprietà :

$$\sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|) = \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_j) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha}(|q_i - q_j|) = - \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_j) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|) \quad (14.2.15)$$

e dunque

$$\sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} (f(x_j) - f(x_i)) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|) \quad (14.2.16)$$

Sviluppando f in serie di Taylor nel punto x_i , al prim'ordine in ϵ risulta

$$\sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|) = -\frac{\epsilon}{2} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial f}{\partial x_i^\beta}(x_i)(q_j^\beta - q_i^\beta) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha}(|q_i - q_j|) \quad (14.2.17)$$

È chiaro che l'approssimazione al prim'ordine in ϵ diventa corretta nel limite $\epsilon \rightarrow 0$. Infatti l' ϵ prodotta da tale approssimazione compensa l' ϵ^{-1} che compare nella (14.2.14). Il resto della serie produrrebbe termini $\sim O(\epsilon)$ nulli nel limite suddetto. Sostituendo la (14.2.17) nella (14.2.14) si ottiene

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^\alpha}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\beta}(x_i) \left\{ v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_{j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|)(q_j^\beta - q_i^\beta) \right\} \quad (14.2.18)$$

Si definisca

$$W_i^{\alpha\beta} := v_i^\beta v_i^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|)(q_j^\beta - q_i^\beta) \quad (14.2.19)$$

in modo tale che

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^\alpha}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\beta}(x_i) W_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{\Lambda} dx \delta(x - x_i) \frac{\partial f}{\partial x^\beta}(x) W_i^{\alpha\beta} \quad (14.2.20)$$

Definendo il tensore

$$W^{\alpha\beta} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) W_i^{\alpha\beta} \quad (14.2.21)$$

la 14.2.20 si scrive nella forma

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^\alpha}{dt} = \int_{\Lambda} dx \frac{\partial f}{\partial x^\beta} W^{\alpha\beta} = - \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{\partial W^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta} \quad (14.2.22)$$

dove, in ultimo membro, si è eseguita un'integrazione per parti. Dalla 14.2.22 si ricava dunque l'equazione

$$\frac{dZ^\alpha}{dt}(x) = - \frac{\partial W^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta}(x) \quad (14.2.23)$$

cioè la legge di conservazione dell'impulso.

Legge di conservazione dell'energia

Studiamo infine l'evoluzione temporale del campo

$$Z^{d+1}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) \frac{1}{2} \left\{ v_i^2 + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} V(|q_i - q_j|) \right\} \quad (14.2.24)$$

Integrando Z^{d+1} contro f si ottiene

$$\int_{\Lambda} dx f(x) Z^{d+1}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \frac{1}{2} \left\{ v_i^2 + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} V(|q_i - q_j|) \right\} \quad (14.2.25)$$

Derivando ambo i membri della (14.2.25) rispetto al tempo macroscopico t si ottiene

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} v_i^\alpha \frac{1}{2} \left\{ v_i^2 + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} V(|q_i - q_j|) \right\} + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \frac{1}{2} \left\{ 2v_i^\alpha \frac{dv_i^\alpha}{dt} + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \sum_{l=1}^N \frac{\partial V}{\partial x_l^\alpha} (|q_i - q_j|) v_l^\alpha \right\} \end{aligned} \quad (14.2.26)$$

Si ponga

$$M_i := 2v_i^\alpha \frac{dv_i^\alpha}{dt} + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \sum_{l=1}^N \frac{\partial V}{\partial x_l^\alpha} (|q_i - q_j|) v_l^\alpha \quad (14.2.27)$$

e si osservi che della sommatoria su l sopravvivono soltanto i termini corrispondenti ad $l = i, j$. Inoltre sfruttando l'equazione di Newton (14.2.13) si ottiene

$$M_i = -2v_i^\alpha \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) + \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) v_i^\alpha + \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) v_j^\alpha \quad (14.2.28)$$

Il fattore ϵ^{-1} che compare nel primo termine a secondo membro può essere assorbito eseguendo la derivata del potenziale V in coordinate macroscopiche invece che microscopiche. Sfruttando la (14.2.15) per gli ultimi due termini, si trova che

$$M_i = -2v_i^\alpha \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) + \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (v_i^\alpha - v_j^\alpha) \quad (14.2.29)$$

da cui si ricava immediatamente

$$M_i = \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) (v_i^\alpha + v_j^\alpha) \quad (14.2.30)$$

Sfruttando la (14.2.30) e la definizione di Z_i^{d+1} , possiamo scrivere

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} (x_i) v_i^\alpha Z_i^{d+1} +$$

$$+ \frac{1}{N} \epsilon^{-1} \sum_{i=1}^N f(x_i) \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right) \quad (14.2.31)$$

Ancora ripetendo un argomento analogo a quello utilizzato nella (14.2.15), si può dimostrare che

$$\epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right) = -\frac{1}{2} \epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} (f(x_j) - f(x_i)) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) \times \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right) \quad (14.2.32)$$

da cui, con uno sviluppo in serie di Taylor, si ottiene al prim'ordine in ϵ

$$\epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right) = -\frac{1}{2} \epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} (x_j^\alpha - x_i^\alpha) \frac{\partial V}{\partial q_j^\beta} (|q_i - q_j|) \times \left(\frac{v_i^\beta + v_j^\beta}{2} \right) \quad (14.2.33)$$

Introducendo ora la (14.2.33) nella (14.2.31) e riscalandolo opportunamente le variabili si ottiene

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} (x_i) \left\{ v_i^\alpha Z_i^{d+1} - \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \times \left(\frac{v_i^\beta + v_j^\beta}{2} \right) \right\} \quad (14.2.34)$$

Si definisca

$$W_i^{d+1,\alpha} := v_i^\alpha Z_i^{d+1} - \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \left(\frac{v_i^\beta + v_j^\beta}{2} \right) \quad (14.2.35)$$

in modo tale che

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} (x_i) W_i^{d+1,\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{\Lambda} dx \delta(x - x_i) \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} (x) W_i^{d+1,\alpha} \quad (14.2.36)$$

Definendo il tensore

$$W^{d+1,\alpha} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) W_i^{d+1,\alpha} \quad (14.2.37)$$

la (14.2.36) si scrive nella forma

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) = \int_{\Lambda} dx \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} (x) W^{d+1,\alpha} = - \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{\partial W^{d+1,\alpha}}{\partial x^\alpha} \quad (14.2.38)$$

dove, in ultimo membro, si è eseguita un'integrazione per parti. Dalla 14.2.38 si ricava l'equazione

$$\frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) = -\frac{\partial W^{d+1,\alpha}}{\partial x^\alpha} \quad (14.2.39)$$

cioè la legge di conservazione dell'energia.

14.3 Equazioni di Eulero

Nelle sezioni precedenti sono state ricavate le leggi di conservazione locali per i campi microscopici Z^α nella forma

$$\frac{dZ^\beta}{dt}(x) = -\nabla_\alpha W^{\beta,\alpha}$$

$W^{\beta,\alpha}$ sono dette correnti, il primo indice β è l'indice relativo alla quantità conservata e assume valori da 0 a 4. Il secondo indice α è relativo alla coordinata rispetto alla quale si deriva e $\alpha = 1, 2, 3$. Useremo la notazione (14.2.21) per le correnti

$$W^{\beta,\alpha}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) W_i^{\beta,\alpha}$$

Ricordiamo che

$$W_i^{0,\alpha} = v_i^\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3$$

per $\beta = 1, 2, 3$

$$W_i^{\alpha\beta} := v_i^\beta v_i^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_j^\beta - q_i^\beta)$$

$$W_i^{d+1,\alpha} := v_i^\alpha Z_i^{d+1} + \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right)$$

Assunzione di equilibrio locale

Per ottenere le equazioni idrodinamiche si assume che il sistema sulla scala idrodinamica è localmente in equilibrio:

La distribuzione di non equilibrio all'ordine piú basso in ε si riduce alla distribuzione Gibbsiana relativa al potenziale V , con parametri lentamente variabili su scala microscopica.

Misura di Gibbs locale

$$\begin{aligned} \mu_G(q_1, \dots, q_N; v_1, \dots, v_N) &= Q^{-1} \exp - \sum_i \beta(\varepsilon q_i) \{ \log z(\varepsilon q_i) + \frac{1}{2} |v_i - u_i(\varepsilon q_i)|^2 + \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i} U(|q_i - q_j|) \} \\ &= Q^{-1} \exp \sum_i \lambda^\alpha(\varepsilon q_i) Z_i^\alpha \end{aligned}$$

Le equazioni di Eulero si ottengono mediando le leggi di conservazione locale nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$ usando l'assunzione di equilibrio locale. Infatti poichè la misura di Gibbs dipende solo dai campi empirici (e dai suoi parametri coniugati, che sono i campi idrodinamici) le attese

rispetto alla misura di Gibbs saranno espresse in termini di ρ, u, T e le leggi di conservazione diventano delle equazioni chiuse nei campi idrodinamici.

Cominciamo dall'equazione per Z^0 . Indichiamo con $\langle \cdot \rangle_\varepsilon$ l'attesa rispetto alla misura di non-equilibrio e con $\langle \cdot \rangle$ quella di Gibbs locale. Si ha a parte termini di ordine superiore in ε che

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Z^0 \rangle = -\nabla_\alpha \langle Z^\alpha \rangle$$

Osserviamo che $\langle Z^0 \rangle$ è per definizione la densità $\rho(x, t)$ e analogamente si ha che $\langle Z^\alpha \rangle = \rho(x, t)u(x, t)$, l'attesa rispetto alla misura di Gibbs della velocità. Quindi si ottiene l'equazione di continuità

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t}(x) = -\text{div}(\rho(x, t)u(x, t))$$

Consideriamo ora la legge di conservazione per l'impulso e mediamola rispetto alla misura di Gibbs

$$\frac{d \langle Z^\beta \rangle}{dt}(x) = -\nabla_\alpha \langle W^{\beta, \alpha} \rangle \quad (14.3.1)$$

A sinistra si ottiene la derivata temporale di $\rho(x, t)u(x, t)$. Per ottenere il risultato occorre calcolare la media della corrente e per questo si usa il teorema del viriale. Calcoliamo prima la media di $v_i^\alpha v_i^\beta$

$$C_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) v_i^\alpha v_i^\beta \rangle \quad (14.3.2)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) (v_i^\alpha - u^\alpha(x))(v_i^\beta - u^\beta(x)) \rangle + \rho u^\alpha(x) u^\beta(x) \quad (14.3.3)$$

Abbiamo usato $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) \rangle = \rho(x)$

$$C_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \frac{2}{3} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) \frac{|v - u|^2}{2} \rangle + \rho u^\alpha(x) u^\beta(x) = \rho(x) T(x) \delta_{\alpha\beta} + \rho u^\alpha(x) u^\beta(x)$$

Calcoliamo ora la media del secondo termine nella corrente.

$$B_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - \varepsilon q_i) \frac{1}{2} \sum_{j: i \neq j}^{1, N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_j^\beta - q_i^\beta) \rangle$$

Osserviamo che se $\alpha \neq \beta$ usando la simmetria della misura per lo scambio $q_i^\alpha \rightarrow -q_i^\alpha$ la media dà zero perchè la funzione da mediare è antisimmetrica per tale scambio. Analogamente usando la simmetria della misura e l'antisimmetria della funzione sotto lo scambio $q_i^\beta \rightarrow -q_i^\beta$ si ottiene zero. Quindi sopravvivono solo i termini con $\alpha = \beta$.

Teorema del viriale.

Vale la seguente espressione per la pressione termodinamica all'equilibrio termodinamico

$$p = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{P}{N} = T\rho - \frac{1}{2} < \sum_{j \neq i, j=1}^N \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\beta - q_j^\beta) \delta(q_i) > \quad (14.3.4)$$

Per dimostrarlo scriviamo la pressione all'equilibrio come

$$P = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial V}$$

dove Z è la funzione di partizione canonica nel volume V ed N particelle

$$Z(\beta, N, V) = \frac{1}{N!} \int_{(V \times R^3)^N} \underline{dp} \underline{dq} \exp -\beta H(\underline{p}, \underline{q})$$

Scriviamo il volume come $\lambda^3 V_0$. si ha che

$$Z_\lambda = Z(\beta, N, \lambda^3 V_0) = \frac{1}{N!} \int_{(V_0 \times R^3)^N} \underline{dp} \underline{dq} \exp -\beta H\left(\frac{\underline{p}}{\lambda}, \underline{q}\right)$$

da cui

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial V} = \frac{1}{Z} \frac{1}{3V_0} \frac{\partial Z_\lambda}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=1} \\ &= -\frac{1}{3V_0} < \frac{\partial H}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=1} > \\ &= -\frac{1}{3V_0} \frac{1}{2} < -2 \sum_i |v_i|^2 + \sum_{i,j,i \neq j} \sum_\alpha \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\alpha - q_j^\alpha) > \end{aligned}$$

Il fattore V_0 si cancella vincolando una particella a stare nell'origine e si ottiene

$$p = T\rho - \frac{1}{6} < \sum_{j,j \neq i} \delta(q_i) \sum_\alpha \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\alpha - q_j^\alpha) >$$

Abbiamo usato la definizione di temperatura $= \frac{2}{3}$ dell'energia cinetica. Osserviamo infine che il termine $< \delta(q_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\alpha - q_j^\alpha) >$ non dipende dall'indice α e quindi

$$p = T\rho - \frac{1}{2} < \sum_{j,j \neq i} \delta(q_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\alpha - q_j^\alpha) >$$

Ritornando alla legge di conservazione dell'impulso (14.3.1) e usando le espressioni trovate di $C_{\alpha\beta}$ e $B_{\alpha\beta}$ e il teorema del viriale si ottiene l'equazione per il campo di velocità

$$\frac{\partial(\rho u)(x, t)}{\partial t}(x) + \rho u \otimes u + \nabla p = 0 \quad (14.3.5)$$

Infine discutiamo l'equazione per Z^4 .

$$\frac{\partial}{\partial t} < Z^4 > = -\nabla_\alpha < W^{4,\alpha} > \quad (14.3.6)$$

La media che compare a destra è l'energia totale e moltiplicata per la densità ρ . A sinistra compare la media

$$\langle W^{4,\alpha} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \left\langle \delta(x - x_i) \left[v_i^\alpha Z_i^4 - \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \left(\frac{v_i^\beta + v_j^\beta}{2} \right) \right] \right\rangle \quad (14.3.7)$$

Esaminiamo il primo termine

$$\frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) v_i^\alpha Z_i^4 \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) [v_i^\alpha - u^\alpha] Z_i^4 \rangle \quad (14.3.8)$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_i u^\alpha \langle \delta(x - x_i) Z_i^4 \rangle \quad (14.3.9)$$

Il secondo termine in (14.3.9) dà il flusso di energia

$$\frac{1}{N} \sum_i u^\alpha \langle \delta(x - x_i) Z_i^4 \rangle = \rho u^\alpha e(x, t) \quad (14.3.10)$$

Invece per il primo termine si ha ricordando la definizione di Z^4 e il fatto che la media di $v - u$ è zero

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) [v_i^\alpha - u^\alpha] Z_i^4 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) [v_i^\alpha - u^\alpha] |v_i|^2 \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) [v_i^\alpha - u^\alpha] |v^\beta - u^\beta|_i \rangle u^\beta = \delta_{\alpha\beta} u^\alpha T \rho \end{aligned}$$

Infine il secondo termine in (14.3.7) diventa

$$\frac{1}{2} \sum_i \langle \delta(x - x_i) \sum_{j:j \neq i} \frac{\partial V}{\partial q_i^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \frac{u^\beta + u^\beta}{2} \rangle + \quad (14.3.11)$$

$$\frac{1}{2} \sum_i \langle \delta(x - x_i) \sum_{j:j \neq i} \frac{\partial V}{\partial q_i^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \frac{v_i^\beta - u^\beta + v_j^\beta - u^\beta}{2} \rangle \quad (14.3.12)$$

Il secondo termine in (14.3.12) è zero ed il primo dà

$$\delta_{\alpha\beta} u^\alpha (p - \rho T) \quad (14.3.13)$$

La (14.3.6) diventa combinando le (14.3.9)–(14.3.13)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) = -div(\rho e + p) \quad (14.3.14)$$

Bibliografia

- [1] C. Cercignani *The Boltzmann equation and its applications* Springer-Verlag (1988)
- [2] M. Creutz and B. Freedman *A Statistical Approach to Quantum Mechanics* Annals of Physics, **132** 427–463?, (1981).
- [3] R. Esposito and R. Marra *Hydrodynamics as scaling limit of kinetic systems and stochastic particle systems*, Trends in Statistical Physics **3**, Research Trends, (2000).
- [4] R. Esposito *Appunti di Meccanica Razionale*, Aracne (1998)
- [5] G. Gallavotti *Meccanica Statistica*, Quaderni del CNR n.50 (1995)
- [6] J. Glimm and A. Jaffe,
- [7] Quantum Physics. A Functional Integral Point of View. Springer-Verlag (1981)
- [8] F. Guerra, *Gauge Fields on a Lattice. Selected Topics* in "Field Theoretical Methods in particle Physics", W. Ruhl ed., Plenum Publishing Corporation, (1980)
- [9] K. Huang, *Statistical Mechanics* John Wiley & Sons, New York (1963)
- [10] A. I. Khinchin *Mathematical Foundations of Statistical Mechanics* Dover, New York (1949)
- [11] O.E. Lanford III *Entropy and Equilibrium Statistical Mechanics* Lectures Notes in Physics **20**, Springer-Verlag (1971)
- [12] O.E. Lanford III *Time Evolution of Large Classical Systems* Lectures Notes in Physics **35**, Springer-Verlag (1975)
- [13] S.K. Ma *Statistical Mechanics*
- [14] M. Mezard, G. Parisi and M.A. Virasoro *Spin Glass Theory and Beyond* World Scientific Lecture Notes in Physics **9** (1987), World Scientific Publishing
- [15] E. Olivieri *Elementi di Meccanica Statistica* Quaderni del CNR (1993)
- [16] G. Parisi *Statistical Field Theory* Frontiers in Physics, **66**, Addison-Wesley (1988)
- [17] E. Presutti *Lezioni di Meccanica Statistica* Aracne (1995)
- [18] A. Sokal *Monte Carlo methods in Statistical; Mechanics: Foundations and New Algorithms*
- [19] H. Spohn *Large Scale Dynamics of Interacting Particles* Springer-Verlag (1991)
- [20] C.J. Thompson *Mathematical Statistical Mechanics* MacMillan Company, New York (1972)

- [21] J.L.Lebowitz and A.Martin-Lof *On the uniqueness of the equilibrium State for Ising Spin Systems* Commun. Math. Phys. **25**, 276–282 (1972)
- [22] M. Cassandro and G. Jona-Lasinio *Critical Behaviour and Probability Theory* Advances in Physics, 27, 913–941 (1978)?
- [23] J.L. Lebowitz and O. Penrose *Rigorous treatment of the van der Waals-Maxwell theory of the liquid-gas transition* J.Math.Phys. **7**, 98 (1966)