

APPUNTI DI TEORIA DEI SISTEMI A MULTICORPI

ROSSANA MARRA

DIPARTIMENTO DI FISICA, UNIVERSITÀ DI ROMA TOR VERGATA

CONTENTS

1. Catene di Markov a tempo discreto	2
2. Algoritmi Montecarlo	8
2.1. Metropolis	8
2.2. Algoritmo random cluster.	12
3. Random walk	16
4. Catene di Markov a tempo continuo	18
5. Moto Browniano	21
6. Processo di diffusione	24
7. Teoria del moto Browniano	29
7.1. Teoria di Einstein	29
7.2. Teoria di Ornstein-Uhlenbeck	31
7.3. Da Ornstein-Uhlenbeck ad Einstein-Smoluchowski	33
8. Sistemi di particelle interagenti e idrodinamica	36
8.1. Leggi di conservazione locali.	38
8.2. Equazioni di Eulero	42
9. Teoria di Onsager	51
10. Sistemi di particelle interagenti stocastici	54
10.1. Processo di esclusione	54
10.2. Equazione di Burgers	56
11. Dinamica dei Fluidi	61
11.1. Leggi di bilancio	61
11.2. Equazioni idrodinamiche	61
11.3. Fluido incomprimibile.	69
11.4. Teorema di esistenza globale	77
11.5. Equazione di Boussinesq	78
12. Teoria di campo medio	80
12.1. Equazione di Vlasov	82
12.2. Modelli di swarming	86
12.3. Sistema di vortici	88
12.4. Equazione di Vlasov-Fokker-Planck	89
References	91

1. CATENE DI MARKOV A TEMPO DISCRETO

In questa prima parte diamo le principali nozioni sulle catene di Markov a tempo discreto, che sono alla base del comportamento delle evoluzioni stocastiche usate nelle simulazioni numeriche.

Un processo stocastico (sequenza di variabili casuali $x_0, x_1 \dots x_N \dots$ a valori in qualche spazio A) è una catena di Markov se la probabilità condizionata verifica la seguente proprietà per ogni n e ogni insieme $B \subset A$

$$P(x_{n+1} \in B | x_n \dots x_0) = P(x_{n+1} \in B | x_n)$$

o in parole il futuro dipende dal passato solo attraverso il presente. La proprietà di Markov è l'analogo per evoluzioni stocastiche della proprietà delle evoluzioni deterministiche regolate dalle equazioni differenziali.

La probabilità di transizione da x ad B in un passo al tempo discreto n è

$$P_n(A|x) = P(x_{n+1} \in A | x_n = x)$$

La catena è omogenea se tale probabilità non dipende dal tempo n . In tal caso tutte le probabilità congiunte sono calcolate in termini della probabilità di transizione in un passo in un passo e della distribuzione iniziale P_0

$$P(x_0 = \bar{x}^0, x_1 = \bar{x}^1, x_2 = \bar{x}^2, \dots, x_n = \bar{x}^n) = \\ P(x_n = \bar{x}^n | x_{n-1} = \bar{x}^{n-1}) P(x_{n-1} = \bar{x}^{n-1} | x_{n-2} = \bar{x}^{n-2}) \dots P_0(\bar{x}_0)$$

dove abbiamo usato la proprietà di Markov. Per cui anche la distribuzione di probabilità $P_j(\bar{x}^j) := P(x_j = \bar{x}^j)$ viene determinata integrando le distribuzioni congiunte.

Spazio degli stati numerabile

Se lo spazio A degli stati è numerabile, possiamo indicare gli stati con $i \in N$. Nel caso di una catena omogenea con spazio degli stati numerabile indichiamo con P_{ij} la probabilità di passare dallo stato i allo stato j in un passo. Si ha $P_{ij} > 0$, $\sum_j P_{ij} = 1$. Sia $P_{ij}^{(n)}$ la probabilità di passare da i a j in n passi. E' data da

$$P_{ij}^{(n)} = \sum_{j_1 \dots j_{n-1}} P_{ij_1} \dots P_{j_{n-1}j} = P_{ij}^n$$

cioè tale probabilità è data da una convoluzione. Dalla relazione precedente discende che

$$P_{ij}^{n+m} = \sum_k P_{ik}^n P_{kj}^m$$

Questa è la equazione di Chapman-Kolmogorov.

Una catena di questo tipo è quindi determinata dalla matrice P_{ij} .

Misura invariante

Come per le dinamiche deterministiche è rilevante definire la misura sullo spazio delle configurazioni invariante per la dinamica stocastica.

Una misura di probabilità sullo spazio degli stati π_i che associa un numero reale minore o uguale a 1 ad ogni stato i è detta invariante se

$$(\pi P)_j = \sum_i \pi_i P_{ij} = \pi_j; \quad \pi P = \pi$$

Stati comunicanti

Uno stato j è detto accessibile da i se $P_{ij}^{(n)} > 0$ per qualche n . Se i è accessibile da j e viceversa i e j sono detti comunicanti. Una catena di Markov può essere decomposta in classi disgiunte di insiemi comunicanti.

Irriducibilità

Una catena di Markov è detta irriducibile se è costituita da un solo insieme di stati comunicanti.

Il concetto di irriducibilità è rilevante perchè in una catena irriducibile durante l'evoluzione vengono visitati tutti gli stati e non ci sono "trappole", situazioni in cui il processo viaggia in un sottinsieme senza riuscire ad uscirne. E' una nozione analoga a quella di indecomponibilità metrica per i sistemi dinamici astratti.

Ricorrenza

Il concetto di ricorrenza è analogo a quello che compare nel teorema di Poincaré per i sistemi Hamiltoniani.

Sia F_{ii} la probabilità che la catena torni in i (sia in un numero finito che infinito di passi).

Lo stato i è detto ricorrente se $F_{ii} = 1$ e transitorio se $F_{ii} < 1$. Se $F_{ii} < 1$ significa che c'è una probabilità diversa da zero che il sistema non ritorni più in i .

Proposition 1.1. *Se due stati sono comunicanti sono entrambi ricorrenti o entrambi transitori.*

Proposition 1.2. *Se lo stato i è ricorrente la catena torna in i un numero infinito di volte in un tempo infinito, se è transitorio i è visitato solo un numero finito di volte.*

Proposition 1.3. *Sia $G_{ii}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} P_{ii}^k z^k$, con la convenzione $P_{ii}^0 = 1$. Si ha che*

$$G_{ii}(1) = \frac{1}{1 - F_{ii}}$$

Quindi se $G_{ii}(1) < \infty$ lo stato è transitorio altrimenti è ricorrente.

Periodicità

Sia $d(i)$ il più grande divisore di tutti gli n per cui $P_{ii}^n > 0$. Si pone per convenzione $d(i) = \infty$ se $P_{ii}^n = 0$ per ogni n . In una catena irriducibile il periodo non dipende dallo stato.

Un esempio di catena periodica di periodo 2 è il seguente:

Una catena a due stati A, B definita dalle probabilità di transizione $P_{AA} = 0, P_{AB} = 1, P_{BB} = 0, P_{BA} = 1$. Se la catena parte da A (B) ritorna in A (B) dopo due passi. Se uno stato ha periodo d può essere visitato solo dopo un numero di passi multipli del periodo. Quindi si può sempre costruire una catena aperiodica a partire da un aperiodica considerando la catena a tempi multipli del periodo.

Una catena di Markov irriducibile è detta aperiodica se $d = 1$ e periodica di periodo d se $d > 1$.

Proposition 1.4. *Una catena di Markov è irriducibile e aperiodica se e solo se $\forall i, j \exists N_{ij} : P_{ij}^{(n)} > 0 \quad \forall n \geq N_{ij}$.*

Tempo di ritorno

Sia μ_i il tempo medio di ritorno nello stato i . Per una catena omogenea

$$\mu_i = \langle \tau_i \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P(\tau_i = n) n$$

Uno stato i ricorrente è detto nullo se $\mu_i = \infty$ ed ergodico se $\mu_i < \infty$.

Per capire la distinzione, sia n_i^N il numero di ritorni in i nel tempo N , $\frac{n_i^N}{N}$ è la frequenza dell'evento ritorno in i su N prove. μ_i è il tempo speso in media nello stato e quindi è collegato all'inverso della frequenza. La seguente proposizione, che è una proprietà di ergodicità, chiarisce la relazione tra $\frac{n_i^N}{N}$ e $\frac{1}{\mu_i}$

Proposition 1.5. *In una catena irriducibile e aperiodica si ha*

$$\frac{n_i^N}{N} \rightarrow \frac{1}{\mu_i}$$

Osserviamo che se lo stato è transitorio c'è un numero finito di ritorni e quindi anche in tal caso $\mu_i = \infty$.

In conclusione gli unici stati interessanti sono quelli ergodici.

Teoremi ergodici

Theorem 1.6. *In una catena irriducibile, aperiodica ed ergodica si ha*

$$1) \lim_{n \rightarrow \infty} P_{jk}^{(n)} = \pi_k = \frac{1}{\mu_k}, \quad \sum_k \pi_k = 1, \quad \pi \text{ è misura invariante}$$

2) *Se la catena è irriducibile e aperiodica ed esiste una misura invariante π allora gli stati sono ergodici e $\pi_k = \frac{1}{\mu_k}$.*

Se si parte da una distribuzione di probabilità al tempo zero diversa da π , sia u^0 , si ha che

$$\sum_j u_j^0 P_{jk}^{(n)} \rightarrow \sum_j u_j^0 \pi_k = \pi_k$$

perchè $\sum_j u_j^0 = 1$ essendo u^0 una distribuzione di probabilità.

Legge dei grandi numeri

Per una catena irriducibile, ergodica e aperiodica vale la legge dei grandi numeri.

In genere la legge dei grandi numeri significa che la media temporale tende alla media di fase, cioè per una generica osservabile f si ha

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{s=0}^N f(x(s)) = \langle f \rangle_\pi = \sum_k k \pi_k$$

Sia x_k la posizione della catena al tempo k e indichiamo con S lo spazio degli stati della catena. Abbiamo

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^N f(x_k) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^N \sum_{j \in S} f_j \chi(x_k = j)$$

dove $\chi(x_k = j)$ è una funzione che è zero se al tempo k la catena non è nello stato j e 1 altrimenti. Osserviamo che

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^N \chi(x_k = j) = \frac{n_j^N}{N}$$

dove n_j^N è il numero di ritorni in j in un tempo N . Si ha quindi

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^N f(x_k) = \sum_{j \in S} f_j \frac{n_j^N}{N}$$

Ma per i teoremi ergodici $\frac{n_k^N}{N} \rightarrow \frac{1}{\mu_j} = \pi_j$, con $\mu_j \neq \infty$ e quindi

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^N f(x_k) = \sum_j f_j \pi_j = \langle f \rangle_\pi$$

che prova la legge dei grandi numeri.

Reversibilità

Anche per dinamiche stocastiche esiste la proprietà di invarianza per time-reversal. Vediamo come definirla.

In una catena irriducibile, aperiodica ed ergodica definita dalle probabilità di transizione P_{ij} esiste una misura invariante π_k il cui significato è la probabilità di trovare il sistema nello stato k . E' possibile definire una catena con probabilità di transizione q_{ij} tali che

$$q_{ij}^{(n)} = \frac{\pi_j P_{ji}^{(n)}}{\pi_i}$$

Il secondo membro è la probabilità di andare da j ad i in n passi per la probabilità dello stato j diviso la probabilità dello stato i , il cui significato è la probabilità che partendo da i si arrivi in j al tempo $-n$. Per $n = 1$ si ha $q_{ij} = \frac{\pi_j P_{ji}}{\pi_i}$. Infatti, in un passo,

$$P_{ji} = P(x_n = i | x_{n-1} = j) = \frac{P(x_n = i, x_{n-1} = j)}{P(x_{n-1} = j)} = \frac{P(x_n = i, x_{n-1} = j)}{\pi_j}$$

Se moltiplico per π_j e divido per π_i ottengo la probabilità di trovarmi in j condizionata al fatto che al tempo successivo mi trovo in i . Si sta quindi guardando all'indietro nel tempo, ci si chiede la probabilità di un evento nel passato condizionata ad un evento nel presente (invece che probabilità di un evento nel futuro condizionata ad un evento nel presente, come in P_{ij}). E' facile vedere che la catena P e q hanno la stessa misura invariante. Infatti,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} q_{ij}^{(n)} = \frac{\pi_j}{\pi_i} \lim_{n \rightarrow \infty} P_{ji}^{(n)} = \pi_i$$

dove nel limite il tempo scorre dal presente al passato.

Definizione

Se $q_{ij} = P_{ij}$ la catena è detta reversibile rispetto alla misura π . possiamo riscrivere la condizione come

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$$

La condizione precedente è anche nota come bilancio dettagliato.

Proposition 1.7. *Se vale la condizione di bilancio dettagliato allora π è una misura stazionaria.*

Infatti, poichè $\sum_i P_{ji} = 1$

$$(\pi P)_j = \sum_i \pi_i P_{ij} = \sum_i \pi_j P_{ji} = \pi_j$$

Poichè le catene che stiamo considerando sono definite dalla matrice delle probabilità di transizione ad un passo è chiaro che si può usare il linguaggio degli operatori per discutere le proprietà di una catena di Markov con stati numerabili.

Introduciamo uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , lo spazio delle successioni reali $\{u_i\}$ con un naturale prodotto scalare in termini di una misura π sullo spazio degli stati

$$\mathcal{H} = \ell^2(\pi) \equiv \left\{ \{u_i\} : (u, u)_\pi = \sum_i u_i \pi_i u_i < \infty \right\}$$

La matrice di transizione P_{ij} può essere vista come un operatore P su tale spazio.

Proposition 1.8. *La condizione di bilancio dettagliato è equivalente alla proprietà di autoaggiuntezza di P .*

Prova

Per definizione si ha

$$(Pu, v)_\pi = (Pu, \pi v) = (u, P^T(\pi v)) = (\pi u, \frac{1}{\pi} P^T(\pi v)) = (u, P^* v)_\pi$$

quindi autoaggiunto significa $P = P^* = \frac{1}{\pi} P^T \pi$.

Per la condizione di bilancio dettagliato

$$P_{ij}^* = \frac{1}{\pi_i} P_{ji} \pi_j = P_{ij}$$

Se si preferisce avere un operatore autoaggiunto rispetto all'usuale prodotto scalare in ℓ^2 (cioè $\pi = 1$) si può definire un nuovo operatore attraverso la trasformazione dello stato fondamentale

$$M_{ij} = \sqrt{\pi_i} P_{ij} \frac{1}{\sqrt{\pi_j}}$$

e naturalmente M_{ij} è simmetrico. Si vede che $\sqrt{\pi}$ è un autovettore con autovalore 1 di M ,

$$\sum_i \sqrt{\pi_i} M_{ij} = \sum_i \pi_i P_{ij} \frac{1}{\sqrt{\pi_j}} = \frac{\pi_j}{\sqrt{\pi_j}} = \sqrt{\pi_j}$$

M agisce sullo spazio delle successioni u' tali che $(u', u') < \infty$. La successione $\sqrt{\pi_i}$ ha come norma 1: $(\sqrt{\pi_i}, \sqrt{\pi_i}) = \sum_i \pi_i = 1$. Se definiamo $u' = \sqrt{\pi} u$ si ha

$$(u', v') = (u, v)_\pi, \quad (u', Mv') = (u, P, v)_\pi$$

Notare che M_{ij} non può essere interpretato com probabilità di transizione perchè ad es. $M_{ij}^n \rightarrow \sqrt{\pi_i} \sqrt{\pi_j}$ diverso dal suo autovalore $\sqrt{\pi_j}$.

Catene finite

Il caso di una catena con un numero finito di stati è più semplice da trattare e da studiare ed è inoltre il caso delle simulazioni numeriche, in cui il numero di stati (configurazioni del sistema) è finito perchè si lavora su un volume finito. Vale il seguente

Theorem 1.9. *In una catena finita (irriducibile) gli stati sono tutti ricorrenti ed ergodici.*

Poichè la matrice M è simmetrica e con elementi non negativi l'autovalore massimo è non degenero per il teorema di Perron-Frobenius e vedremo dopo che 1 è l'autovalore massimo.

Correlazioni temporali

Le funzioni di correlazione temporali sono definite da, $s > s'$

$$\langle x(s)x(s') \rangle = \sum_{kk'} kk' P(x(s) = k | x(s') = k') P(x(s') = k')$$

per una catena omogenea

$$\langle x(s)x(0) \rangle = \sum_{kk'} kk' P_{k'k}^{(s)} \pi_{k'}$$

Poichè la catena è ergodica si ha la proprietà di decadimento

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \langle x(s)x(0) \rangle = \sum_{kk'} kk' \pi_k \pi_{k'} = \langle x(0) \rangle \langle x(s) \rangle = \langle x(0) \rangle^2$$

CLT-Teorema del limite centrale

Sia ψ^ℓ una base di autovettori di M corrispondenti agli autovalori λ_ℓ . Per il teorema spettrale

$$M_{ik} = \sum_m \lambda_m \psi_i^{(m)} \psi_k^{(m)}; \quad \psi_i^{(m)} = (e_i, \psi^{(m)})$$

essendo M_{ik} riferita alla base e_i . Inoltre poichè $\sqrt{\pi}$ è autofunzione corrispondente all'autovalore 1 e per la proprietà ergodica della catena P è vero che $\lim_{n \rightarrow \infty} M_{ik}^n = \sqrt{\pi_i} \sqrt{\pi_k}$ si ha

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [\sqrt{\pi_i} \sqrt{\pi_k} + \sum_{m=2} \lambda_m^n \psi_i^{(m)} \psi_k^{(m)}] = \sqrt{\pi_i} \sqrt{\pi_k}$$

cioè

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{m=2} \lambda_m^n \psi_i^{(m)} \psi_k^{(m)} = 0$$

il che implica che tutti gli autovalori $\lambda_m, m \neq 1$ sono minori di 1. Sia λ_2 l'autovalore più vicino a 1 in modulo. Si ha che

$$P_{ik}^{(n)} = \pi_k + \lambda_2^n \psi_i^{(2)} \psi_k^{(2)} \frac{\sqrt{\pi_k}}{\sqrt{\pi_i}} + O(1)$$

D'altro canto sappiamo che $\lim_{n \rightarrow \infty} P_{ik}^{(n)} = \pi_k$ e quindi tutti gli altri termini della somma spettrale tendono a zero con il secondo termine dominante. Sia $\tilde{x}(s) = x(s) - \langle x(s) \rangle$. Dalle relazioni precedenti risulta che per grandi n

$$\langle \tilde{x}(s)\tilde{x}(0) \rangle \sim C \lambda_2^s := e^{-s|\log \lambda_2|}$$

e quindi decade a zero esponenzialmente. Poichè la varianza della quantità $\frac{1}{N} \sum_{s=0}^N x(s)$ è data da

$$\frac{1}{N^2} \sum_{t=0}^N \sum_{s'=0}^{N-t} \langle \tilde{x}(t)\tilde{x}(0) \rangle \sim \frac{1}{N^2} \sum_{t=0}^N (N-t) \langle \tilde{x}(t)\tilde{x}(0) \rangle \sim \frac{1}{N} \sum_{t=0}^N \langle \tilde{x}(t)\tilde{x}(0) \rangle$$

e la correlazione decade esponenzialmente la varianza è finita e vale il teorema del limite centrale.

Referenze Per questa parte possibili referenze sono [3] e [9].

2. ALGORITMI MONTECARLO

Gli algoritmi Montecarlo per sistemi di spin sono essenzialmente delle dinamiche stocastiche costruite in modo tale che la loro misura invariante coincida con la misura di Gibbs. L'obiettivo è quello di simulare numericamente le configurazioni dello stato di equilibrio di un sistema di spin. Poichè il numero di configurazioni che si possono generare al computer è finito il processo stocastico ha un numero finito di stati. Inoltre anche il tempo è discreto. Quindi queste dinamiche stocastiche sono catene di Markov a numero finito di stati. L'idea è quella di calcolare le medie di osservabili sulla base della proprietà ergodica di tali catene: le medie spaziali sono ottenute come medie temporali. Invertendo l'approccio che ha portato alla formulazione della Meccanica Statistica di equilibrio: invece di calcolare le medie temporali (corrispondenti al processo sperimentale) si calcolano le medie rispetto alla misura di Gibbs canonica. Scelta una dinamica stocastica, si parte da una configurazione qualunque e si aspetta che il sistema raggiunga l'equilibrio. A questo punto si calcolano le medie temporali sulle configurazioni di equilibrio. Naturalmente queste dinamiche sono fittizie: non hanno in genere niente a che vedere con il comportamento fisico di un sistema di spin fuori dall'equilibrio.

Le dinamiche devono avere precisi requisiti: devono essere ergodiche e per questo si richiede che la catene siano irriducibili. Inoltre devono avere come misura invariante la misura di Gibbs del modello di spins. Un modo per assicurare la stazionarietà è quello di richiedere che sia verificata la condizione di bilancio dettagliato. Un metodo generale per costruire le corrette catene di Markov è quello detto di Metropolis.

2.1. Metropolis. Sia P^0 una matrice irriducibile, detta matrice di proposta. P_{xy}^0 Viene usata per generare una proposta di transizione da uno stato x ad uno stato y . In questo caso gli stati sono le configurazioni di un sistema di spins a volume finito. Questa proposta può essere accettata con probabilità a_{xy} o respinta con probabilità $1 - a_{xy}$. La probabilità totale della transizione è quindi data da

$$P_{xy} = P_{xy}^0 a_{xy}, \quad P_{xx} = 1 - \sum_{y \neq x} P_{xy}^0 a_{xy}$$

La seconda relazione dice che la probabilità di restare nello stato x è data dalla probabilità P_{xx}^0 di avere una transizione proposta più la probabilità che una transizione da x a y sia proposta ma venga poi respinta

$$P_{xx} = P_{xx}^0 + \sum_{y \neq x} P_{xy}^0 (1 - a_{xy})$$

dove abbiamo usato $1 = \sum_y P_{xy}^0 = \sum_{y \neq x} P_{xy}^0 + P_{xx}^0$.

La catena di Markov P così costruita soddisfa il bilancio dettagliato rispetto alla misura π se e solo se

$$\frac{a_{xy}}{a_{yx}} = \frac{\pi_y P_{yx}^0}{\pi_x P_{xy}^0}$$

Infatti la condizione di bilancio dettagliato per questa catena è

$$\pi_x P_{xy}^0 a_{xy} = \pi_y P_{yx}^0 a_{yx}$$

Un modo semplice per costruire una tale catena è il seguente. Si sceglie a come

$$a_{xy} = f\left(\frac{\pi_y P_{yx}^0}{\pi_x P_{xy}^0}\right)$$

con f che verifica

$$\frac{f(z)}{f(1/z)} = z$$

Esempi di tale f sono $f(z) = \min(z, 1)$ o $f(z) = \frac{z}{1+z}$. Se la matrice P^0 è simmetrica allora

$$a_{xy} = f\left(\frac{\pi_y}{\pi_x}\right)$$

Dinamica di Glauber

Descriviamo ora un esempio di dinamica di Metropolis per il modello di Ising. Sia H l'Hamiltoniana di un modello di Ising a prossimi vicini

$$-H = \frac{1}{2} \sum_{(ij)} J \sigma_i \sigma_j.$$

Gli stati della catena sono le configurazioni $\underline{\sigma}$ del modello. La misura invariante $\pi(\underline{\sigma})$ è la misura di Gibbs $\pi(\underline{\sigma}) = \frac{1}{Z} \exp\{-\beta H(\underline{\sigma})\}$.

Come matrice di proposta per la transizione da $\underline{\sigma}$ a $\underline{\sigma}'$ scegliamo la proposta di cambiare il segno dello spin nel sito i

$$P^0(\underline{\sigma} \rightarrow \underline{\sigma}') = \begin{cases} 1, & \sigma'_i = -\sigma_i, \sigma'_j = \sigma_j, j \neq i \\ 0, & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (2.1)$$

Quindi si propone di girare sempre lo spin i con probabilità 1. Per completare l'algoritmo usiamo la probabilità di accettazione di Metropolis con $f(z) = \min(\frac{\pi_{\sigma'}}{\pi_{\sigma}}, 1)$:

$$a_{\sigma\sigma'}^i = \min(e^{-\beta\Delta E}, 1), \quad \Delta E = (E(\sigma') - E(\sigma)) = 2\sigma_i \sum_{|j-i|=1} \sigma_j$$

$$a_{\sigma\sigma'} = \begin{cases} \frac{\pi_{\sigma'}}{\pi_{\sigma}} = e^{-\beta(E(\sigma')-E(\sigma))} < 1 & (E(\sigma') - E(\sigma)) \geq 0 \\ 1 & (E(\sigma') - E(\sigma)) < 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

Quindi se $\sigma_i = +1$ ($\sigma_i = -1$) e la maggioranza dei siti vicini è positiva (negativa) σ_i viene flippato con probabilità $e^{-\beta\Delta E}$. Se $\sigma_i = \pm 1$ ha un segno discorde da quello della maggioranza dei prossimi vicini viene cambiato con probabilità 1. In altri termini, se la proposta diminuisce l'energia, viene sempre accettata, altrimenti viene accettata con probabilità $e^{-\beta\Delta E}$. Precisiamo che cambiare con probabilità α significa in concreto estrarre un numero casuale r uniformemente distribuito nell'intervallo $[0, 1]$ e accettare la proposta se $r \leq \alpha$.

Abbiamo definito la probabilità di transizione P_i relativa alla proposta di flippare il sito i . Gli altri siti si possono cambiare in parallelo o in sequenza, cioè la matrice di transizione relativa al cambio di tutti gli N spin P

$$P = \frac{1}{N} \sum_i P_i, \quad P = P_1 \dots P_N$$

osserviamo che nel secondo caso P non soddisfa il bilancio dettagliato, ma soddisfa la condizione $\pi P = \pi$. Chiaramente in sequenza viene a mancare la reversibilità. La catena di Markov così costruita è irriducibile.

Dinamica di Kawasaki

Questa dinamica è interessante perchè conserva la magnetizzazione. E' un esempio di dinamica con una legge di conservazione, (la vera dinamica di particelle ha più leggi di conservazione).

Si fissa una coppia di siti vicini i, j e la proposta per la transizione da $\underline{\sigma}$ a $\underline{\sigma}'$ è quella di scambiare il segno dello spin tra questi due siti.

$$P_{ij}^0(\underline{\sigma} \rightarrow \underline{\sigma}') = \begin{cases} 1, & \sigma'_i = \sigma_j, \sigma'_k = \sigma_k, k \neq i, j \\ 0, & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (2.3)$$

Poi si costruisce la probabilità di transizione come nel caso della dinamica di Glauber.

Naturalmente questa dinamica non è irriducibile perchè se si parte da una configurazione con una data magnetizzazione empirica $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \sigma_i$ non si può raggiungere un configurazione corrispondente a differente magnetizzazione. Mentre è riducibile ovviamente se ci si restringe allo spazio delle configurazioni a magnetizzazione fissata (analogo alla proprietà di ergodicità richiesta della evoluzione Hamiltoniana sullo spazio delle configurazioni a N particelle ad energia fissata).

Heat bath

Diamo ora un esempio di un algoritmo diverso da quelli di Metropolis.

Consideriamo la probabilità che lo spin in i abbia il valore σ_i condizionata al fatto che gli spin prossimi vicini hanno il valore $\sigma_j, |j - i| = 1$

$$P[\sigma_i | \sigma_j, |j - i| = 1] = C \exp\{\beta \sigma_i \sum_{j, |j-i|=1} \sigma_j\}$$

L'algoritmo Heat bath consiste nell'assegnare un nuovo valore σ'_i allo spin in i , indipendentemente dal vecchio valore σ_i con probabilità data dalla precedente probabilità condizionale.

Questo algoritmo può essere definito anche per modelli più complessi del modello di Ising, ma nel caso del modello di Ising è equivalente al metodo Metropolis con matrice di accettazione data sulla base di $f(z) = \frac{z}{1+z}$. Infatti, consideriamo la dinamica di Glauber con

$$a_{xy} = f\left(\frac{\pi_y}{\pi_x}\right), f(z) = \frac{z}{1+z}.$$

Possiamo scrivere

$$a_{\sigma\sigma'} = \frac{e^{2\beta\sigma_i \sum_j \sigma_j}}{e^{2\beta\sigma_i \sum_j \sigma_j} + 1} = \frac{e^{\beta\sigma_i \sum_j \sigma_j}}{e^{\beta\sigma_i \sum_j \sigma_j} + e^{-\beta\sigma_i \sum_j \sigma_j}}$$

l'ultima espressione è esattamente la probabilità condizionale di cui sopra.

Efficienza di un algoritmo

Per testare l'efficienza di un algoritmo ci sono vari parametri. I più importanti sono due

- a) il tempo di rilassamento all'equilibrio, denotato da τ_{exp}
- b) il tempo di autocorrelazione, denotato da τ_{int}

Per quanto riguarda τ_{exp} , per definire τ_{exp} chiamiamo $C_{ff}(t)$ la funzione di correlazione temporale relativa ad una osservabile f

$$\langle f(x(s))f(x(s+t)) \rangle - \langle f \rangle^2 = \sum_{xy} f(x)[\pi_x P_{xy}^t - \pi_x \pi_y] f(y), \quad \langle f \rangle = \sum_x \pi_x f(x)$$

e la funzione di correlazione temporale normalizzata

$$\rho_{ff}(t) = \frac{C_{ff}(t)}{C_{ff}(0)}$$

Il tempo di autocorrelazione esponenziale

$$\tau_{exp}^{(f)} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{\log \rho_{ff}(t)}, \quad \tau_{exp} = \sup_f \tau_{exp}^{(f)}$$

cioè τ_{exp} è il tempo di rilassamento all'equilibrio del modo più lento del sistema. Come abbiamo visto prima per catene finite τ_{exp} è legato al primo autovalore staccato da 1 per l'operatore P .

Una catena di Markov parte da uno stato iniziale che è diverso dalla misura invariante (che non si conosce esplicitamente), per esempio tutti gli spin positivi, e bisogna aspettare un certo tempo affinché il sistema rilassi all'equilibrio e l'algoritmo cominci a generare configurazioni distribuite secondo la misura invariante. Solo dopo questo tempo si possono calcolare le medie di osservabili come medie temporali. La proprietà ergodica della catena assicura che si raggiunga l'equilibrio per $t \rightarrow \infty$ ma serve sapere quanto velocemente (rate di convergenza). Per una catena finita sappiamo che le funzioni di correlazione decadono esponenzialmente nel tempo e si può avere una stima teorica di τ_{exp} , che però non è mai troppo precisa. Quindi c'è comunque un errore sistematico nel risultato delle medie di osservabili. Inoltre ci possono essere fenomeni, a seconda del modello di spin simulato, come la metastabilità che interferiscono fortemente con la simulazione allungando a dismisura il tempo di rilassamento all'equilibrio. Se nel generare le configurazioni si finisce su una configurazione corrispondente ad una regione dello spazio delle configurazioni con una vita media lunga il sistema tende a rimanere vicino a tale configurazione per un lungo tempo.

Quello che è più pericoloso è il tempo di autocorrelazione, τ_{int} . Supponiamo che la catena abbia raggiunto l'equilibrio. Le configurazioni generate sono comunque correlate temporalmente e questo provoca un errore statistico, perchè l'errore che si commette è di ordine $1/\sqrt{N}$ se le configurazioni generate sono indipendenti, per il teorema del limite centrale, ma nel nostro caso l'errore è un fattore $2\tau_{int}$ più grande. Diamo la definizione precisa.

$$\tau_{int}^{(f)} = \frac{1}{2} \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \rho_{ff}(t)$$

Spieghiamo il perchè di questa definizione. Sia $\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_{t=0}^N f(x(t))$ la media empirica, che è rilevante perchè approssima il valor medio di f per grandi N e quindi è la quantità che si vuole calcolare. E' una variabile stocastica la cui varianza è

$$\text{var } \bar{f} = \frac{1}{N^2} \sum_{r,s} C_{ff}(r-s) = \frac{1}{N} \sum_{t=-(N-1)}^{N-1} \left(1 - \frac{|t|}{N}\right) C_{ff}(t) \sim \frac{1}{N} 2\tau_{int}^{(f)} C_{ff}(0),$$

La varianza ci dice che il numero di configurazioni indipendenti generate su un tempo N è dell'ordine di $\frac{N}{2\tau_{int}^{(f)}}$. Se il processo a tempi diversi fosse stato scorrelato temporalmente, non

avremmo avuto il fattore $2\tau_{int}^{(f)}$. Il modo di procedere è dunque aspettare che le configurazioni generate si decorrelino e cioè aspettare un tempo $2\tau_{int}$. Bisogna quindi scartare per calcolare le medie tutte le configurazioni in questi intervalli e questo può allungare molto il tempo macchina. Le barre di errore sono dell'ordine di $\sqrt{\frac{\tau_{int}}{N}}$, se si vuole un'accuratezza dell'1% serve un campione lungo $10000\tau_{int}$. In definitiva l'errore statistico è quello che determina l'efficienza di un algoritmo.

Notare la somiglianza tra τ_{exp} e la lunghezza di correlazione in un sistema di spin (solo che in questo caso si parla di correlazioni temporali) e tra τ_{int} e la suscettività.

Nei casi concreti si vede che τ_{int} diverge al punto critico, grosso modo $\tau_{int} \sim \min(L, \xi)^z$, dove z ha il ruolo di esponente critico dinamico. Si ha così il fenomeno noto come critical slowing-down. E' importante trovare algoritmi che abbiano un basso valore di z . Negli algoritmi locali (ad ogni update si cambia uno spin per volta) come quelli di Metropolis descritti prima si ha $z \sim 2$. L'idea è che l'informazione (uno spin cambiato) viaggia essenzialmente come un random walk sul reticolo. Esistono algoritmi non locali, in cui ad ogni passo si cambiano molti spin, e nella prossima sezione ne viene presentato uno per il modello di Ising, basato sulla rappresentazione di Fortuin-Kasteleyn.

2.2. Algoritmo random cluster. Descriviamo la rappresentazione di Fortuin-Kasteleyn della funzione di partizione del modello di Ising, che ci porta ad un modello di percolazione di legame, detto modello random cluster. Su questa relazione si basa un differente algoritmo numerico per la simulazione del modello di Ising che ha alcuni vantaggi rispetto alle dinamiche metropolis descritte prima.

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

$$\exp\{\beta J_b (\delta_{\sigma_b 1} - 1)\} = (1 - P_b) + P_b \delta_{\sigma_b 1}$$

dove

$$P_b = 1 - \exp(-\beta J)$$

Sostituendo si ottiene

$$Z = \sum_{\sigma} \prod [(1 - P_b) + P_b \delta_{\sigma_b 1}].$$

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 $2^{C(n)}$.

Digressione sui modelli di percolazione

Consideriamo un reticolo Z^d dove ad ogni legame b viene associata una variabile a due valori $n_b = 0, 1$ che ci dice se questo legame è libero oppure occupato. I siti sono distribuiti indipendentemente uno dall'altro. Un legame b è occupato con probabilità $P(n_b = 1) = p$ e non è occupato con probabilità $P(n_b = 0) = 1 - p$

La probabilità di una configurazione in cui su N legami totali ce ne sono k occupati, è data da $p^k (1 - p)^{N-k}$ è, come si vede, una probabilità prodotto.

Quello descritto è un modello di percolazione di legame dove si assegna una probabilità 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 quindi se partendo da un fissato legame, esiste una catena di prossimi legami vicini connessi e pieni. Dalla letteratura è noto che, per avere il fenomeno della percolazione, occorre una ben precisa concentrazione di legami "pieni": quanto appena detto ci dice che, nonostante l'indipendenza, questo particolare modello esibisce un qualche tipo di "comportamento critico". Dato un certo legame l nel reticolo, vediamo quant'è la probabilità che esso appartenga ad un cluster di "occupati"

($\ell \in C$) ed, in particolare, ad un cluster infinito ($\ell \in C_\infty$). Questa probabilità definisce la cosiddetta "probabilità di percolazione":

$$P(\ell \in C_\infty) = P_\infty(\ell)$$

e si ha che:

$$\exists P_c : \begin{cases} P \leq P_c \Rightarrow P_\infty(\ell) = 0 \\ P > P_c \Rightarrow P_\infty(\ell) \neq 0 \end{cases}$$

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

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.

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. 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 ancora nulla.

Tornando al modello random cluster 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 $\delta_{\sigma_b 1} \sigma_i \sigma_j$ 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.

La relazione del modello di Ising col modello random cluster è alla base dell'algoritmo di Swendsen-Wang.

L'idea è di partire dalla distribuzione congiunta di variabili di bond e di spin. La distribuzione marginale ottenuta integrando sulle variabili n è il modello di Ising. La distribuzione marginale ottenuta integrando sulle variabili σ è il modello random cluster.

L'algoritmo parte da una configurazione di spin e genera una di bond data quella di spin (distribuzione condizionata a quella di spin). Indipendentemente per ciascun bond (ij) si pone $n_{ij} = 1$ se $\sigma_i = \sigma_j$ con probabilità P_{ij} e $n_{ij} = 0$ se $\sigma_i \neq \sigma_j$ con probabilità $1 - P_{ij}$.

Poi si genera una nuova configurazione di spin a partire da quella di bond (distribuzione condizionata a quella di bond). Indipendentemente per ciascun cluster connesso si pongono tutti gli spin nel cluster uguali a ± 1 con probabilità $1/2$.

Questo algoritmo genera naturalmente la corretta misura di equilibrio di Gibbs per il sistema di spins, perchè usa la probabilità condizionata. Inoltre è irriducibile.

Si ottiene una radicale riduzione dello critical slowing down con un esponente z vicino allo zero. Per $d = 2$ si ha $z = 0.35$ e per $d = 3$ $z = 0.75$. Una modificazione dell'algoritmo di Swendsen-Wang è dovuta a Wolff, in cui si sceglie a caso un cluster (scegliendo a caso un sito) e si flippa solo quello. In questo modo si cambia di meno la configurazione ma si risparmia tempo macchina. La probabilità di scegliere un cluster è proporzionale alla grandezza del cluster e quindi si girano i cluster grandi. Si ricorda che al punto critico la dimensione media del cluster è infinita perchè $\sum_{ij} \tau_{ij} = \chi$. In varie simulazioni sembra che z è più piccolo con l'algoritmo di Wolff.

Referenze [8].

3. RANDOM WALK

Esaminiamo ora altri esempi di dinamiche stocastiche che sono rilevanti in molte applicazioni fisiche.

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). In generale eventi indipendenti con probabilità p e $1 - p = q$ in ciascuna prova di avere ± 1 .

La probabilità di avere di avere un evento su s lanci e l'evento complementare su $N - s$ è data dalla distribuzione binomiale

$$\binom{N}{s} p^s q^{N-s}$$

Il sistema di Bernoulli si può generalizzare al caso di k uscite: una successione di lanci, ciascuno con k possibili risultati $x_i, i = 1 \dots k$, ognuno con probabilità $p_i, \sum_{i=1}^k p_i = 1$. La probabilità congiunta di avere k_1 risultati x_1, \dots, k_s risultati x_s su N lanci è data dalla distribuzione multinomiale

$$P_N(k_1 \dots k_s) = \frac{N!}{k_1! \dots k_s!} p_1^{k_1} \dots p_s^{k_s}$$

Random walk

Il random walk è un processo stocastico che descrive il moto casuale di una particella: in una dimensione ad ogni istante la particella si muove di un passo 1 a sinistra con probabilità p e a destra con probabilità q ($p + q = 1$). Se $p = q$ il random walk è detto simmetrico. Sia $y_j = \pm 1$ la variabile casuale che assume valore ± 1 con probabilità $1/2$. Le variabili y_j sono una successione di variabili indipendenti ed equidistribuite con media zero e varianza 1. Il random walk è uno schema di Bernoulli a due uscite in ogni prova. La posizione della particella al tempo n , $Y(n)$, è data da $Y(n) = \sum_{j=1}^n y_j$ e può essere vista come una catena di Markov, perchè per conoscere la posizione al tempo N basta conoscere quella al tempo $N - 1$ e la variabile y_N . Notare che le posizioni a tempi diversi non sono indipendenti.

Proprietà di ricorrenza del random walk simmetrico

Il random walk è una catena di Markov irriducibile, quindi tutti gli stati hanno la stessa proprietà di ricorrenza e si può parlare di ricorrenza del random walk. Le sue proprietà di ricorrenza dipendono dalle dimensioni: è ricorrente in $d = 1, 2$ e non ricorrente in $d \geq 3$. Si può dire che "Un uomo ubriaco sempre ritrova la strada di casa mentre un uccello ubriaco può perdersi per sempre".

Per provarlo bisogna esaminare $G_{00}(1) = \sum_{k=0}^{\infty} P_{00}^k$. Esaminiamo prima il caso $d = 1$. Si ricorda che P_{00}^k è la probabilità di ritornare nell'origine dopo k passi. La prima osservazione

è che per tornare nel punto di partenza occorrono necessariamente un numero pari di passi, cioè $P_{00}^{2k+1} = 0, \forall k$. Perchè il punto ritorni nell'origine in $2k$ passi deve avere fatto k passi a sinistra (numero uguale di passi a sinistra e destra). Quindi P_{00}^{2k} è la probabilità di avere fatto k passi a sinistra ed è distribuito in modo binomiale (schema di Bernoulli, probabilità di avere k uscite su $2k$):

$$P_{00}^{2k} = \binom{2k}{k} \frac{1}{2^{2k}}$$

Per decidere sulla convergenza della serie che definisce G_{00} basta esaminare l'andamento asintotico per grandi k .

$$P_{00}^{2k} = \frac{(2k)!}{k!k!} \sim \frac{\sqrt{4\pi k}(2k)^{2k} e^{-2k}}{2\pi k k^k k^k e^{-2k}} \frac{1}{2^{2k}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi k}}$$

La serie risulta quindi divergente. Si può anche usare l'espressione dell'andamento asintotico che vale per la distribuzione binomiale : sia $x = \frac{k-Np}{\sqrt{Npq}}$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2}\right\}$$

Nel caso in esame, in generale anche per $p \neq q$,

$$P^{2s}(s) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{2spq}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{s-2ps}{\sqrt{2spq}}\right)^2\right\}$$

da cui per $p = q$ si ottiene il risultato precedente, invece per $p \neq q$ la serie è convergente per la presenza del fattore esponenziale.

In $d = 2$ il random walk salta con probabilità $\frac{1}{4}$ in uno dei siti adiacenti a distanza 1. Anche in questo caso per tornare nell'origine servono un numero pari di passi : $P_{00}^{2k+1} = 0, \forall k$. In questo caso P_{00}^{2k} si calcola usando la distribuzione multinomiale (schema di Bernoulli con 4 uscite), si usa l'espressione per calcolare la probabilità congiunta su N prove con uscite $\pm x, \pm y$ di avere $k_1(x), k_2(-x), k_1(y), k_2(-y)$

$$P_N(k_1, k_2, k_3, k_4) = \frac{N!}{k_1!k_2!k_3!k_4!} p_1^{k_1} p_2^{k_2} p_3^{k_3} p_4^{k_4}$$

con $\sum_i p_i = 1, k_1 + k_2 + k_3 + k_4 = N$.

Poichè per tornare nell'origine il numero di passi a destra e sinistra in ogni direzione deve essere uguale, dobbiamo considerare la probabilità $P_N(k, k, s-k, s-k)$ ($k_1(x) = k, k_2(-x) = k, k_1(y) = N-k, k_2(-y) = N-k$) e sommare su k , cioè considerare tutti i possibili percorsi che riportano all'origine. Tali percorsi sono eventi indipendenti e quindi si può sommare per avere la probabilità totale. Si ha

$$P_{00}^{2s} = \sum_{k=0}^s P_{2s}(k, k, (s-k), (s-k)) = \frac{(2s)!}{4^{2s}} \sum_{k=0}^s \frac{1}{k!k!(s-k)!(s-k)!}$$

L'andamento asintotico nel caso generale è

$$P_N(k_1, k_2, k_3, k_4) \sim \frac{1}{\sqrt{N^{4-1}} \sqrt{(2\pi)^{4-1}} \sqrt{p_1 p_2 p_3 p_4}} \exp\left\{-\frac{\sum_{i=1}^4 q_i x_i^2}{2}\right\}$$

dove $\sum_i x_i \sqrt{q_i p_i} = 0$ e $x_i = \frac{k_i - N p_i}{\sqrt{N p_i q_i}}$.

Nel caso P_{00}^{2s} l'andamento asintotico per grandi s è

$$P_{00}^{2s} \sim \frac{1}{\sqrt{s^3}} \sum_{k=0}^s \exp\left\{-\frac{(2k-s)^2}{2s}\right\}$$

La somma per s grandi può essere approssimata dall'integrale

$$2 \int_0^s dx \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sqrt{s}}\right)^2\right\} = \sqrt{s} \int_0^s dy \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

L'integrale è finito e il fattore \sqrt{s} cancella uno dei fattori $\frac{1}{\sqrt{s^3}}$ nella somma. L'andamento asintotico è quindi $\sim \frac{1}{s}$ e la serie risulta divergente logicamente.

In $d = 3$ invece il random walk simmetrico salta con probabilità $1/6$ nei prossimi vicini. Applicando la formula per la distribuzione multinomiale si ha

$$P_{00}^{2s} = \frac{1}{6^{2s}} \binom{2s}{s} \sum_{\ell, k} \left(\frac{1}{3^{2s}} \frac{s!}{\ell! k! (s-\ell-k)!}\right)^2$$

Procedendo come prima si ottiene un fattore $\frac{1}{\sqrt{s^5}}$ e due integrali e col cambiamento di variabile negli integrali due fattori \sqrt{s} sono compensati e si ha un andamento $\sim \frac{1}{\sqrt{s^3}}$ ed è sommabile cioè la serie è convergente.

4. CATENE DI MARKOV A TEMPO CONTINUO

Se lo spazio degli stati è discreto ma il tempo è continuo si parla di catene di Markov a tempo continuo. In tal caso le probabilità di transizione dipendono dal tempo $P_{ij}(t)$. Detta P_i^0 la distribuzione iniziale si hanno le relazioni di Kolmogorov

$$P_{ij}(t+s) = \sum_k P_{ik}(t)P_{kj}(s), \quad P_j(t) = \sum_i P_i^0 P_{ij}(t)$$

con la convenzione

$$P_{ij}(0) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (4.1)$$

Sia P_{ij} continua e derivabile rispetto al tempo e sia a_{ij} la probabilità di transizione per unità di tempo

$$a_{ij} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{P_{ij}(\Delta t) - \delta_{ij}}{\Delta t}$$

Dalle relazioni di Kolmogorov

$$P_{ij}(h+t) - P_{ij}(t) = \sum_k P_{ik}(h)P_{kj}(t) - P_{ij}(t) = \sum_k (P_{ik}(h) - \delta_{ik})P_{kj}(t)$$

da cui dividendo per h e passando al limite $h \rightarrow 0$

$$\frac{d}{dt} P_{ij}(t) = \sum_k a_{ik} P_{kj}(t)$$

che è detta l'equazione backward di Kolmogorov. Si ha ancora

$$P_{ij}(h+t) - P_{ij}(t) = \sum_k P_{ik}(t)P_{kj}(h) - P_{ij}(t) = \sum_k P_{ik}(t)(P_{kj}(h) - \delta_{kj})$$

da cui

$$\frac{d}{dt}P_{ij}(t) = \sum_k P_{ik}(t)a_{kj}$$

che è detta l'equazione forward di Kolmogorov. La matrice $A = a_{ij}$ è detta anche generatore infinitesimo della catena di Markov. Le equazioni in termini di generatore si scrivono

$$\frac{d}{dt}P(t) = AP(t), \text{ backward}$$

$$\frac{d}{dt}P(t) = P(t)A, \text{ forward}$$

Si può ottenere l'equazione per la densità (distribuzione al tempo t) $P_j(t)$

$$\frac{d}{dt}P_j(t) = \frac{d}{dt} \sum_{\ell} P_{\ell}^0 P_{\ell j}(t) = \sum_{\ell} P_{\ell}^0 \frac{d}{dt} P_{\ell j}(t) = \sum_{\ell} P_{\ell}^0 \sum_k P_{\ell k}(t)a_{kj} = \sum_k P_k(t)a_{kj}$$

che è l'equazione forward. La distribuzione invariante π è quindi la distribuzione stazionaria corrispondente all'autovettore con autovalore nullo di A . L'equazione forward evolve le misure e quella backward le osservabili. Sia $f(x(t))$ una funzione del processo. L'attesa condizionata al dato iniziale $E[f(x(t))|x(0) = i] = \sum_k f_k P_{ik}(t)$ è soluzione dell'equazione backward

$$\frac{d}{dt}E[f(x(t))|x(0) = i] = \sum_k f_k \frac{d}{dt}P_{ik}(t) = \sum_k f_k \sum_{\ell} P_{i\ell}(t)a_{\ell k} = \sum_{\ell} P_{i\ell}(t) \sum_k f_k a_{\ell k} = E[(Af)(t)|x(0) = i]$$

Processo di Poisson

Come esempio di catena di Markov a tempo continuo definiamo il processo di Poisson. Sia $\xi(t)$ un processo stocastico che conta il numero di eventi nell'intervallo di tempo $[0, t]$. $\xi(t)$ è detto processo di Poisson se

- 1) gli incrementi sono indipendenti nel senso che: $\xi(\Delta_i)$ è indipendente da $(\xi(\Delta_j), i \neq j)$,
- 2) il processo è stazionario: $\xi(t + \Delta)$ dipende solo da (Δ) ,
- 3) la probabilità che 1 evento capiti in Δt è $\lambda \Delta t + o(\Delta t)$.
- 4) la probabilità che capiti più di 1 evento in Δt è $o(\Delta t)$.

$\xi(t)$ è un processo di Markov con stati numerabili, il numero di eventi in un intervallo $[s, t]$ non dipende dagli istanti prima di s perchè gli incrementi sono indipendenti. Sia $P_k(t)$ la probabilità che ci siano k eventi nell'intervallo di tempo $[0, t]$. Possiamo anche interpretarla come la probabilità di transizione da 0 eventi al tempo zero a k eventi al tempo t . Per determinare il generatore usiamo le equazioni di Kolmogorov.

$$P_k(t + \Delta t) = \sum_{j=0}^k P_j(t)P_{k-j}(\Delta t) = P_k(t)P_0(\Delta t) + P_{k-1}(t)P_1(\Delta t) + \sum_{j=0}^{k-2} P_j(t)P_{k-j}(\Delta t)$$

L'ultima somma è $o(\Delta t)$ perchè

$$\sum_{j=0}^{k-2} P_j(t)P_{k-j}(\Delta t) \leq \sum_{s=2}^k P_s(\Delta t) \leq \sum_{s=2}^{\infty} P_s(\Delta t)$$

e l'ultimo termine nella diseuguaglianza rappresenta la probabilità di avere più di un evento nell'intervallo di tempo Δt che è $o(\Delta t)$. Osserviamo che $P_0(\Delta t) = 1 - \lambda \Delta t + o(\Delta t)$ perchè è la probabilità dell'evento complementare a $P_1(\Delta t)$. Quindi sostituendo

$$P_k(t + \Delta t) = P_k(t)(1 - \lambda \Delta t) + P_{k-1}(t)\lambda \Delta t + o(\Delta t)$$

e passando al limite otteniamo l'equazione per la densità è

$$\frac{d}{dt}P_j(t) = \lambda[P_{j-1}(t) - P_j(t)] \quad (4.2)$$

Interpretando $P_j(t)$ come la probabilità di transizione $P_{0j}(t) = P_{ij}(t)$, $k = j - i$ si legge la probabilità di transizione per unità di tempo λ_{ij}

$$\lambda_{ij} = \begin{cases} \lambda, & j = i + 1 \\ 0, & j \neq i, i + 1 \end{cases} \quad (4.3)$$

e $\lambda_{ii} = -\lambda$. L'equazione (4.2) ha come soluzione la distribuzione di Poisson

$$P(\xi(t) = k) = \frac{(\lambda t)^k}{k!} e^{-\lambda t}$$

Il porocesso di Poisson è un esempio di processo di Levy.

Tempo di attesa

Sia τ_n l'istante di arrivo nello stato n . Le differenze $\tau_{n+1} - \tau_n$ sono indipendenti per n diversi ed equidistribuite. Sia τ l'istante di cambiamento da uno stato i dopo l'istante s . Vogliamo trovare la distribuzione di τ , che per quanto detto è indipendente da s .

$$P(\tau > s_1 + s_2 | \xi(s) = i, \tau > s_1) = P(\tau > s_2 | \xi(s) = i), \quad s_1 > s, s_2 > s$$

Per definizione di attesa condizionata

$$P(\tau > s_1 + s_2 | \xi(s) = i, \tau > s_1) = \frac{P(\tau > s_1 + s_2 | \xi(s) = i)}{P(\tau > s_1 | \xi(s) = i)}$$

e usando la relazione precedente si ha

$$P(\tau > s_1 + s_2 | \xi(s) = i) = P(\tau > s_1 | \xi(s) = i) P(\tau > s_2 | \xi(s) = i).$$

Questa relazione caratterizza un esponenziale. Sia $f_i(t) = P(\tau > t | \xi(s) = i)$ per $t > s$. La relazione precedente si scrive

$$f_i(t_1 + t_2) = f_i(t_1) f_i(t_2)$$

o anche, con $f_i(0) = 1$,

$$\log f_i(t_1 + t_2) = \log f_i(t_1) + \log f_i(t_2)$$

Derivando rispetto a t_2

$$\frac{f'_i(t_1 + t_2)}{f_i(t_1 + t_2)} = \frac{f'_i(t_2)}{f_i(t_2)}$$

e in $t_2 = 0$

$$\frac{f'_i(t_1)}{f_i(t_1)} = \frac{f'_i(0)}{f_i(0)} = -\lambda_i$$

L'ultima uguaglianza è giustificata dal fatto che $-\lambda_i = \lambda_{ii}$, il rate di permanenza in i .

In conclusione il tempo di attesa è distribuito esponenzialmente

$$P(\tau > t) = \lambda e^{-\lambda t}$$

da cui il tempo medio di attesa

$$\langle \tau \rangle = \int_0^\infty dt t \lambda e^{-\lambda t} = \frac{1}{\lambda}$$

Il processo di Poisson a volte è usato come "orologio". Data una catena di Markov a tempo discreto K_{ij} si può costruirne una a tempo continuo permettendo al processo di fare

la transizione quando l'orologio di Poisson suona, cioè solo a tempi continui distribuiti esponenzialmente come nel processo di Poisson con intensità λ . Il processo di Poisson e la catena di Markov sono indipendenti. La probabilità di transizione della catena di Markov a tempo continuo è

$$P_{ij}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t)^n}{n!} K_{ij}(n)$$

Il generatore ha la forma $L = \lambda[A - I]$.

Per spiegare la formula precedente sia $x(t) = \hat{x}_{N(t)}$ dove $N(t)$ è il processo di conteggio. si ha

$$P_{ij}(t) = p(x(t) = j | x(0) = i) = P(\hat{x}_{N(t)} = j | \hat{x}_{N(0)} = i) = \sum_{n=0}^{\infty} P(\hat{x}_n = j, N(t) = n | \hat{x}_0 = i) = \sum_{n=0}^{\infty} P(\hat{x}_{N(t)} = j, \hat{x}_{N(0)} = i) P(N(t) = n)$$

L'ultima uguaglianza è vera perchè il processo x_n e $N(t)$ sono indipendenti.

Referenze [3] e [9].

5. MOTO BROWNIANO

Random walk - > moto Browniano

Consideriamo un random walk unidimensionale in cui il punto si muove di $\pm\Delta x$ ad intervalli Δt , a destra e sinistra con uguale probabilità. La posizione al tempo $t = N\Delta t$ è data da $y(t) = \sum_{j=1}^N y_j$ con y_j la variabile casuale a valori $\pm\Delta x$. Le y_j sono variabili casuali indipendenti con media 0 e varianza $\langle y_j^2 \rangle = |\Delta x|^2$. Si ha quindi

$$\langle y(t) \rangle = 0, \quad \langle y(t)^2 \rangle = N(\Delta x)^2 = \frac{t}{\Delta t} (\Delta x)^2 \equiv t\sigma^2.$$

Abbiamo chiamato σ^2 il rapporto $\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}$, che è significativo perchè ci dice che la varianza di $y(1)$ è di questo ordine. Visto come schema di Bernoulli la variabile $\frac{1}{\sqrt{N}}(2S_N^- - N)$ dove S_N^- è il numero di spostamenti $-\Delta x$ in N prove, è distribuita in modo Gaussiano nel limite $N \rightarrow \infty$. Sia S_N^+ il numero di spostamenti $+\Delta x$ in N prove. Si ha $y(t) = (S_N^+ - S_N^-)|\Delta x| = (N - 2S_N^-)|\Delta x|$. Dividiamo per $\sqrt{N} = \sqrt{t}\sigma/|\Delta x|$. La variabile

$$\frac{1}{\sqrt{N}}(N - 2S_N^-) = \frac{y(t)}{|\Delta x|\sqrt{N}} = \frac{y(t)}{\sigma\sqrt{t}}$$

nel limite $\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0$ in modo che σ^2 sia costante per vedere spostamento medio finito ($\Delta x = \frac{1}{N}, \Delta t = \frac{1}{N}$) è distribuita come una Gaussiana

$$P\left\{y' \leq \frac{y(t)}{\sigma\sqrt{t}} \leq y''\right\} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{y'}^{y''} dy e^{-y^2/2}$$

$$P\{y' \leq y(t) \leq y''\} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma t} \int_{y'}^{y''} dy e^{-y^2/(2\sigma^2 t)}$$

Un altro modo di giungere allo stesso risultato è il seguente. Sia $P_k(n)$ la probabilità che al tempo n il random walk asimmetrico sia in k . Possiamo scrivere

$$P_k(n) = P_{k-1}(n-1)p + qP_{k+1}(n-1)$$

Nel caso di spostamenti Δx in un tempo Δt per un rw simmetrico scriviamo

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \frac{1}{2}P(x - \Delta x, t - \Delta t) + \frac{1}{2}P(x + \Delta x, t - \Delta t) = \\ &= -\frac{1}{2}P(x - \Delta x, t) + \frac{1}{2}P(x - \Delta x, t - \Delta t) - \frac{1}{2}P(x + \Delta x, t) + \frac{1}{2}P(x + \Delta x, t - \Delta t) \\ &\quad + \frac{1}{2}P(x - \Delta x, t) + \frac{1}{2}P(x + \Delta x, t) \end{aligned}$$

Scriviamo $P(x, t) = \frac{1}{2}P(x, t) + \frac{1}{2}(P(x, t) + P(x, t))$ e mettiamo insieme con gli ultimi due termini. Inoltre i termini della riga centrale danno divisi per Δt i due rapporti incrementali nel tempo valutati in $x - \Delta x$ e $x + \Delta x$

$$-\frac{1}{2\Delta t}[P(x - \Delta x, t) - P(x - \Delta x, t - \Delta t) + P(x + \Delta x, t) - P(x + \Delta x, t - \Delta t)] \rightarrow -\frac{\partial P}{\partial t}(x, t)$$

dove il limite è per Δt e Δx che tendono a zero. Osserviamo infine che i termini rimasti sono

$$\lim \frac{1}{\Delta t} \left[\frac{1}{2}(P(x, t) - P(x - \Delta x, t)) - \frac{1}{2}(P(x + \Delta x, t) - P(x, t)) \right]$$

e il termine tra parentesi diviso per $|\Delta x|^2$ è il Laplaciano discreto (differenze seconde), da cui

$$= \frac{|\Delta x|^2}{2\Delta t} \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) \right]$$

Osserviamo che il gradiente discreto è dato dal rapporto incrementale

$$\frac{1}{\Delta x} [P(x) - P(x - \Delta x)] = \bar{\nabla} P(x)$$

Per passare alla derivata seconda discreta facciamo il rapporto incrementale della precedente espressione

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\Delta x|^2} [\bar{\nabla} P(x + \Delta x) - \bar{\nabla} P(x)] &= \frac{1}{|\Delta x|^2} [P(x + \Delta x) - P(x)] - [P(x) - P(x - \Delta x)] \\ &= \frac{1}{|\Delta x|^2} [P(x + \Delta x) - 2P(x) + P(x - \Delta x)] \end{aligned}$$

Passando al limite $|\Delta x| \rightarrow 0$ si ottiene $\frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t)$.

Passando al limite per Δt e Δx che tendono a zero in modo che il rapporto $\frac{|\Delta x|^2}{\Delta t}$ tenda a σ^2 si ha l'equazione per $P(x, t)$

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x, t) = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t)$$

che ha come soluzione la distribuzione Gaussiana.

Osservazione Nel caso del random walk asimmetrico si procede come segue:

$$\begin{aligned} P(x, t + \Delta t) - P(x, t) &= pP(x - \Delta x, t) + qP(x + \Delta x, t) - pP(x, t) - qP(x, t) \\ &= -p(P(x, t) - P(x - \Delta x, t)) + q(P(x + \Delta x, t) - P(x, t)) \end{aligned}$$

Scriviamo gli incrementi come

$$\begin{aligned} p(P(x - \Delta x, t) - P(x, t)) &\sim -p\nabla P(x, t)(\Delta x) + \frac{p}{2}\Delta P(x, t)|\Delta x|^2 \\ q(P(x + \Delta x, t) - P(x, t)) &\sim q\nabla P(x, t)(\Delta x) + \frac{q}{2}\Delta P(x, t)|\Delta x|^2 \end{aligned}$$

Dividendo per Δt e passando al limite per Δt e Δx che tendono a zero,

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x, t) = \lim \frac{\Delta x}{\Delta t} (q - p) \nabla P(x, t) + \frac{\sigma^2}{2} \Delta P(x, t)$$

Poichè il limite è fatto tenendo fisso il rapporto $\frac{|\Delta x|^2}{\Delta t}$ il primo termine diverge a meno che non si scelga un RW debolmente asimmetrico in cui $q - p$ è dell'ordine Δx . In tal caso il primo termine darebbe $\sigma^2(p - q) \nabla P(x, t)$.

Abbiamo così costruito un processo a spazio e tempo continui che ha le seguenti caratteristiche.

Poichè nella catena di Markov gli incrementi sono indipendenti lo sono anche nel limite e inoltre il processo è omogeneo per cui l'incremento $y(t') - y(t)$ è distribuito in modo gaussiano

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t' - t)}} e^{-(y' - y)^2 / (2\sigma^2(t' - t))}$$

Il processo $y(t)$ per come costruito parte da 0. Se lo si considera a partire da $x(t)$ la probabilità dell'incremento $y(t') - y(t)$ può essere visto come la probabilità di transizione del processo $P(x(t') = x' | x(t) = x) := P(x't' | xt)$. Il processo $y(t)$ è detto moto browniano. Diamo ora la definizione generale di moto browniano.

Moto Browniano

Un processo stocastico è detto browniano o processo di Wiener se verifica le 3 proprietà

1) è un processo omogeneo nel tempo, cioè la differenza $x(t + t_0) - x(t_0)$ dipende solo da t .
2) gli incrementi sono indipendenti, cioè per ogni n $x(t_n) - x(t_{n-1})$ indipendente da $x(t_{n-1}) - x(t_{n-2})$

3) gli incrementi sono distribuiti come gaussiane di media zero e varianza

$$E[(x(t + t_0) - x(t_0))^2] = \sigma^2 t$$

Il processo di Wiener è determinato dalla media e dalla covarianza

$$r(t, s) = E[(x(t) - \bar{x}), (x(s) - \bar{x})]$$

Le differenze nel processo di Wiener formano un processo gaussiano (un processo stocastico è detto gaussiano se la variabili $x(s)$ sono congiuntamente gaussiane) di media zero e covarianza

$$E[(x(t) - x(s)), (x(t') - x(s'))] = \sigma^2 |[s, t] \cap [s', t']|$$

che è zero se $[s, t] \neq [s', t']$ ed è uguale alla lunghezza del più piccolo intervallo altrimenti. La probabilità di transizione è esplicitamente data da

$$P(x(t') = x' | x(t) = x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \frac{(x' - x)^2}{2\sigma^2(t' - t)}$$

Le funzioni di correlazione si determinano come

$$E[x(t_j)x(t_k)] = E[(x(t_i) - x(0), (x(t_j) - x(0))] = \sigma^2 \min(t_j, t_k)$$

Poichè dalla definizione $E[(\Delta x)^2] \sim \Delta t$ le traiettorie del processo Browniano sono ovunque non differenziabili.

La probabilità di transizione $P(x(t') = x' | x(t) = x) \equiv P(x't', xt)$ è soluzione di una equazione differenziale. Poichè dipende solo dalle differenze scriviamo $P(x't', xt) = P(x' - x, t' - t, 00)$ e

$$\frac{\partial}{\partial s} P(ys, 00) = \frac{1}{2} \sigma^2 \Delta_y P(ys, 00)$$

con la condizione iniziale

$$\lim_{t' \rightarrow t} P(x't', xt) = \delta(x' - x)$$

A volte si denota questa probabilità $\rho(x, t) = P(xt, 00)$. Quindi ρ è soluzione di

$$\frac{\partial}{\partial s} \rho(ys) = \frac{1}{2} \sigma^2 \Delta_y \rho(ys)$$

Si ha anche $\rho(x, t) = \int dx_0 P(xt|x_0t_0) \rho(x_0t_0)$

Nel caso del RW debolmente simmetrico si ottiene invece un processo che si può scrivere formalmente come

$$dx(t) = (q - p)dt + \sigma dw$$

E' un esempio di una classe di processi detti di diffusione.

Referenze [6].

6. PROCESSO DI DIFFUSIONE

In termini del processo Browniano si costruisce un processo di diffusione $x(t)$ con media diversa da zero e proporzionale al tempo t e varianza dello spostamento pari alla varianza del moto browniano. Simbolicamente scriviamo

$$dx(t) = b(x, t)dt + \sigma dw(t)$$

dove $w(t)$ e' un processo di Wiener di varianza 1. Si può dare senso alla precedente formula nel seguente modo: il dato iniziale per il processo $x(t)$, $x(0) = x_0$, è dato indipendentemente dal dato iniziale $w(0) = 0$. Costruiamo il processo al tempo t_1 come

$$x(t_1) = x_0 + b(x_0, 0)t_1 + w(t_1),$$

e poi iterativamente ad ogni tempo

$$x(t_n) = x(t_{n-1}) + b(x(t_{n-1}), t_{n-1})(t_n - t_{n-1}) + w(t_n) - w(t_{n-1})$$

e infine si passa al limite di intervalli temporali continui. Possiamo anche scrivere

$$\int_s^{s'} dw(t) = w(s') - w(s)$$

$$\int_s^{s'} dx(t) = x(s') - x(s) = \int_s^{s'} dt b(x(t), t) + \sigma(w(s') - w(s))$$

Il processo così costruito ha la proprietà di Markov. Infatti poichè i dati iniziali $x(0) = x_0$ e $w(0)$ sono dati indipendentemente si ha che ad un generico istante t anche $x(t)$ e $w(t)$ sono inipendenti. Quindi condizionare al passato del processo $x(t)$, $(x(t), x(t-1) \dots x(0))$ è come condizionare al presente $x(t)$ perchè $x(s+1)$ è determinato solo da $w(s+1) - w(s)$. Si ha che

$$E[x(t)|x(s) = x_s] - x(s) = \int_s^t b(x, \tau) d\tau.$$

Nel caso generale anche σ può dipendere dal processo. Consideriamo solo processi di diffusione omogenei

$$dx(t) = b(x)dt + \sigma dw(t)$$

Generatore

Un processo di Markov omogeneo $x(t)$ è caratterizzato dal suo comportamento infinitesimale. Più precisamente, si definisce il generatore L di $x(t)$ come

$$Lf(x) \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{E[f(x(t))|x(0) = x] - f(x)}{t}$$

Per calcolare il generatore del processo di diffusione partiamo dalla definizione

$$E[f(x(t))|x(0) = x] - f(x) = \int dx' f(x') P(x't|x0) - f(x)$$

dove $P(x't|x0)$ è la probabilità di transizione da x al tempo 0 a x' al tempo t . Scriviamo la serie di Taylor per f

$$f(x') = f(x) + \nabla f(x)(x' - x) + \frac{1}{2} \Delta f(x)(x' - x)^2 + o((x' - x)^2)$$

e inseriamo nel calcolo

$$\begin{aligned} \int dx' f(x') P(x't|x0) - f(x) &= \int dx' \left(f(x) + \nabla f(x)(x' - x) + \frac{1}{2} \Delta f(x)(x' - x)^2 + o((x' - x)^2) \right) P(x't|x0) - f(x) \\ &= \nabla f(x) \int dx' P(x't|x0)(x' - x) + \frac{1}{2} \Delta f(x) \int dx' P(x't|x0)(x' - x)^2 + \int dx' P(x't|x0) o((x' - x)^2) \end{aligned}$$

perchè $\int dx' P(x't|x0) = 1$ e i termini che coinvolgono f sono calcolati in x e escono fuori dagli integrali. Osserviamo che $\int dx' P(x't|x0)(x' - x) = E[(x' - x)|x(0) = x] = b(x)$ e $\int dx' P(x't|x0)(x' - x)^2 = E[(x' - x)^2|x(0) = x] = \sigma^2$, da cui

$$E[f(x(t))|x(0) = x] - f(x) \sim \nabla f(x)b(x)t + \frac{1}{2} \Delta f(x)t\sigma^2$$

Dividendo per t e passando al limite otteniamo la espressione del generatore

$$Lf(x) = b(x)\nabla f(x) + \frac{1}{2} \Delta f(x)\sigma^2$$

Equazioni di Kolmogorov

Per ottenere l'equazione per la derivata della probabilità di transizione $P(x't|x0)$ rispetto a t partiamo da

$$\partial_t P(x't|x0) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} [P(x't + \Delta t|x0) - P(x't|x0)]$$

Possiamo anche scrivere, usando la relazione di Kolmogorov,

$$P(x't + \Delta t|x0) = \int dz P(x't + \Delta t|zt) P(zt|x0)$$

e integrando rispetto ad una funzione test f

$$\begin{aligned} \int dx' f(x') \partial_t P(x't|x0) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dy f(y') P(x't + \Delta t|y0) - \int dz f(z) P(zt|x0) \\ &= \int dz P(zt|x0) \left[\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dx' f(x') P(x't + \Delta t|zt) - f(z) \right] \end{aligned}$$

e procedendo come prima

$$= \int dz P(zt|x0) [b(z)\nabla f(z) + \frac{1}{2} \Delta_z f(z)\sigma^2]$$

Integrando per parti

$$= \int dz f(z) [-\nabla_z (b(z)P(z|x_0)) + \frac{1}{2}\sigma^2 \Delta_z P(z|x_0)]$$

da cui deriviamo l'equazione

$$\partial_t P(z|x_0) = -\nabla_z (b(z)P(z|x_0)) + \frac{1}{2}\sigma^2 \Delta_z P(z|x_0)$$

Questa equazione è detta equazione di Kolmogorov forward o anche equazione di Fokker-Planck. Se si considera $P(x't'|xt)$ e si deriva rispetto a t il calcolo è simile a quello per il generatore e si ottiene l'equazione di Kolmogorov backward

$$\partial_t P(x't'|xt) = -\nabla_x b(x)P(x't'|xt) - \frac{1}{2}\sigma^2 \Delta_x P(x't'|xt)$$

il cui secondo membro è proprio il generatore $-L$ applicato a $P(x't'|xt)$ in x . L'operatore che compare nell'equazione forward a secondo membro è detto aggiunto di L e si denota con L^T . Poichè la densità $\rho(x, t)$, la probabilità che il processo sia in x al tempo t è data da

$$\rho(x', t') = \int dx P(x't'|xt)\rho(x, t)$$

si ha usando l'equazione forward per la P

$$\begin{aligned} \partial_{t'} \rho(x't') &= \int dx \rho(x, t) \partial_t P(x't'|xt) = \int dx \rho(x, t) [-\nabla_{x'} (b(x')P(x't'|xt)) + \frac{1}{2}\sigma^2 \Delta_{x'} P(x't'|xt)] \\ &= -\nabla_{x'} [b(x') \int dx P(x't'|xt)\rho(x, t)] + \frac{1}{2}\sigma^2 \Delta_{x'} [\int dx P(x't'|xt)\rho(x, t)] \\ &= -\nabla_{x'} [b(x')\rho(x', t')] + \frac{1}{2}\sigma^2 \Delta_{x'} \rho(x', t') \end{aligned}$$

da cui si ottiene l'equazione per la densità (forward) detta equazione di Fokker-Planck.

$$\partial_t \rho(xt) + \nabla_x (b(x)\rho(xt)) = \frac{1}{2}\sigma^2 \Delta_x \rho(xt)$$

I primi termini sono gli stessi che compaiono nella equazione di continuità per un fluido, e in più c'è il Laplaciano dovuto al rumore stocastico Browniano.

Nell'equazione per la densità compare L^T il generatore aggiunto rispetto alla misura di Lebesgue. E' possibile anche definire il generatore aggiunto L^* rispetto alla misura invariante $\bar{\rho}$. Poichè si ha

$$\int Lfg\bar{\rho}dx = \int fL^T(g\bar{\rho})dx = \int f(L^*g)\bar{\rho}$$

si ottiene la relazione tra i due aggiunti

$$L^* = \frac{1}{\bar{\rho}}L^T\bar{\rho}$$

Esplicitamente

$$\begin{aligned} \frac{1}{\bar{\rho}}L^T\bar{\rho}g &= \frac{1}{\bar{\rho}}(b \cdot \nabla + \frac{1}{2}\sigma\Delta)^T(\bar{\rho}g) = \frac{1}{\bar{\rho}}(-b \cdot \nabla - \nabla \cdot b + \frac{1}{2}\sigma\Delta)(\bar{\rho}g) \\ &= -b \cdot \nabla g - \frac{1}{\bar{\rho}}b \cdot (\nabla\bar{\rho})g - (\nabla \cdot b)g + \frac{1}{\bar{\rho}}\frac{\sigma}{2}[(\Delta\bar{\rho})g + 2\nabla g \cdot \nabla\bar{\rho} + \bar{\rho}\Delta g] \end{aligned}$$

Usando l'equazione per $\bar{\rho}$ si conclude

$$L^*g = (-b \cdot \nabla + \sigma \nabla \bar{\rho} \cdot \nabla + \frac{\sigma}{2} \Delta)g$$

Ornstein-Uhlenbeck

Consideriamo una classe particolare di processi di diffusione in cui il drift è un operatore lineare $A(x(t))$ sul processo (Ornstein-Uhlenbeck)

$$dx(t) = A(x(t))dt + \sigma dw(t)$$

Consideriamo un caso particolare che è di rilevanza nella teoria del moto browniano di Langevin, come vedremo in seguito.

$$dv = -\beta v dt + \sigma dw$$

$v(t)$ è un processo stazionario perchè il drift non dipende dal tempo.

Scriviamo

$$d[e^{\beta t}v(t)] = e^{\beta t}dv(t) + e^{\beta t}\beta v(t)dt = \sigma e^{\beta t}dw$$

e integriamo formalmente

$$e^{\beta t}v(t) = \sigma \int_0^t ds e^{\beta s} dw(s) + v(0)$$

Si può dare senso all'integrale per somme finite nel seguente modo. Sia $f(s)$ una funzione e definiamo

$$\int_0^t ds f(s) dw(s)$$

usando una approssimazione di f in termini di funzioni a gradino. Quindi restringendoci a funzioni a gradino si ha

$$f(s) = \sum_{i=1}^n c_i \chi_{[a_i, b_i]}(s)$$

e

$$\int_0^t f(s) dw(s) = \sum_{i=1}^n c_i [w(b_i) - w(a_i)]$$

Le funzioni a gradino sono dense in L^2 e quindi ogni f può essere approssimata da successioni di funzioni a gradino.

Possiamo quindi rappresentare il processo $v(t)$ come

$$v(t) = \sigma \int_0^t e^{\beta(s-t)} dw(s) + e^{-\beta t}v(0)$$

La media del processo è data da

$$E[e^{\beta t}v(t) - v(0)] = 0 \quad \text{che implica} \quad E[v(t)] = e^{-\beta t}v(0)$$

La covarianza si ottiene, con $t > s$,

$$\begin{aligned} E[(v(t) - E(v(t)))(v(s) - E(v(s)))] &= \sigma^2 \int_0^s e^{-\beta(s-s')} \int_0^t e^{-\beta(t-t')} E[dw(s')dw(t')] \\ &= \sigma^2 \int_0^s ds' e^{-\beta(s+t)} e^{\beta(2s')} = \frac{\sigma^2}{2\beta} e^{-\beta(s+t)} [e^{2\beta s} - 1] \end{aligned}$$

perchè $E[dw(s')dw(t')] = \delta(s' - t')$ e $E[dw(s')^2] = ds'$. In generale scriviamo

$$E[(v(t) - E(v(t)))(v(s) - E(v(s)))] = \frac{\sigma^2}{2\beta} [e^{-\beta|t-s| - \beta(s+t)}]$$

Per capire il conto precedente consideriamo le funzioni a gradino $f(s') = \sum_{i=1}^n c_i \chi_{[a_i, b_i]}$ e $g(t') = \sum_{j=1}^N c'_j \chi_{[a'_j, b'_j]}$ e

$$\begin{aligned} E\left[\int f(s')dw(s') \int g(t')dw(t')\right] &= \sum_{i=1}^n c_i \sum_{j=1}^N c'_j E[(w(b_i) - w(a_i))w(b'_j) - w(a'_j)] \\ &= \sum_{i=1}^n c_i \sum_{j=1}^N c'_j \sigma^2 |[a_i, b_i] \cap [a'_j, b'_j]| = \sigma^2 \int \sum_i c_i c'_i \chi_{[l_i, k_i]} = \sigma^2 \int f(t)g(t)dt \end{aligned}$$

Nel conto precedente $f(s') = e^{-\beta(s-s')}$ e $h(t') = e^{-\beta(t-t')}$.

Poichè $v(t) - E(v(t))$ è "somma" (pensando all'integrale come approssimato da somme finite) di variabili gaussiane è una variabile gaussiana determinata dalla media e dalla varianza $r(t) = \frac{\sigma^2}{2\beta} [1 - e^{-2\beta t}]$

$$P(v(t) = y) = P(vt|v_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r(t)}} \exp\left\{-\frac{|y - e^{-\beta t}v(0)|^2}{2r(t)}\right\}$$

da cui si ottiene che la probabilità di transizione è data da (si usa che il processo è omogeneo)

$$P(v't'|vt) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r(t')}} \exp\left\{-\frac{|v - e^{-\beta(t'-t)}v(0)|^2}{2r(t'-t)}\right\}.$$

Per $t \rightarrow \infty$ la media di $v(t)$ tende a zero e la varianza tende a $\frac{\sigma^2}{2\beta}$. Sappiamo che esiste una misura invariante per le proprietà di ergodicità del processo ed è data da

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(vt|v_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2/(2\beta)}} \exp\left\{-\frac{|v|^2}{\sigma^2/\beta}\right\}$$

he è quindi anche la soluzione dell'equazione

$$-\frac{\partial}{\partial v}(\beta v \rho) = \sigma^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} \rho$$

Il generatore è ovviamente dato da

$$-\beta v \frac{\partial}{\partial v} + \sigma^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2}$$

Gli stessi conti possono essere fatti per un generico processo di Ornstein-Uhlenbeck con drift A e si ottiene

Proposizione

$$dx(t) = A(x(t))dt + \sigma dw(t)$$

con dato iniziale $x(0) = x_0$ è

La soluzione di

$$x(t) = e^{At}x_0 + \int_0^t ds e^{A(t-s)}dw(s)$$

Il processo $x(t)$ è gaussiano con media

$$E(x(t)) = e^{At}x_0$$

e covarianza $r(t, s), t > s$

$$r(t, s) = e^{A(t-s)} \int_0^s d\tau e^{A\tau} \sigma^2 e^{A^T\tau}$$

per $t < s$

$$r(t, s) = \int_0^t d\tau e^{A\tau} \sigma^2 e^{A^T\tau} e^{A(s-t)}$$

Nota

Definizione di integrale di Riemann-Stieltjes

Sia f una funzione continua e h una funzione a variazione limitata. Sia P una partizione dell'intervallo di integrazione in intervallini $[x_0, x_1] \dots [x_i, x_{i+1}] \dots$. L'integrale di Riemann-Stieltjes è definito come

$$\int_a^b f(x)h(x) = \lim \sum_i f(c_i)(h(x_{i+1}) - h(x_i))$$

dove il limite è fatto mandando a zero la massima taglia degli intervalli. Ci sono generalizzazioni dell'integrale di Stieltjes che permettono di definirlo anche nel caso del processo di Wiener (vedi [6]).

Referenze [6].

7. TEORIA DEL MOTO BROWNIANO

7.1. Teoria di Einstein. Il moto di impurità in sospensione in un liquido, con una massa molto più grande di quella delle molecole del fluido è un moto erratico, che aumenta con la temperatura e col diminuire della viscosità.

Il nome del moto browniano è dovuto al biologo e microscopista Robert Brown. Nella prima metà del 1800, studiando la diffusione di particelle di polline in sospensione in un fluido, Brown notò che particelle dell'ordine di grandezza del micrometro compivano un moto frenetico ed apparentemente casuale, rimanendo comunque mediamente ferme.

Nei decenni successivi, diversi fisici si interessarono al fenomeno, in quanto poteva essere una conferma della natura atomistica della materia, della teoria cinetica del calore, e più in generale della meccanica statistica formulata da Boltzmann e da Gibbs. Il moto browniano ha le seguenti principali caratteristiche:

1. molto irregolare
2. I moti delle particelle sembrano essere completamente indipendenti
3. tanto più vivace quanto più sono piccole le particelle;
4. Non dipende dalla composizione o dalla densità della particella;
5. tanto più attivo quanto meno viscoso è il fluido;
6. tanto più attivo quanto più è alta la temperatura;
7. Non cessa mai: alcune particelle browniane sono state osservate per periodi di anni, senza osservare nessun arresto del moto.

L'ultima caratteristica è particolarmente interessante: infatti esclude la possibilità che il moto browniano sia un fenomeno che si verifica fuori dall'equilibrio. La spiegazione odierna che si dà al fenomeno è la seguente: gli urti casuali (supposti indipendenti) delle molecole di fluido su di una superficie piccola, come quella di una particella in sospensione, alterano la velocità

della particella prevalendo ora in una direzione, ora in un'altra. La particella browniana quindi è continuamente sollecitata a muoversi nelle diverse direzioni in modo affatto irregolare. Essa si trova nelle stesse condizioni delle altre molecole che compongono il fluido che la circonda; tuttavia ha dimensioni molto maggiori delle molecole. Come per le miscele di gas, vale inoltre il principio di equipartizione dell'energia: ogni particella ha la stessa energia cinetica media, indipendentemente dalla sua massa. Siccome la massa delle particelle browniane è molto maggiore di quella delle altre particelle, questo comporta che le particelle browniane hanno velocità molto minori rispetto a quella delle molecole; ci permette appunto di osservarne il moto, e seguirlo tramite un microscopio, come fece Brown.

Einstein propose una teoria detta del moto Browniano, che vuole rappresentare il moto effettuato da una particella semimacroskopica o mesoscopica (delle dimensioni cioè del micrometro), immersa in un fluido in equilibrio e soggetta agli urti con le molecole del mezzo. La teoria è basata sulle seguenti assunzioni:

- 1) il processo di evoluzione deve essere stazionario (si considera un mezzo infinito)
- 2) si richiedono incrementi indipendenti: lo spostamento della particella nell'intervallo di tempo $[T, t + \Delta T]$ è indipendente dallo spostamento nell'intervallo precedente, ipotesi che ha senso se la velocità al tempo t non è troppo grande.

Tale velocità è essenzialmente la velocità acquisita in una collisione in media.

Queste sono le assunzioni che descrivono il processo di Wiener $w(t)$ con equazione per la densità

$$\partial_t \rho(xt) = \frac{1}{2} \sigma^2 \Delta_x \rho(xt)$$

L'equazione precedente può essere interpretata come l'equazione per la densità del fluido di particelle pesanti. Le assunzioni precedenti non determinano σ . Il lavoro di Einstein deduce la forma della varianza basandosi su considerazioni fisiche.

L'idea è quella di considerare il fluido di particelle browniane con densità ρ soggetto ad una forza esterna F (ad esempio la gravità) immerse in un background formato da un fluido viscoso (le particelle leggere).

All'equilibrio la forza è bilanciata dalle forze di pressione osmotica

$$P = kT \frac{\nabla \rho}{\rho}$$

(la densità varia e gli stati più profondi sono più densi), dove ρ è la densità delle particelle pesanti, T la temperatura e k la costante di Boltzmann.

$$F = kT \frac{\nabla \rho}{\rho}$$

In un fluido viscoso la velocità di una particella è determinata dalla forza in base alla relazione

$$F = -M\gamma v$$

dove γ è il coefficiente di attrito.

La corrente J , il numero di particelle che attraversano una unità di area per unità di tempo è $-\rho v$ da cui

$$J = -\frac{F\rho}{M\gamma}$$

sostituendo il valore della forza

$$J = -\frac{kT \frac{\nabla \rho}{\rho} \rho}{M\gamma}$$

D'altro canto la corrente J dall'equazione di diffusione ha anche l'espressione

$$J = -\frac{1}{2}\sigma^2\nabla\rho$$

da cui confrontando si ha

$$\frac{1}{2}\sigma^2 = \frac{kT}{M\gamma}$$

Notare che l'uguaglianza delle correnti vale anche in assenza di forza.

La particelle in sospensione sentono l'attrito dovuto alla viscosità del fluido e in base alla teoria di Stokes la forza determina la velocità come

$$F = -6\pi\eta va$$

dove η è la viscosità e a la dimensione della particella. Confrontando, troviamo l'espressione di γ

$$-\gamma M = -6\pi\eta a,$$

e infine

$$\frac{1}{2}\sigma^2 = \frac{kT}{6\pi\eta a}$$

$\frac{1}{2}\sigma^2$ è anche denotato con D , coefficiente di diffusione. Notare che ρ è stata eliminata nei passaggi e quindi la formula vale anche in presenza di una sola particella Browniana.

La relazione tra D ed η è un caso particolare delle cosiddette relazioni di fluttuazione-dissipazione della teoria di Onsager. D è l'ordine di grandezza delle fluttuazioni nel moto browniano (varianza) e η determina l'intensità con cui il fluido dissipa.

La conoscenza di k è equivalente a conoscere il numero di Avogadro e quindi la dimensione molecolare. Lo scopo finale di Einstein era di ottenere una conferma del modello atomistico e della teoria della meccanica statistica; all'epoca l'esistenza di atomi e molecole non era accettata da una vasta comunità. La teoria del moto browniano servì perciò ad ottenere un metodo di determinazione della costante di Boltzmann (o del numero di Avogadro, dalla costante dei gas) sfruttando l'espressione di D . Note temperatura, viscosità del fluido e dimensioni medie delle particelle browniane, e determinato D dall'osservazione del moto delle particelle, si potè ricavare una stima di k ; il valore così ottenuto si discosta solo del 19% da quello odierno universalmente accettato.

Questa teoria del moto Browniano è anche detta teoria di Einstein-Smolouchowski.

7.2. Teoria di Ornstein-Uhlenbeck. La teoria del moto Browniano di Einstein e Smolouchowski è basata su una assunzione valida in un certo range di tempi: il tempo necessario affinché la velocità acquisita in una collisione diventi indipendente da quanto avvenuto prima. Per avere un ordine di grandezza da

$$m\frac{dv}{dt} = -6\pi\eta av$$

ricaviamo il tempo necessario affinché la velocità acquisita in una collisione si "perda" : $t_0 = \frac{m}{6\pi\eta a} = \frac{1}{\gamma}$ da cui in condizioni atmosferiche? $t_0 \sim 10^{-7}$ sec. Per tempi $t \gg t_0$ le assunzioni della teoria sono corrette. Ma per tempi più piccoli la teoria va modificata. Langevin iniziò un approccio che, nel 1930, culminò in una nuova teoria del moto Browniano ad opera di L. S. Ornstein and G. E. Uhlenbeck. Per situazione ordinarie le due teorie danno risultati

numericamente indistinguibili, ma ci sono situazioni fisiche in cui solo la teoria di Ornstein-Uhlenbeck è valida. Inoltre, la teoria di Ornstein-Uhlenbeck è una vera teoria dinamica e rappresenta un grande progresso nella comprensione del moto Browniano.

Il processo di Smoluchowski ha come spazio degli stati l'insieme delle posizioni x della particella browniana. Tuttavia la teoria di Einstein e Smoluchowski è abbastanza distante dalla meccanica newtoniana: invece di considerare "forze casuali", si sono introdotti degli "spostamenti casuali" ad hoc, distribuiti in maniera tale da ottenere il risultato voluto. Non si è parlato però delle forze (generate dagli urti particella - molecole) agenti sulla particella browniana. Cerchiamo ora un ragionamento più fisico, Sfruttiamo ancora una volta l'interpretazione di Einstein della dinamica della particella browniana, soggetta a due tipi di forze:

1. Le forze di attrito viscoso, che si oppongono al moto. Supporremo queste forze lineari nella velocità, e le esprimeremo con un termine $-m\beta v$;

2. Le forze derivanti dagli urti delle molecole sulla particella, che indicheremo con $m\Gamma(t)$. I numerosissimi urti generano forze impulsive per un brevissimo tempo d'interazione t_0 ; se consideriamo $t_0 \ll \beta^{-1}$, per intervalli di tempo maggiori di t_0 , gli urti saranno tra loro totalmente indipendenti, e delta-correlati a tempi coincidenti

$$\langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = \bar{\sigma}^2 \delta(t - t'), t \neq t'$$

con $\bar{\sigma}$ da determinare.

Stiamo in questo modo definendo un processo stocastico sullo spazio delle fasi. La forma differenziale corrispondente è:

$$\begin{cases} dx(t) = v(t)dt \\ dv(t) = -\beta v(t)dt + \bar{\sigma}dw, \end{cases} \quad (7.1)$$

è un processo nella classe di Ornstein-Uhlenbeck che è stato studiato nelle sezioni precedenti. Questo è un esempio di processo stocastico a due componenti $x(t), v(t)$. Il solo processo $x(t)$ non è Markoviano, perchè $x(t)$ non dipende solo da $x(s), s < t$ ma dipende anche dal valore di $v(s)$. Se si guarda al processo $x(t), v(t)$ sullo spazio delle fasi allora si recupera la proprietà di Markov. Per confrontare le predizioni delle due teorie occorre studiare il processo $x(t)$ nella teoria di Ornstein and G. E. Uhlenbeck. Poichè abbiamo già studiato il processo $v(t)$ possiamo facilmente ricostruire le proprietà di $x(t)$. Osserviamo che $x(t)$ non è Markov ma è gaussiano perchè "somma" di variabili gaussiane. Quindi basta determinare la media e la covarianza. Scriviamo

$$x(t) = x(0) + \int_0^t ds v(s)$$

Per calcolare la media

$$E[x(t)] = x(0) + \int_0^t ds E[v(s)] = x(0) + \int_0^t ds e^{-\beta s} v(0) = x(0) + \frac{v(0)}{\beta} [1 - e^{-\beta t}]$$

La covarianza per $t' > t$

$$\begin{aligned} E[(x(t) - E(x(t)))(x(t') - E(x(t')))] &= \int_0^t ds \int_0^{t'} ds' E[(v(s) - E(v(s)))(v(s') - E(v(s')))] \\ &= \frac{\bar{\sigma}^2}{2\beta} \int_0^t ds \int_0^{t'} ds' [e^{-\beta|s'-s|} - e^{\beta(s+s')}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\bar{\sigma}^2}{2\beta} \left[\int_0^{t'} ds' \int_{-s'}^{t-s'} d\tau e^{-\beta|\tau|} + \int_0^{t'} ds' \int_{s'}^{s'+t} dz e^{-\beta z} \right] \\
&= \frac{\bar{\sigma}^2}{2\beta} \left[\int_0^{t'} ds' \left(\int_{-s'}^0 d\tau e^{\beta\tau} + \int_0^{t-s'} d\tau e^{-\beta\tau} \right) - \frac{1}{\beta} \int_0^{t'} ds' (e^{-\beta(t+s')} - e^{-\beta s'}) \right] \\
&= \frac{\bar{\sigma}^2}{2\beta} \left[\int_0^{t'} ds' \frac{1}{\beta} (1 - e^{-\beta s'} - e^{-\beta(t-s')} + 1) + \frac{1}{\beta^2} (e^{-2t'\beta} - e^{-\beta t} - e^{-\beta t'} + 1) \right] \\
&= \frac{\bar{\sigma}^2}{2\beta} \left[\frac{2t'}{\beta} - \frac{1}{\beta^2} (e^{-\beta t'} - 1) + \frac{1}{\beta^2} (e^{-\beta(t-t')} - e^{-\beta t}) + \frac{1}{\beta^2} (e^{-2\beta t'} - e^{-\beta t} - e^{-\beta t'} + 1) \right]
\end{aligned}$$

Per $t = t'$

$$E[(x(t) - E(x(t)))^2] = \frac{\bar{\sigma}^2}{\beta^2} t + \frac{\bar{\sigma}^2}{2\beta^3} [-3 + 4e^{-\beta t} - e^{-2\beta t}] \quad (7.2)$$

Per confrontare questa varianza con quella nella teoria di Einstein-Smoluchowski $E[(x(t) - E(x(t)))^2] = \sigma^2 t$, occorre identificare $\bar{\sigma}$. Usiamo il teorema di equipartizione dell'energia: sempre dalla meccanica statistica, per il teorema di equipartizione dell'energia, sappiamo che ogni particella ha in media un'energia kT per ogni suo grado di libertà, indipendentemente dalla sua massa. Siccome stiamo considerando una particella browniana all'equilibrio, varrà:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{m}{2} E[(v(t))^2] = \frac{m \bar{\sigma}^2}{2 \beta} = \frac{1}{2} kT$$

Confrontando con $\sigma^2 = \frac{kT}{m\beta}$ si ottiene

$$\bar{\sigma}^2 = \beta^2 \sigma^2$$

La varianza nella teoria ES è $\sigma^2 t$ e differisce da quella nella teoria OU per il secondo termine nell'equazione precedente. Il valore assoluto della differenza è minore di $\frac{3\sigma^2}{2\beta}$. Nei casi tipici $\beta^{-1} \sim 10^{-8} \text{ sec}$, $t = \frac{1}{2} \text{ sec}$ e quindi l'errore è meno di $3 \cdot 10^{-8}$.

7.3. Da Ornstein-Uhlenbeck ad Einstein-Smoluchowski. Dal paragrafo precedente abbiamo visto come nel limite $\beta \rightarrow \infty$, la distribuzione di Ornstein-Uhlenbeck si riduce al caso particolare di Einstein. Da ciò si deduce che, in questo limite, un processo di Ornstein-Uhlenbeck si deve ridurre ad un processo di Smoluchowski. Dalla definizione del processo di Ornstein-Uhlenbeck si ha

$$dx = -\frac{dv}{\beta} + \frac{\sigma}{\beta} dw$$

Confrontiamo i due processi

$$ES : dx(t) = \sigma dw(t)$$

$$OU : dx(t) = v(t) dt$$

$$dv(t) = -\beta v dt + \beta \sigma dw(t)$$

Se il sistema è sottoposto ad una forza esterna si ha

$$OU : \begin{cases} dx(t) = v(t) dt \\ dv(t) = -\beta v dt + F(x(t)) dt + \beta \sigma dw(t) \end{cases}$$

In tal caso si può definire una velocità $\frac{F}{\beta} = b$ e studiare il limite del processo posizione di OU nel limite $\beta \rightarrow \infty$ tenendo fisso b . Il significato di b è la velocità limite che la particella acquista in un fluido viscoso.

Teorema

Siano x_0, v_0 i dati iniziali del processo di OU $x(t), v(t)$. Si ha che nel limite $\beta \rightarrow \infty$ il processo posizione $x(t)$

$$\begin{aligned} dx(t) &= v(t)dt \\ dv(t) &= -\beta v dt + \beta b(x(t))dt + \beta \sigma dw(t) \end{aligned}$$

tende al processo $y(t)$, con dato iniziale x_0 , per ogni v_0 con probabilità 1 soluzione di

$$dy(t) = b(y(t))dt + \sigma dw(t)$$

Questo teorema ci dice che la descrizione di OU è una descrizione del moto galileiana in cui le forze agiscono sulle velocità, mentre la descrizione di ES è di tipo aristotelico, in cui le forze agiscono sulle posizioni.

Una descrizione alternativa in termine di limiti di scala. Consideriamo l'equazione precedente con $\beta = 1$. Si vuole guardare su tempi $t \gg t_0 = \beta^{-1}$. Sia $\frac{t}{t_0} = \beta = \varepsilon^{-1}$. Bisogna guardare su tempi di ES, t' , molto piccoli rispetto ai tempi di OU, t . Ragionando come nei limiti di scala e procedendo in modo formale poniamo $t = \varepsilon^{-1}t', x = \varepsilon^{-1}x'$ da cui le equazioni nelle variabili x', t' diventano

$$\begin{cases} dx'(t') = v(t')dt' \\ dv(\varepsilon^{-1}t') = -\varepsilon^{-1}v dt' + \sigma \varepsilon^{-1}dw' = -\varepsilon^{-1}dx'(t') + \sigma \varepsilon^{-1}dw' \end{cases} \quad (7.3)$$

dove $x'(t') = \varepsilon x(\varepsilon^{-1}t')$, $w'(t') = \varepsilon w(\varepsilon^{-1}t')$ da cui

$$dx'(t') = -\varepsilon dv(\varepsilon^{-1}t') + \sigma dw'$$

e infine

$$dx'(t') = \sigma dw'(t')$$

che è l'equazione del moto Browniano.

Osservazione L'espressione del coefficiente di diffusione nella teoria di Einstein D si ricava dicendo che D è dato dal limite (dalla formula 7.2)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle x(t)^2 \rangle = 2D$$

D'altro canto, nella teoria di Ornstein-Uhlenbeck si ha

$$\langle x(t)^2 \rangle = \int_0^t ds \int_0^t ds' \langle v(s)v(s') \rangle \approx t \int_0^t ds \langle v(s)v(0) \rangle$$

da cui

$$D = \int_0^\infty ds \langle v(s)v(0) \rangle$$

Generatore

Concludiamo la sezione trovando l'espressione del generatore A per il processo $x(t), v(t)$. Si ottiene in base alla definizione di generatore calcolando

$$(Af)(y, p, t) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \delta^{-1} E[f(x(t+\delta), v(t+\delta)) - f(x(t), v(t)) | x(t) = y, v(t) = p]$$

L'incremento della f nella parentesi viene riscritto come

$$f(x(t+\delta), v(t+\delta)) - f(x(t+\delta), v(t)) + f(x(t+\delta), v(t)) - f(x(t), v(t))$$

$= \nabla_v f(x(t+\delta), p)[v(t+\delta) - v(t)] + \frac{1}{2} \Delta_v f(x(t+\delta), p)[v(t+\delta) - v(t)]^2 + \nabla_y f(y, p)[x(t+\delta) - x(t)] +$
 da cui, poichè $[x(t+\delta) - x(t)] = v dt$,

$$(Af)(y, p, t) = v \cdot \nabla_y f(y, p, t) - \beta v \cdot \nabla_v f(y, p, t) + \frac{\bar{\sigma}}{2} \Delta_v f(y, p, t)$$

che determina l'equazione backward

L'equazione forward o di Fokker-Planck si ottiene in termini dell'operatore aggiunto A^* . Notare che parliamo di equazione di Fokker-Planck anche in questo caso, anche se il Laplaciano questa volta agisce sulle velocità.

Un modo di dimostrare il limite $\beta \rightarrow \infty$ è quello di riscaldare l'equazione di Fokker-Planck e cercare una soluzione come serie di potenze. Il primo termine è una Maxwelliana la cui densità è soluzione dell'equazione di diffusione.

Derivazione moto browniano

Si può derivare l'equazione stocastica che descrive il moto browniano? Formalmente, possiamo considerare una particella pesante di massa M con posizione iniziale q e momento p in un fluido in equilibrio con temperatura inversa β e densità ρ . L'Hamiltoniana del sistema è:

$$H = \frac{1}{2M} p^2 + \sum_j V(q - q_j) + \sum_j \frac{1}{2m} p_j^2 + \sum_{i < j} U(q_i - q_j)$$

dove V è il potenziale di interazione delle particelle del fluido con la particella pesante e U descrive l'interazione tra le particelle del fluido. Le equazioni del moto sono

$$\frac{d}{dt} q(t) = v(t)$$

$$M \frac{d}{dt} v(t) = - \sum_j \nabla V(q(t) - q_j(t))$$

$$\frac{d}{dt} q_j(t) = \frac{1}{m} p_j(t)$$

$$\frac{d}{dt} p_j(t) = - \sum_j \nabla V(q(t) - q_j(t)) - \sum_{i < j} \nabla U(q_i - q_j)$$

Il comportamento browniano si deve ritrovare usando il fatto che la massa M è molto più grande della massa delle particelle del fluido, quindi riscaldiamo la massa come $M_\varepsilon = \varepsilon^{-2} M$ tenendo fisso m . Per avere una energia cinetica finita occorre di conseguenza riscaldare anche il momento $p_\varepsilon = \varepsilon^{-1} p$. In questo modo la velocità è di ordine ε che significa che il moto della particella pesante è più lento. Occorre anche riscaldare la posizione come $q_\varepsilon = \varepsilon^{-1} q$ perchè descriviamo un comportamento macroscopico. Infine questo implica un riscaldamento temporale $t \sim \varepsilon^{-2}$. Partendo dalle equazioni di Newton riscaldate il moto $q_\varepsilon(t), v_\varepsilon(t)$ dovrebbe convergere al processo di Ornstein-Uhlenbeck con un termine di attrito con coefficiente $D\beta M$ e coefficiente di diffusione

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty dt \langle \sum_j F(q_j), \sum_j F(q_j)(t) \rangle > 0$$

dove $\sum_j F(q_j)$ è la forza che agisce sulla particella pesante posta nell'origine e la media è fatta rispetto alla misura di Gibbs del sistema in equilibrio e la correlazione temporale è in termini della dinamica generata dall'Hamiltoniana con la particella pesante posta nell'origine.

La relazione tra il coefficiente di attrito e il coefficiente di diffusione è determinata dal fatto che la velocità tende per $t \rightarrow \infty$ ad una distribuzione di equilibrio Maxwelliana che deve avere come varianza la temperatura del gas di particelle leggere in equilibrio, perchè alla fine il sistema complessivo è in equilibrio.

Questo risultato si prova rigorosamente solo nel caso $U = 0$.

Referenze [6] e [10].

8. SISTEMI DI PARTICELLE INTERAGENTI E IDRODINAMICA

Consideriamo un sistema di N particelle Hamiltoniano la cui evoluzione è descritta ad esempio dalle equazioni di Newton, e studiamo il suo comportamento su scala macroscopica. Ci si aspetta che esso sia descritto dalle equazioni della fluidodinamica. Mostriamo che un procedimento di riscaldamento spazio-temporale per mette di derivare formalmente le equazioni di Eulero. Il procedimento che seguiremo può essere riassunto brevemente come segue. Assumendo come punto di partenza le equazioni di Newton riscalate 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.

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

$$\epsilon := \frac{l}{L} \quad (8.1)$$

Lo stato del sistema è definito sulla scala microscopica assegnando il vettore di stato

$$(q, v) := (q_1, v_1; \dots; q_N, v_N) \quad (q_i, v_i) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \quad (8.2)$$

L'evoluzione temporale del sistema è governata dalle equazioni di Newton

$$\frac{dq_i}{d\tau} = v_i \quad , \quad \frac{dv_i}{d\tau} = - \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j}(|q_i - q_j|) \quad i = 1, \dots, N \quad (8.3)$$

dove τ è il tempo espresso in coordinate microscopiche. Si usa la notazione convenzionale

$$\frac{\partial V}{\partial q_j}(|q_i - q_j|) = V'(|q_i - q_j|) \hat{q}_{ij}$$

dove \hat{q}_{ij} è il versore diretto da j a i e V' è la derivata rispetto all'argomento del potenziale, che è la distanza tra q_i e q_j , cioè $- \frac{\partial V}{\partial q_j}(|q_i - q_j|)$ è la forza che la particella in q_j esplica su

quella in q_i ed è diretta come $-\hat{q}_{ij}$. Naturalmente sotto lo scambio $i \rightarrow j$ questo termine cambia di segno. Usiamo la convenzione

$$\frac{\partial V}{\partial q_i}(|q_i - q_j|) = -\frac{\partial V}{\partial q_j}(|q_i - q_j|)$$

Le coordinate spazio-temporali macroscopiche sono definite ϵ -riscalando quelle microscopiche:

$$x_i := \epsilon q_i \quad t := \epsilon \tau \quad (8.4)$$

Assumendo che in coordinate microscopiche $l \sim 1$, ne segue che, ancora in coordinate microscopiche

$$|\Lambda| \sim \epsilon^{-d} \quad (8.5)$$

Se vogliamo che il sistema abbia densità unitaria (stiamo descrivendo un fluido), dobbiamo imporre che

$$N \sim [\epsilon^{-d}] \quad [x] := \text{parte intera di } x \quad (8.6)$$

Definiamo ora il vettore delle osservabili conservate

$$Z_i^\mu(\{x_i, v_i\}) := \left\{ 1, v_i, \frac{1}{2}(v_i^2 + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} V(|q_i - q_j|)) \right\} \quad i = 1, \dots, N \quad \mu = 0, \dots, d+1 \quad (8.7)$$

e quindi

$$Z^\mu(x, \{x_i, v_i\}) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) Z_i^\mu(\{x_i, v_i\}) \quad (8.8)$$

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

$$\int_A dx Z^0(x, \{x_i, v_i\}) \quad (8.9)$$

rappresenta la frazione di particelle presenti nella regione A quando il sistema si trova nella configurazione $\{x_i, v_i\}$. Analogamente

$$\int_A dx Z^\alpha(x, \{x_i, v_i\}) = \int_A dx Z^0 \frac{\int_A dx Z^\alpha}{\int_A dx Z^0} \quad \alpha = 1, \dots, d \quad (8.10)$$

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

$$\int_A dx Z^{d+1}(x, \{x_i, v_i\}) = \int_A dx Z^0 \frac{\int_A dx Z^{d+1}}{\int_A dx Z^0} \quad (8.11)$$

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

(8.8) 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.

8.1. Leggi di conservazione locali. Legge di conservazione della massa

Esaminiamo per prima l'evoluzione temporale del campo

$$Z^0(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) \quad (8.12)$$

A tale scopo consideriamo una funzione

$$f: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R} \quad f \in \mathcal{C}^{(\infty)}(\mathbf{R}) \quad (8.13)$$

Integrando su Λ il prodotto $Z^0 f$ si ottiene

$$\int_{\Lambda} dx Z^0(x) f(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (8.14)$$

Si derivino ambo i membri della (8.14) rispetto al tempo macroscopico t . Per il primo membro possiamo scrivere

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda} dx Z^0(x) f(x) = \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^0}{dt}(x) \quad (8.15)$$

Applicando al secondo membro la regola di derivazione delle funzioni composte e la convenzione di Einstein sugli indici *di componente* ripetuti, si ottiene

$$\frac{1}{N} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N f(x_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha}(x_i) \frac{dx_i^\alpha}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha}(x_i) v_i^\alpha \quad (8.16)$$

Del resto risulta

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha}(x_i) v_i^\alpha = \int_{\Lambda} dx \frac{\partial f}{\partial x^\alpha}(x) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) v_i^\alpha = \int_{\Lambda} dx \frac{\partial f}{\partial x^\alpha} Z^\alpha(x) \quad (8.17)$$

Integrando per parti la (8.17) ed osservando che $\partial\Lambda = \emptyset$, si ottiene

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^0}{dt}(x) = - \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{\partial Z^\alpha}{\partial x^\alpha} \quad (8.18)$$

da cui si ricava l'equazione

$$\frac{dZ^0}{dt}(x) = - \frac{\partial Z^\alpha}{\partial x^\alpha}(x) \quad (8.19)$$

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

$$Z^\alpha(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) v_i^\alpha \quad \alpha = 1, \dots, d \quad (8.20)$$

Integrando Z^α contro f si ottiene

$$\int_{\Lambda} f(x) Z^\alpha(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) v_i^\alpha \quad (8.21)$$

Si derivino ambo i membri della (8.21) rispetto al tempo macroscopico t . Per il primo membro possiamo scrivere

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda} f(x) Z^\alpha(x) = \int_{\Lambda} f(x) \frac{dZ^\alpha}{dt}(x) \quad (8.22)$$

Per il secondo membro possiamo scrivere

$$\frac{1}{N} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N f(x_i) v_i^\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\beta}(x_i) v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \frac{dv_i^\alpha}{dt} \quad (8.23)$$

Riscalando il tempo nella (8.3) si ottiene

$$\frac{dv_i}{dt} = -\epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j}(|q_i - q_j|) \quad (8.24)$$

Sfruttando la (8.24) possiamo scrivere

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^\alpha}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\beta}(x_i) v_i^\alpha v_i^\beta - \frac{1}{N} \epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha}(|q_i - q_j|) \quad (8.25)$$

Ora si osservi che vale la seguente proprietà:

$$\sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha}(|q_i - q_j|) = \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_j) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|) = - \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_j) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha}(|q_i - q_j|) \quad (8.26)$$

e dunque

$$\sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha}(|q_i - q_j|) = \frac{1}{2} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} (f(x_j) - f(x_i)) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha}(|q_i - q_j|) \quad (8.27)$$

Sviluppando f in serie di Taylor nel punto x_i , al prim'ordine in ϵ risulta

$$\sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha}(|q_i - q_j|) = \frac{\epsilon}{2} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial f}{\partial x_i^\beta}(x_i) (q_j^\beta - q_i^\beta) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha}(|q_i - q_j|) \quad (8.28)$$

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 (8.25). Il resto della serie produrrebbe termini $\sim O(\epsilon)$ nulli nel limite suddetto. Sostituendo la (8.28) nella (8.25) si ottiene

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{\alpha}}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^{\beta}}(x_i) \left\{ v_i^{\alpha} v_i^{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^{\alpha}}(|q_i - q_j|)(q_j^{\beta} - q_i^{\beta}) \right\} \quad (8.29)$$

Si definisca

$$W_i^{\alpha\beta} := v_i^{\beta} v_i^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^{\alpha}}(|q_i - q_j|)(q_j^{\beta} - q_i^{\beta}) \quad (8.30)$$

in modo tale che

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{\alpha}}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^{\beta}}(x_i) W_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{\Lambda} dx \delta(x - x_i) \frac{\partial f}{\partial x^{\beta}}(x) W_i^{\alpha\beta} \quad (8.31)$$

Definendo il tensore

$$W^{\alpha\beta} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) W_i^{\alpha\beta} \quad (8.32)$$

la 8.31 si scrive nella forma

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{\alpha}}{dt} = \int_{\Lambda} dx \frac{\partial f}{\partial x^{\beta}} W^{\alpha\beta} = - \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{\partial W^{\alpha\beta}}{\partial x^{\beta}} \quad (8.33)$$

dove, in ultimo membro, si è eseguita un'integrazione per parti. Dalla 8.33 si ricava dunque l'equazione

$$\frac{dZ^{\alpha}}{dt}(x) = - \frac{\partial W^{\alpha\beta}}{\partial x^{\beta}}(x) \quad (8.34)$$

cioè la legge di conservazione dell'impulso.

Legge di conservazione dell'energia

Studiamo infine l'evoluzione temporale del campo

$$Z^{d+1}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) \frac{1}{2} \left\{ v_i^2 + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} V(|q_i - q_j|) \right\} \quad (8.35)$$

Integrando Z^{d+1} contro f si ottiene

$$\int_{\Lambda} dx f(x) Z^{d+1}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \frac{1}{2} \left\{ v_i^2 + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} V(|q_i - q_j|) \right\} \quad (8.36)$$

Derivando ambo i membri della (8.36) rispetto al tempo macroscopico t si ottiene

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} v_i^\alpha \frac{1}{2} \left\{ v_i^2 + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} V(|q_i - q_j|) \right\} + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \frac{1}{2} \left\{ 2v_i^\alpha \frac{dv_i^\alpha}{dt} + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \sum_{l=1}^N \frac{\partial V}{\partial x_l^\alpha} (|q_i - q_j|) v_l^\alpha \right\} \end{aligned} \quad (8.37)$$

Si ponga

$$M_i := 2v_i^\alpha \frac{dv_i^\alpha}{dt} + \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \sum_{l=1}^N \frac{\partial V}{\partial x_l^\alpha} (|q_i - q_j|) v_l^\alpha \quad (8.38)$$

e si osservi che della sommatoria su l sopravvivono soltanto i termini corrispondenti ad $l = i, j$. Inoltre sfruttando l'equazione di Newton (8.24) si ottiene

$$M_i = -2v_i^\alpha \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) + \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) v_i^\alpha + \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) v_j^\alpha \quad (8.39)$$

Sfruttando la (8.26) per gli ultimi due termini, si trova che

$$M_i = -2v_i^\alpha \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) + \epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (v_i^\alpha - v_j^\alpha) \quad (8.40)$$

da cui si ricava immediatamente

$$M_i = -\epsilon^{-1} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) (v_i^\alpha + v_j^\alpha) \quad (8.41)$$

Sfruttando la (8.41) e la definizione di Z_i^{d+1} , possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} (x_i) v_i^\alpha Z_i^{d+1} + \\ &- \frac{1}{N} \epsilon^{-1} \sum_{i=1}^N f(x_i) \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right) \end{aligned} \quad (8.42)$$

Ancora ripetendo un argomento analogo a quello utilizzato nella (8.26), si può dimostrare che

$$-\epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right) = \frac{1}{2} \epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} (f(x_j) - f(x_i)) \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) \times \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right) \quad (8.43)$$

da cui, con uno sviluppo in serie di Taylor, si ottiene al prim'ordine in ϵ

$$\begin{aligned}
-\epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} f(x_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right) &= \frac{1}{2} \epsilon^{-1} \sum_{i,j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} (x_j^\alpha - x_i^\alpha) \frac{\partial V}{\partial q_j^\beta} (|q_i - q_j|) \times \\
&\times \left(\frac{v_i^\beta + v_j^\beta}{2} \right) \tag{8.44}
\end{aligned}$$

Introducendo ora la (8.44) nella (8.42) e riscaldando opportunamente le variabili si ottiene

$$\begin{aligned}
\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha}(x_i) \left\{ v_i^\alpha Z_i^{d+1} + \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \times \right. \\
&\times \left. \left(\frac{v_i^\beta + v_j^\beta}{2} \right) \right\} \tag{8.45}
\end{aligned}$$

Si definisca

$$W_i^{d+1,\alpha} := v_i^\alpha Z_i^{d+1} + \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \left(\frac{v_i^\beta + v_j^\beta}{2} \right) \tag{8.46}$$

in modo tale che

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha}(x_i) W_i^{d+1,\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{\Lambda} dx \delta(x - x_i) \frac{\partial f}{\partial x^\alpha}(x) W_i^{d+1,\alpha} \tag{8.47}$$

Definendo il tensore

$$W^{d+1,\alpha} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) W_i^{d+1,\alpha} \tag{8.48}$$

la (8.47) si scrive nella forma

$$\int_{\Lambda} dx f(x) \frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) = \int_{\Lambda} dx \frac{\partial f}{\partial x^\alpha}(x) W^{d+1,\alpha} = - \int_{\Lambda} dx f(x) \frac{\partial W^{d+1,\alpha}}{\partial x^\alpha} \tag{8.49}$$

dove, in ultimo membro, si è eseguita un'integrazione per parti. Dalla 8.49 si ricava l'equazione

$$\frac{dZ^{d+1}}{dt}(x) = - \frac{\partial W^{d+1,\alpha}}{\partial x^\alpha} \tag{8.50}$$

cioè la legge di conservazione dell'energia.

8.2. 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 (8.32) 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 $\beta = 1, 2, 3$

$$W_i^{\alpha\beta} := v_i^\beta v_i^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{j:i \neq j}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_j^\beta - q_i^\beta)$$

$$W_i^{d+1,\alpha} := v_i^\alpha Z_i^{d+1} + \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \left(\frac{v_i^\alpha + v_j^\alpha}{2} \right)$$

Assunzione di equilibrio locale

La misura di Gibbs globale può essere scritta nella seguente forma

$$\begin{aligned} \mu_G(q_1, \dots, q_N; v_1, \dots, v_N) &= Q^{-1} \exp - \sum_i \beta \{ \log z + \frac{1}{2} |v_i - u_i|^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,j \neq i} U(|q_i - q_j|) \} \\ &= Q^{-1} \sum_i \lambda^\alpha Z_i^\alpha \end{aligned}$$

con

$$\lambda^0 = -\log z + \frac{1}{2} \beta u^2; \quad \lambda^\alpha = \beta u^\alpha; \quad \beta^{d+1} = \beta$$

Per ottenere le equazioni idrodinamiche si assume che il sistema sulla scala idrodinamica è localmente in equilibrio:

La distribuzione di non equilibrio all'ordine più basso in ε si riduce alla distribuzione Gibbsiana relativa al potenziale V , con parametri lentamente variabili su scala microscopica.

Misura di Gibbs locale

$$\begin{aligned} \mu_G^\varepsilon(q_1, \dots, q_N; v_1, \dots, v_N) &= Q^{-1} \exp - \sum_i \beta(\varepsilon q_i) \{ \log z(\varepsilon q_i) + \frac{1}{2} |v_i - u_i(\varepsilon q_i)|^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,j \neq i} U(|q_i - q_j|) \} \\ &= Q^{-1} \exp \int dx \lambda^\alpha(x) Z^\alpha(x) \end{aligned}$$

Notare che l'integrale è scritto in termini delle coordinate macroscopiche, cioè $\varepsilon^{-d} \int dx f(x) = \int dq f(q)$ e il fattore ε^{-d} è esattamente uguale a N .

$$\sum_i \lambda^\alpha(\varepsilon q_i) Z_i^\alpha = N \int dq \frac{1}{N} \delta(\varepsilon q_i - \varepsilon q) \lambda^\alpha(\varepsilon q) Z_i^\alpha = \int dx \frac{1}{N} \delta(x_i - x) \lambda^\alpha(x) Z_i^\alpha = \int dx \lambda^\alpha(x) Z^\alpha(x)$$

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 nel limite la densità $\rho(x, t)$ e analogamente si ha che $\langle Z^\alpha \rangle \rightarrow \rho(x, t)u(x, t)$, 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.

$$\frac{d \langle Z^\beta \rangle}{dt}(x) = -\nabla_\alpha \langle W^{\beta, \alpha} \rangle \quad (8.51)$$

A sinistra si ottiene nel limite 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 $v_i^\alpha v_i^\beta$

$$C_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) v_i^\alpha v_i^\beta \rangle \quad (8.52)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) (v_i^\alpha - u^\alpha(x))(v_i^\beta - u^\beta(x)) \rangle + \rho u^\alpha(x) u^\beta(x) + o\left(\frac{1}{N}\right) \quad (8.53)$$

Abbiamo usato $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) \rangle \rightarrow \rho(x)$ e $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) v_i^\alpha \rangle \rightarrow \rho u^\alpha$.

$$C_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \frac{2}{3} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \delta(x - x_i) \frac{|v - u|^2}{2} \rangle + \rho u^\alpha(x) u^\beta(x) = \rho(x) T(x) \delta_{\alpha\beta} + \rho u^\alpha(x) u^\beta(x)$$

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

$$p = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{P}{N} = T\rho - \frac{1}{2} < \sum_{j \neq i, j=1}^N \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\beta - q_j^\beta) \delta(q_i) > \quad (8.54)$$

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

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial V} = \frac{1}{Z\beta} \frac{1}{3V_0} \frac{\partial Z_\lambda}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=1} \\ &= -\frac{1}{3V_0} < \frac{\partial H}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=1} > \\ &= -\frac{1}{3V_0} \frac{1}{2} \left\langle -2 \sum_i |v_i|^2 + \sum_{i,j,i \neq j} \sum_\alpha \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\alpha - q_j^\alpha) \right\rangle \end{aligned}$$

Il fattore V_0 si cancella vincolando una particella a stare nell'origine e si ottiene

$$p = T\rho - \frac{1}{6} \left\langle \sum_{j,j \neq i} \delta(q_i) \sum_\alpha \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\alpha - q_j^\alpha) \right\rangle$$

Abbiamo usato la definizione di temperatura $= \frac{2}{3}$ dell'energia cinetica. Osserviamo infine che il termine $\langle \delta(q_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \rangle$ non dipende dall'indice α e quindi

$$p = T\rho - \frac{1}{2} \left\langle \sum_{j,j \neq i} \delta(q_i) \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) (q_i^\alpha - q_j^\alpha) \right\rangle$$

Ritornando alla legge di conservazione dell'impulso (8.51) 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

$$\frac{\partial(\rho u)(x, t)}{\partial t}(x) + \nabla(\rho u \otimes u) + \nabla p = 0 \quad (8.55)$$

Infine discutiamo l'equazione per Z^4 .

$$\frac{\partial}{\partial t} < Z^4 > = -\nabla_\alpha < W^{4,\alpha} > \quad (8.56)$$

La media che compare a sinistra è nel limite l'energia totale e moltiplicata per la densità. A destra compare la media

$$\langle W^{4,\alpha} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \left\langle \delta(x - x_i) \left[v_i^\alpha Z_i^4 + \frac{1}{2} \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{\partial V}{\partial q_j^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \left(\frac{v_i^\beta + v_j^\beta}{2} \right) \right] \right\rangle \quad (8.57)$$

Esaminiamo il primo termine

$$\frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) v_i^\alpha Z_i^4 \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) [v_i^\alpha - u^\alpha] Z_i^4 \rangle \quad (8.58)$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_i u^\alpha \langle \delta(x - x_i) Z_i^4 \rangle \quad (8.59)$$

Il secondo termine in (8.59) dà il flusso di energia

$$\frac{1}{N} \sum_i u^\alpha \langle \delta(x - x_i) Z_i^4 \rangle = \rho u^\alpha e(x, t) \quad (8.60)$$

Invece per il primo termine si ha ricordando la definizione di Z^4 e il fatto che la media di $v - u$ è zero

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) [v_i^\alpha - u^\alpha] Z_i^4 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) [v_i^\alpha - u^\alpha] \frac{1}{2} |v_i|^2 \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(x - x_i) [v_i^\alpha - u^\alpha] |v_i^\beta - u^\beta|_i \rangle u^\beta = \delta_{\alpha\beta} u^\alpha T \rho \end{aligned}$$

Abbiamo scritto $|v_i|^2 = |u|^2 + 2u^\beta (v_i^\beta - u^\beta) + 2|u|^2$

Infine il secondo termine in (8.57) diventa

$$-\frac{1}{2} \sum_i \langle \delta(x - x_i) \sum_{j:j \neq i} \frac{\partial V}{\partial q_i^\beta} (|q_i - q_j|) (q_i^\alpha - q_j^\alpha) \frac{u^\beta + u^\beta}{2} \rangle - \quad (8.61)$$

$$\frac{1}{2} \sum_i \langle \delta(x - x_i) \sum_{j:j \neq i} \frac{\partial V}{\partial q_i^\beta} (|q_i - q_j|) (q_j^\alpha - q_i^\alpha) \frac{v_i^\beta - u^\beta + v_j^\beta - u^\beta}{2} \rangle \quad (8.62)$$

Il secondo termine in (8.62) è zero ed il primo tende a

$$\delta_{\alpha\beta} u^\alpha (p - \rho T) \quad (8.63)$$

La (8.56) diventa combinando le (8.59)–(8.63)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) = -div(\rho e + pu) \quad (8.64)$$

Navier-Stokes incomprimibile (INS)

Ricordiamo l'osservazione che l'equazioni di Navier-Stokes incomprimibile é invariante sotto il riscaldamento parabolico $x \rightarrow \varepsilon^{-1}x$, $t \rightarrow \varepsilon^{-2}t$ e nel limite in cui il numero di Mach va a zero. Sotto questo scaling ha senso cercare di derivare INS. La derivazione di INS per un sistema di particelle è formale ed è basata su una serie di assunzioni che sono molto più forti di quella di equilibrio locale usata per ricavare formalmente le equazioni di Eulero. Il punto di partenza è l'assunzione che la misura di non-equilibrio può essere espressa in termini di una serie di

potenze in ε . Il primo termine è l'equilibrio locale con parametri dipendenti da ε . Vi è però una correzione all'equilibrio locale che dipende dalle quantità non conservate dalla dinamica (modi veloci) che appaiono ad ordini superiori in ε . Diventano importanti sulla scala di tempo ε^{-2} e danno origine ai termini dissipativi.

Assunzioni principali:

i) Lo spazio delle osservabili invarianti per la dinamica microscopica coincide con le quantità conservate.

ii) alcune correlazioni temporali di equilibrio decadono velocemente

Sotto queste assunzioni è possibile determinare la forma delle correzioni non idrodinamiche all'ordine più basso e concludere che le leggi di conservazione si riducono alle INS.

Si parte dalle leggi di conservazioni sotto il riscaldamento $x \rightarrow \varepsilon^{-1}x, t \rightarrow \varepsilon^{-2}t$. Possiamo dire che i campi empirici sono integrali approssimati del moto nel senso che, definendo l'operatore di Liouville in coordinate microscopiche $q_i = \varepsilon^{-1}x_i$ come

$$\mathcal{L}f(q, v) = \sum_i \left\{ v_i^\alpha \frac{\partial f}{\partial q_i^\alpha} - \sum_{i \neq j} \frac{\partial V}{\partial q_i^\alpha} (|q_i - q_j|) \frac{\partial f}{\partial v_i^\alpha} \right\}$$

e ricordando la definizione delle quantità conservate Z_i^α come funzioni delle variabili microscopiche ξ_i , si ha che

$$\mathcal{L} \left[\varepsilon^d \sum_i f(\varepsilon q_i) Z_i^\alpha \right] = O(\varepsilon)$$

Chiamiamo le osservabili con questa proprietà *integrali locali del moto*. Questo è consistente con la definizione di misura di gibbs locale.

$$G = Z^{-1} \exp \sum_i \sum_{\alpha=0}^{d+1} \lambda^\alpha(\varepsilon q_i) Z_i^\alpha$$

Infatti la distribuzione G è localmente stazionaria per \mathcal{L} nel senso che

$$\mathcal{L}G = O(\varepsilon)$$

In regioni macroscopicamente grandi e microscopicamente piccole si può seguire l'evoluzione del sistema per tempi macroscopici τ in modo che abbia senso considerare proprietà ergodiche del gruppo unitario S_τ generato da \mathcal{L} . Per ogni osservabile locale ϕ di media zero rispetto a G sia

$$\hat{\phi} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \tau^{-1} \int_0^\tau d\tau' S_{\tau'} \phi$$

$\hat{\phi}$ rappresenta la parte di ϕ che è invariante rispetto a S_τ .

Assumiamo che l'insieme delle osservabili invarianti locali contiene solo combinazioni dei campi empirici .

$$(\phi, \psi) = \int dx [\langle \phi \tau_x \psi \rangle - \langle \phi \rangle \langle \psi \rangle]$$

dove $\langle \cdot \rangle$ la media rispetto alla misura di Gibbs locale. La precedente assunzione significa che, definendo il proiettore sullo spazio invariante definito come

$$\mathcal{P}\phi = \sum_{\mu=0}^{d+1} (\phi, Z^\mu) (Z, Z)_{\mu\nu}^{-1} Z^\nu$$

dove $(Z, Z)^{-1}$ denota l'inverso della matrice di elementi (Z_μ, Z_ν) , si ha

$$\hat{\phi} = \mathcal{P}\phi$$

Sia F_ε una soluzione della equazione di Liouville riscaldata

$$\frac{\partial F_\varepsilon}{\partial t} = \varepsilon^{-2} \mathcal{L}^* F_\varepsilon \quad (8.65)$$

dove \mathcal{L}^* è l'aggiunto rispetto alla misura di Liouville dell'operatore di Liouville, formalmente dato da $\mathcal{L}^* = -\mathcal{L}$.

Scriviamo F_ε come una serie ε , $F_\varepsilon = \sum_n \varepsilon^n F^n$, a sostituiamo in (8.65). Otteniamo termini divergenti come $\varepsilon^{-2} \mathcal{L}^* F_0$ e $\varepsilon^{-1} \mathcal{L}^* F_1$. Perciò dobbiamo imporre $\mathcal{L}^* F_0 = 0$, il che implica che F_0 è l'equilibrio globale. Inoltre $\varepsilon^{-1} \mathcal{L}^* F_1$ è finito se $\mathcal{L}^* F_1 = O(\varepsilon)$, il che implica che il termine di ordine ε deve essere una funzione dei campi idrodinamici e i campi non idrodinamici sono di ordine ε^2 .

Per determinare questi contributi a F_ε decomponiamo F_ε in una parte che è Gibbsiana con parametri lentamente dipendenti dalle variabili microscopiche e un resto

$$F_\varepsilon = G_\varepsilon + \varepsilon^2 G_0 R_\varepsilon \quad (8.66)$$

with

$$G_\varepsilon = Z_\varepsilon^{-1} \exp\left\{\sum_{i,\mu} \lambda_\varepsilon^\mu(x_i, t) z_i^\mu\right\}; \quad \lambda_\varepsilon^\mu(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \lambda_n^\mu(x_i, t); \quad \lambda_0^\mu = \text{const.} \quad (8.67)$$

G_0 è il termine di ordine zero, l'equilibrio globale, e tutti i termini idrodinamici sono inclusi in G_ε e assumiamo che in R_ε vi sono solo termini non-idrodinamici

$$\hat{R}_\varepsilon = 0 \quad (8.68)$$

e che

$$R_\varepsilon(t) = R(t) + O(\varepsilon) \quad (8.69)$$

Vogliamo trovare una espressione esplicita di R in termini dei campi empirici in modo che inserendo (8.66) nelle leggi di conservazione mediate rispetto a F_ε , si ottengono equazioni chiuse. Inseriamo l'espansione (8.66) per F_ε nell'equazione di Liouville (8.65) e integriamo rispetto al tempo

$$[G_\varepsilon(t) - G_\varepsilon(0)] + \varepsilon^2 G_0 [R_\varepsilon(t) - R_\varepsilon(0)] = \int_0^t [\varepsilon^{-2} \mathcal{L}^* G_\varepsilon + \mathcal{L}^* G_0 R_\varepsilon] \quad (8.70)$$

Il membro di sinistra di (8.70) va a zero nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$, poichè il solo termine di ordine 1 è costante a causa dell'assunzione su λ_0 . abbiamo

$$\int_0^t \{\varepsilon^{-1} \mathcal{L}^* g_1 + \mathcal{L}^* h\} = - \int_0^t \mathcal{L}^* R + O(\varepsilon) \quad (8.71)$$

dove $g_1 = \sum_{j,\mu} \lambda_1^\mu(x_j, t) z_j^\mu$ e abbiamo usato

$$G_\varepsilon = G_0 \{1 + \varepsilon [g_1 - \langle g_1 \rangle] + \varepsilon^2 h\} + O(\varepsilon^3) \quad (8.72)$$

Qui h è una funzione dei campi invarianti e $\langle \cdot \rangle$ è la media verso G_0 .

Poichè g_1 è una combinazione lineare di invarianti Z con coefficienti dipendenti dalle variabili macroscopiche l'azione di \mathcal{L}^* su g_1 dà una combinazione lineare di correnti w con un

fattore ε . Perciò il primo termine a sinistra di (8.71) è di ordine 1. Inoltre, per lo stesso motivo il secondo termine va a zero. In conclusione R soddisfa l'equazione:

$$\int_0^t [\mathcal{L}^* R - \sum_i \sum_{\mu, \gamma} \frac{\partial \lambda_1^\mu}{\partial x_i^\gamma}(x_i, s) w_i^{\mu\gamma}] = 0 \quad (8.73)$$

Assumiamo che esista una unica soluzione $R(t)$ a (8.73) tale che $\hat{R}(t) = 0$, che scriviamo formalmente come $\mathcal{L}^{*-1} \sum_i \sum_{\mu, \gamma} \frac{\partial \lambda_1^\mu}{\partial x_i^\gamma}(x_i, t) w_i^{\mu\gamma}$. Questa è l'assunzione più forte: dare senso all'inverso \mathcal{L}^* .

Inserendo nelle leggi di conservazione si ottengono le INS e i coefficienti di trasporto, dati da (9.1) e (9.2).

Come esempio troviamo l'equazione per $u^\mu(x, t)$. A causa dello scaling bisogna considerare

$$\bar{z}^\alpha(x) = \varepsilon^{-1} \varepsilon^d \sum_i v_i^\alpha \delta(x_i - x), \quad \alpha = 1, \dots, d$$

Dobbiamo guardare ai termini di ordine ε

$$\begin{aligned} & \left\langle \varepsilon^{d-1} \sum_i f(x_i) v_i^\beta \right\rangle_{F_\varepsilon(t)} - \left\langle \varepsilon^{d-1} \sum_i f(x_i) v_i^\beta \right\rangle_{F_\varepsilon(0)} = \\ & \varepsilon^{-2} \int_0^t ds \left\langle \varepsilon^d \sum_i \sum_{k=1}^d \frac{\partial f}{\partial x_i^k}(x_i) \{v_i^k v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Psi^{\beta k}(\varepsilon^{-1}(x_i - x_j))\} \right\rangle_{F_\varepsilon(s)} + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (8.74)$$

Questa equazione all'ordine più basso dà l'equazione di Navier-Stokes per il campo di velocità u . Si può fa vedere che si ottiene prima di tutto che

$$\operatorname{div} u_0 = 0, \nabla P_0 = \nabla P_1 = 0$$

avendo assunto che $\lambda_0^\mu, \mu = 1, 2, 3 = 0$ per l'assunzione sul numero di Mach.

Il membro di sinistra di (8.74) è dato nel limite da

$$\int dx f(x) \rho [u(x, t) - u(x, 0)] \quad (8.75)$$

Dobbiamo calcolare la media di non equilibrio del tensore di corrente $w^{\beta k}$. A causa del fattore ε^{-2} in (8.66) vanno tenuti in conto i termini di ordine ε^2 . Poniamo $\tilde{w}^{\beta k}$ le correnti con le velocità v_i sostituite da $\tilde{v}_i = v_i - \varepsilon u(x_i)$:

$$w_i^{\beta k} = \tilde{w}_i^{\beta k} + \varepsilon^2 u^k(x_i) u^\beta(x_i) + \varepsilon u^k(x_i) \tilde{v}_i^\beta + \varepsilon u^\beta(x_i) \tilde{v}_i^k \quad (8.76)$$

Sostituendo la (8.66)

$$\begin{aligned} & \varepsilon^{-2} \left\langle w^{\beta k}(x) \right\rangle_{G_\varepsilon} + \left\langle w^{\beta k}(x) R_\varepsilon \right\rangle = \varepsilon^{-2} \left\langle \tilde{w}^{\beta k} \right\rangle_{G_\varepsilon} + \rho u^\beta u^k + \left\langle w^{\beta k} R_\varepsilon \right\rangle + O(\varepsilon) = \\ & \varepsilon^{-2} P_0 + \varepsilon^{-1} P_1 + P_2 + \rho u^\beta u^k + \left\langle R w^{\beta k}(x) \right\rangle + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (8.77)$$

I primi due termini di (8.77) non contribuiscono nel limite perchè P_0 and P_1 sono costanti. Il quarto termine (8.77) dà il termine di trasporto non lineare e P_2 dà la pressione incognita nell'equazione finale.

L'ultimo termine di (8.77) è determinato da R , la parte di non-equilibrio di F_ε , che dipende dai modi "veloci" cioè quelli non conservati. Il loro contributo appare a livello idrodinamico

solo attraverso gli effetti dissipativi e determina l'espressione dei coefficienti di trasporto. Per calcolarli proiettiamo le correnti sullo spazio degli invarianti di \mathcal{L}

$$\bar{w}^{\beta k} = \tilde{w}^{\beta k} - \mathcal{P}\tilde{w}^{\beta k}$$

e notiamo che 8.68 implica

$$\langle R\mathcal{P}w^{\alpha\beta}(x) \rangle = 0 \quad (8.78)$$

Ancora per le proprietà 8.68 di R possiamo usare l'identità $(\mathcal{L}^*)^{-1}\mathcal{L}^*R = R$ e (8.73) per ottenere

$$\begin{aligned} \int dx \sum_{k=1}^d \frac{\partial f}{\partial x^k} \langle \bar{w}^{\beta k}(x)(\mathcal{L}^*)^{-1}\mathcal{L}^*R \rangle &= \langle \mathcal{L}^*R\mathcal{L}L^{-1}\varepsilon^d \sum_i \sum_{k=1}^d \bar{w}_i^{\beta k} \frac{\partial f}{\partial x_i^k}(x_i) \rangle \\ &= \langle \sum_j \sum_{\mu=0}^{d+1} \sum_{l,k=1}^d \frac{\partial \lambda_1^\mu}{\partial x_j^l}(x_j, s) w_j^{\mu l} \mathcal{L}^{-1} \varepsilon^d \sum_i \bar{w}_i^{\beta k} \frac{\partial f}{\partial x_i^k}(x_i) \rangle \end{aligned} \quad (8.79)$$

Notare che \mathcal{L}^{-1} is “ben definito” su \bar{w} per la sottrazione effettuata.

Per trovare l'espressione dei coefficienti di trasporto osserviamo

$$\begin{aligned} \langle \sum_j \frac{\partial \lambda_1^\mu}{\partial x_j^l}(x_j, s) w_j^{\mu l} \mathcal{L}^{-1} \varepsilon^d \sum_i \bar{w}_i^{\beta k} \frac{\partial f}{\partial x_i^k}(x_i) \rangle &= \\ \int dy \frac{\partial \lambda_1^\mu}{\partial y^l}(y, s) \int \varepsilon^{-d} dz \frac{\partial f}{\partial z^k}(z) \langle \bar{w}^{\mu l}(x) \mathcal{L}^{-1} \bar{w}^{\beta k}(z) \rangle \end{aligned} \quad (8.80)$$

La sostituzione della corrente w con \bar{w} è possibile perchè il range di \mathcal{L}^{-1} è ortogonale a $\mathcal{L}Pw$. Poicè lo stato Gibbsiano G_0 è invariante sotto traslazioni su \mathbb{R}^d si ha

$$\text{r.h.s. of 8.80} = \int dy \frac{\partial \lambda_1^\mu}{\partial y^l}(y, s) \int d\xi \frac{\partial f}{\partial y^k}(y + \varepsilon\xi) \langle \bar{w}^{\mu l}(0) \mathcal{L}^{-1} \bar{w}^{\beta k}(\xi) \rangle \quad (8.81)$$

dove è stata fatta la sostituzione z in $\xi = \varepsilon^{-1}(z - y)$ assorbendo il fattore ε^{-d} . Quindi, se $\langle \bar{w}^{\mu l}(0) \mathcal{L}^{-1} \bar{w}^{\beta k}(\xi) \rangle$ decade velocemente per grandi ξ , a meno di $O(\varepsilon)$ si ha

$$\text{r.h.s. of 8.80} = \int dy \frac{\partial \lambda_1^\mu}{\partial y^l}(y, s) \frac{\partial f}{\partial y^k}(y) \int d\xi \langle \bar{w}^{\mu l}(0) \mathcal{L}^{-1} \bar{w}^{\beta k}(\xi) \rangle \quad (8.82)$$

Per concludere, usiamo l'identità formale per cambiare \mathcal{L}^{-1} in $\exp[t\mathcal{L}]$:

$$-\langle \bar{w}^{\mu l}(0) \mathcal{L}^{-1} \bar{w}^{\beta k}(\xi) \rangle = \int_0^\infty d\tau \langle \bar{w}^{\mu l}(\xi, \tau) \bar{w}^{\beta k}(0, 0) \rangle \quad (8.83)$$

Le simmetrie delle correlazioni microscopiche corrente-corrente danno that the correlations for $\mu = 0, d + 1$ vanish and

$$\int d\xi \langle \bar{w}^{\mu l}(\xi, \tau) \bar{w}^{\beta k}(0, 0) \rangle = c(\tau) [\delta_{kl} \delta_{\beta k} + \delta_{k\mu} \delta_{\beta l}] + c'(\tau) \delta_{\beta k} \delta_{l\mu} \quad (8.84)$$

Perciò l'integrale temporale di (8.84) ha solo due coefficienti indipendenti

$$\int_0^\infty d\tau c(\tau) = 2\eta T; \quad \int_0^\infty d\tau c'(\tau) = 2T(\zeta - \frac{2}{d}\eta) \quad (8.85)$$

dove η and ζ sono la shear viscosity e la bulk viscosity rispettivamente. Notare che la sottrazione di $\mathcal{P}\tilde{w}^{\alpha\beta}$ è stata fondamentale perchè la auto-correlazione della parte lenta delle correnti non decade nel tempo.

Poichè $\text{div } u = 0$ il termine proporzionale alla bulk viscosity non appare nella equazione finale. Quindi all'ordine più basso in ε :

$$\int dx f(x) \rho [u^\beta(x, t) - u^\beta(x, 0)] = \int_0^t ds \int dy \sum_{k=1}^d \frac{\partial f}{\partial y^k}(y) \{ \rho u^\beta(y, s) u^k(y, s) - \eta \frac{\partial u^\beta}{\partial y^k}(y, s) \} \quad (8.86)$$

per ogni funzione test f , and quindi l'equazione di Navier-Stokes incompressibile. La viscosità è data da

$$\eta = \frac{1}{2T} \int_0^\infty d\tau \int d\xi \langle \bar{w}^{12}(\xi, \tau) \bar{w}^{12}(0, 0) \rangle \quad (8.87)$$

ed è indipendente dalle coordinate spaziali perchè calcolata all'equilibrio globale. Per la bulk viscosity ζ si ha

$$\zeta = \frac{1}{2d^2T} \int_0^\infty d\tau \int d\xi \left[\left\langle \sum_\alpha \bar{w}^{\alpha\alpha}(\xi, \tau) \sum_\gamma \bar{w}^{\gamma\gamma}(0, 0) \right\rangle - \left\langle \sum_\alpha \bar{w}^{\alpha\alpha} \right\rangle \left\langle \sum_\gamma \bar{w}^{\gamma\gamma} \right\rangle \right] \quad (8.88)$$

Referenze [4] e [10].

9. TEORIA DI ONSAGER

Abbiamo visto come derivare formalmente le equazioni di Eulero a partire dalle equazioni di Newton e abbiamo formulato fenomenologicamente le equazioni di Navier-Stokes. La deduzione formale delle equazioni di Navier-Stokes a partire dalle equazioni di Newton è molto più complessa. Devono comparire termini dissipativi che coinvolgono i cosiddetti coefficienti di trasporto e la derivazione deve fornire una espressione per essi in termini del potenziale di interazione. Queste espressioni sono le formule di Green-Kubo. Inoltre esistono per queste quantità relazioni di reciprocità previste dalla teoria di Onsager. Questi argomenti formano una parte importante della Meccanica Statistica del non-equilibrio. Daremo brevi cenni.

La struttura delle equazioni macroscopiche viste finora, sia quelle idrodinamiche sia quelle nel caso dei processi stocastici, sono sempre della forma

derivata temporale di una grandezza macroscopica = divergenza di una corrente

Si parte con la teoria della risposta lineare. Se una evoluzione coinvolge più quantità macroscopiche x_1, \dots, x_N si ha

$$\frac{\partial x_k}{\partial t} = -\nabla J_k$$

e le correnti sono assunte dipendere linearmente dai gradienti delle x_k . I coefficienti di proporzionalità sono quelli che appaiono nelle equazioni come coefficienti di trasporto.

Onsager ha formulato una teoria macroscopica che permette di determinare delle relazioni tra tali coefficienti, conosciute come relazioni reciproche di Onsager, partendo da assunzioni sulla dinamica microscopica in equilibrio (microreversibilità). Questa è supposta valere, sotto alcune ipotesi, anche nei comportamenti del sistema vicino all'equilibrio. Poichè le equazioni idrodinamiche sono basate sull'ipotesi di equilibrio locale, le relazioni di Onsager permettono di dedurre teoricamente le relazioni di reciprocità tra i coefficienti di trasporto, coinvolti nei processi irreversibili di un sistema fuori dall'equilibrio.

Consideriamo un sistema isolato in condizioni di equilibrio, descritto dai parametri x_i . Vi possono essere nella dinamica di equilibrio del sistema delle fluttuazioni in cui qualche quantità x_i si allontana dal suo valore di equilibrio. Per piccole deviazioni si può assumere

$$\frac{d}{dt}x_i = -\lambda_{ij}x_j$$

Possiamo scrivere per l'entropia

$$S \approx S_0 - \sum_{jk} \beta_{jk} x_j x_k$$

$$\beta_{jk} = \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}$$

trascurando i termini di ordine successivo per piccole deviazioni. Il termine del primo ordine è zero perchè siamo in equilibrio.

Definiamo le forze generalizzate

$$X_i = -\frac{\partial S}{\partial x_i} = \sum_j \beta_{ji} x_j$$

da cui

$$\frac{d}{dt}x_i = -\sum_{ij} \gamma_{ij} x_j, \quad \gamma = \lambda \beta^{-1}.$$

X_i viene anche detta la grandezza termodinamicamente coniugata di x_i . Abbiamo mediando all'equilibrio

$$\langle X_i x_j \rangle = - \int e^{S[x]} \frac{\partial S}{\partial x_i} x_j = - \int \frac{\partial e^{S[x]}}{\partial x_i} x_j = \int e^{S[x]} \frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \delta_{ij}$$

da cui

$$\langle X_i X_j \rangle = \beta_{ij}, \quad \langle x_i x_j \rangle = \beta_{ij}^{-1}$$

Assumiamo la proprietà di reversibilità temporale delle funzioni di correlazione si ha

$$\langle x_i(t + \tau) x_j(t) \rangle = \langle x_i(t - \tau) x_j(t) \rangle = \langle x_j(t + \tau) x_i(t) \rangle$$

Questa proprietà è essenzialmente la condizione di reversibilità temporale vista per una catena di Markov (bilancio dettagliato).

Si ha

$$\frac{1}{\tau} \langle x_i(t + \tau) x_j(t) \rangle - \langle x_i(t) x_j(t) \rangle = \frac{1}{\tau} \langle x_j(t + \tau) x_i(t) \rangle - \langle x_i(t) x_j(t) \rangle$$

cioè

$$\langle \dot{x}_i x_j \rangle = \langle x_i \dot{x}_j \rangle.$$

Si ha poichè

$$\langle \dot{x}_i x_j \rangle = \gamma_{ij}, \quad \langle x_i \dot{x}_j \rangle = \gamma_{ji}$$

$$\gamma_{ji} = \gamma_{ij}$$

L'ultima relazione è la proprietà di simmetria nota come proprietà di reciprocità dei coefficienti di Onsager.

Una analisi simile si può fare in una situazione di equilibrio locale, in cui il comportamento delle grandezze macroscopiche, che dipendono in tal caso anche da variabili spaziali, è descritto da equazioni differenziali.

Fluttuazione-dissipazione

L'assunzione principale della teoria è la cosiddetta ipotesi di Onsager di regressione temporale, che afferma che le fluttuazioni all'equilibrio decadono come le perturbazioni dall'equilibrio indotte da forze e quindi nel caso di fenomeni dissipativi i coefficienti di trasporto devono essere collegati alle correlazioni temporali, anche se in questo caso le forze non sono esterne ma generate dinamicamente. Ci sono molti casi in cui è possibile provare teoricamente la validità di questa assunzione.

La relazione di Einstein tra il coefficiente di diffusione nel moto Browniano e la viscosità

$$v\nu = D\nabla\nu, \quad D = \frac{kT}{6\pi\eta a}$$

è un esempio di relazione fluttuazione dissipazione. Il coefficiente di viscosità entra nella equazione del moto di una particella in un fluido ed è legata alla forza di attrito, quindi al modo in cui il moto decade per effetto delle forze di attrito (lato dissipazione). D è invece l'intensità delle fluttuazioni (lato fluttuazione). La sua espressione si ricava dicendo che D è dato dal limite (dalla formula 7.2)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle x(t)^2 \rangle = 2D$$

Per il processo di Langevin

$$\langle x(t)^2 \rangle = \int_0^t ds \int_0^t ds' \langle v(s)v(s') \rangle \approx t \int_0^t ds \langle v(s)v(0) \rangle$$

da cui

$$D = \int_0^\infty ds \langle v(s)v(0) \rangle$$

Quindi D è espresso in termini di un integrale della funzione di correlazione della "corrente". Come visto in precedenza, la correlazione decade esponenzialmente e quindi l'integrale è finito.

Un altro esempio viene dalla teoria della equazione di Boltzmann. In un opportuno limite di scala si ricava l'equazione di Navier-Stokes incomprimibile dall'equazione di Boltzmann e in particolare si ottiene una forma esplicita della viscosità ν e la conduttività κ

$$\nu = - \langle (|v_i v_j - \frac{1}{3}|v|^2 I) \mathcal{L}^{-1} (|v_i v_j - \frac{1}{3}|v|^2 I) \rangle \quad (9.1)$$

$$k = - \langle \frac{1}{2} (|v|^2 - 5)v_i, \mathcal{L}^{-1} \frac{1}{2} (|v|^2 - 5)v_i \rangle \quad (9.2)$$

dove \mathcal{L} è l'operatore di Boltzmann linearizzato che regola l'evoluzione di una perturbazione dall'equilibrio.

Si può formalmente rappresentare \mathcal{L}^{-1} come

$$\mathcal{L}^{-1} f = \int_0^\infty ds e^{-s\mathcal{L}} f(s)$$

e i coefficienti di trasporto sono espressi in termini di funzioni di correlazione della corrente di impulso e quella di flusso di calore

$$\nu = - \int_0^\infty ds \langle (|v_i v_j - \frac{1}{3}|v|^2 I)(s) (|v_i v_j - \frac{1}{3}|v|^2 I)(0) \rangle \quad (9.3)$$

$$k = - \int_0^\infty ds \langle \frac{1}{2} (|v|^2 - 5)v_i(s) \frac{1}{2} (|v|^2 - 5)v_i(0) \rangle \quad (9.4)$$

Queste espressioni sono un esempio delle formule di Green-Kubo e una conferma della teoria della regressione di Onsager. Naturalmente perchè l'integrale esista finita occorre che

le correlazioni temporali decadano velocemente. Nel caso di Boltzmann si ha decadimento esponenziale dovuto alle proprietà di \mathcal{L} .

Formule di Green-Kubo analoghe possono essere ricavate formalmente per un sistema di particelle interagenti nel limite idrodinamico, con la differenza che al posto di \mathcal{L} compare l'operatore di Liouville e le correnti sono quelle collegate alla dinamica microscopica dei campi conservati e danno luogo alle formule ricavate nella sezione precedente.

10. SISTEMI DI PARTICELLE INTERAGENTI STOCASTICI

10.1. Processo di esclusione. Vediamo un esempio di processo stocastico diverso da quelli considerati finora.

Un processo stocastico $x(t)$ a valori discreti è detto processo a salto se per quasi tutte le traiettorie ω esiste $\varepsilon(t, \omega)$ tale che $x(t+s, \omega) = x(t, \omega)$ per ogni $s \in [t, t + \varepsilon(t, \omega)]$. In altri termini le traiettorie del processo appaiono a gradino. Il processo è regolare se il numero di discontinuità è finito in un intervallo di tempo finito.

Definiamo il processo di esclusione semplice (SEP)

Consideriamo un sottinsieme Λ di un reticolo d -dimensionale Z^d con condizioni al contorno periodiche e una variabile di occupazione del sito x , $\eta(x) = 0, 1$ il cui significato è che in x può esserci o meno una particella. Una configurazione del sistema è data da $\eta := \{\eta(x)\}_{x \in \Lambda}$. Definiamo una evoluzione che permette transizioni da una configurazione all'altra nel seguente modo:

$$T_{xy}(\eta) = \eta^{xy} := \eta^{xy}(z) = \begin{cases} \eta(z) & \text{se } z \neq x, y \\ \eta(x) & \text{se } z = y \\ \eta(y) & \text{se } z = x \end{cases}, \quad (10.1)$$

In parole, una particella salta da un sito x ad un altro prossimo vicino y solo se quest'ultimo non è occupato e l'operatore T opera la transizione da una configurazione η in η^{xy} in cui sono stati scambiati i valori di η tra i siti x e y . Gli istanti di salto sono determinati da un orologio di poisson (un processo di Poisson sui tempi con distribuzione esponenziale dei tempi con una data intensità). Quando l'orologio, indipendentemente per ogni sito, suona la particella salta con probabilità per unità di tempo (rate)

$$c(x, y, \eta) = \eta(x)(1 - \eta(y))p(y - x)$$

$p(y - x) = 0, (y - x) \neq 1, \sum_z p(z) = 1, p(0) = 0$. Il fattore $\eta(x)(1 - \eta(y))$ dice che non avviene il salto se non c'è una particella in x o se c'è una particella in y . Quindi la particella non può saltare sempre, c'è una regola di esclusione, da cui il nome. Possiamo vedere il processo come un sistema di particelle sul reticolo interagenti, la regola di esclusione è una barriera di potenziale tra due particelle vicine.

L'orologio di poisson è un processo di Poisson sui tempi con distribuzione esponenziale dei tempi con una data intensità: $P(\tau > t) = e^{-\lambda t}$. Si considera un orologio per ogni sito, quindi un tempi di salto τ_x e i $\tau_x, x \in \Lambda$ sono indipendenti. Quindi, se $\eta(x) = 1$,

$$f(\eta(t)) - f(\eta) = \begin{cases} 0 & \text{con prob. } e^{-\lambda t} \\ [f(\eta^{xy}) - f(\eta)] & \text{con prob. } 1 - e^{-\lambda t} \end{cases} \quad (10.2)$$

La definizione di generatore è la stessa

$$Lf(\bar{\eta}) \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{E[f(\eta(t)) | \eta = \bar{\eta}] - f(\bar{\eta})}{t}$$

La sua espressione esplicita è (per $\lambda = 1$)

$$(Lf)(\eta) = \sum_{xy} c(x, y, \eta)[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]$$

Se $p(z) = p(-z)$ si parla di processo di esclusione simmetrico (SSEP), cioè la particella salta con uguale probabilità da x a y e da y a x , altrimenti viene detto asimmetrico (ASEP).

Il processo conserva il numero totale di particelle: $\sum_{x \in \Lambda} \eta(x)$ e quindi è irriducibile solo sui sottinsiemi di configurazioni a numero totale fissato.

L'operatore duale è determinato da

$$\sum_{\eta} (Lf)(\eta)g(\eta) = \sum_{\eta} (L^*g)(\eta)f(\eta)$$

Si può verificare che $L^* = L$ nel caso di processo simmetrico.

$$\sum_{\eta} (Lf)(\eta)g(\eta) = \sum_{\eta} g(\eta) \sum_{xy} [\eta(x)(1 - \eta(y))[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]]$$

sotto lo scambio $\eta \rightarrow \eta^{xy}$ si ha

$$= - \sum_{\eta} g(\eta^{xy}) \sum_{xy} [\eta(y)(1 - \eta(x))[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]]$$

perchè l'ultimo termine in parentesi quadra cambia segno. Scambiamo nella somma x con y . Si ha

$$= - \sum_{\eta} g(\eta^{xy}) \sum_{xy} [\eta(x)(1 - \eta(y))[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]]$$

Prendendo la somma si ha

$$\sum_{\eta} (Lf)(\eta)g(\eta) = -\frac{1}{2} \sum_{\eta} [g(\eta^{xy}) - g(\eta)] \sum_{xy} [\eta(x)(1 - \eta(y))[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]]$$

procedendo al contrario sulla differenza $[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]$ si ottiene

$$\sum_{\eta} (Lf)(\eta)g(\eta) = \sum_{\eta} [g(\eta^{xy}) - g(\eta)] \sum_{xy} [\eta(x)(1 - \eta(y))f(\eta)]$$

Il generatore può essere scritto come (perchè T_{xy} è simmetrico)

$$\frac{1}{2}((L + L^*)f)(\eta) = \sum_{xy} \frac{1}{2}[c(x, y, \eta) + c(y, x, \eta)][f(\eta^{xy}) - f(\eta)] = \frac{1}{4}[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]$$

$$c(x, y, \eta) + c(y, x, \eta) = \frac{1}{2}[\eta(x)(1 - \eta(y)) + \eta(y)(1 - \eta(x))] = 0, 1$$

è zero se $\eta^{xy} = \eta$ altrimenti è 1. da cui

$$(Lf)(\eta) = \sum_{xy} \frac{1}{4}[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]$$

Si ricorda che ρ è invariante se $L^*\rho = 0$. Quindi è una misura invariante ogni distribuzione uniforme. A causa della normalizzazione $\frac{1}{|\Lambda|} \int \rho = 1$ si ha $\rho = 1$. Notare che $L^*\rho = 0$ anche

per una funzione che dipende dalla quantità conservata $\sum_x \eta_x$, da cui esiste una famiglia μ_λ di misure invarianti prodotto con parametro λ

$$\mu_\lambda(\eta) = \frac{1}{Z_\Lambda} \prod_x e^{\lambda \eta_x} = \prod_x \frac{e^{\lambda \eta(x)}}{1 + e^\lambda}$$

Il sistema all'equilibrio è descritto da una misura di Gibbs prodotto. In questo caso esiste solo un parametro, a differenza della vera misura di Gibbs, perchè la dinamica ha una sola legge di conservazione. μ_λ è una misura invariante perchè

$$\mu_\lambda(\eta^{xy}) = \mu_\lambda(\eta)$$

Consideriamo la densità empirica $\rho_\Lambda = \frac{1}{\Lambda} \sum_x \eta(x)$. La sua attesa rispetto alla misura invariante μ_λ

$$E[\rho_\Lambda] = \frac{1}{\Lambda} \sum_x E[\eta(x)] = \frac{1}{\Lambda} \sum_x \sum_{\eta(x)=0,1} \frac{e^{\lambda \eta(x)}}{1 + e^\lambda} = \frac{e^\lambda}{1 + e^\lambda} := \rho$$

La densità ρ e λ sono variabili coniugate (analogo alla densità e al potenziale chimico).

Ergodicità della misura invariante

Consideriamo una generica osservabile f . Possiamo scrivere

$$\frac{\partial}{\partial t} E[f(\eta(t)|\eta)] = (Lf)(\eta)$$

Moltiplichiamo per $f(\eta)$ e integriamo rispetto alla misura invariante μ (prendiamo l'attesa). Si ha, per L simmetrico

$$\begin{aligned} & \int d\mu f(\eta) \frac{\partial}{\partial t} E[f(\eta(t)|\eta)] = \int d\mu f(\eta) Lf(\eta) \\ & = \frac{1}{4} \int d\mu f(\eta) \sum_{x,y} [f(\eta^{xy}) - f(\eta)] = -\frac{1}{8} \int d\mu f(\eta) \sum_{x,y} [f(\eta^{xy}) - f(\eta)]^2 \end{aligned}$$

da cui si ha che f è invariante sotto l'evoluzione se e solo se $f(\eta^{xy}) = f(\eta)$ per tutte le coppie x, y . Una tale f deve dipendere da $\sum_x \eta(x) = N$ e quindi sul sottospazio a N fissato è una costante. Per il criterio di ergodicità che dice che se ogni funzione invariante è costante la misura è ergodica si ottiene la proprietà di ergodicità del sistema dinamico.

10.2. Equazione di Burgers. Questo processo ha il ruolo nel campo delle dinamiche stocastiche che ha il modello di Ising per i sistemi di spin, nel senso che è un processo basilare e molto interessante. Inoltre il suo comportamento "idrodinamico" è rilevante.

Caso simmetrico Consideriamo il comportamento del sistema su scale di spazio ε^{-1} e di tempo ε^{-2} . Nel caso del processo simmetrico un riscaldamento di spazio ε^{-1} e di tempo ε^{-1} porta ad un comportamento banale nel limite. Il riscaldamento temporale viene letto nel generatore come

$$L_\varepsilon = \varepsilon^{-2} \frac{1}{4} [f(\eta^{xy}) - f(\eta)]$$

Per il riscaldamento spaziale, sia $J(\varepsilon x)$ una funzione che varia lentamente sul reticolo. La quantità

$$Z_\varepsilon = \varepsilon^d \sum_x J(\varepsilon x) \eta(x)$$

dà una misura della massa totale in variabili macroscopiche $y = \varepsilon x$.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Z_\varepsilon = \int dy J(y) \rho(y)$$

Lo studio dell'evoluzione di Z_ε su scale di tempi ε^{-2} nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dovrebbe dare una equazione di evoluzione per la densità. Ricordiamo l'equazione di Kolmogorov

$$\frac{d}{dt} E[Z_\varepsilon | t] = LZ_\varepsilon$$

Definiamo corrente w_ε l'azione di L su Z_ε .

Valutiamo $w_\varepsilon = LZ_\varepsilon$. Sia e un incremento di modulo 1, $e = \pm e_\alpha, \alpha = 1 \dots d$

$$L\eta(x) = \frac{\varepsilon^{-2}}{2} \sum_{y, e > 0} [(\eta^{y, y+e})_x - \eta(x)]$$

Si ha

$$(\eta^{y, y+e})_x - \eta(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \neq y, y+e \\ \eta(y+e) - \eta(y) & \text{se } x = y \\ \eta(y) - \eta(y+e) & \text{se } x = y+e \end{cases}, \quad (10.3)$$

da cui

$$LZ_\varepsilon = \frac{\varepsilon^{d-2}}{2} \sum_{y, e > 0} [\eta(y+e) - \eta(y)][J(\varepsilon y) - J(\varepsilon(y+e))]$$

Usiamo la notazione di gradiente discreto $\nabla_e f(x) = f(x+e) - f(x)$ da cui $[\eta(y+e) - \eta(y)] = \nabla_e \eta(x)$ e $[J(\varepsilon y) - J(\varepsilon(y+e))] = -\nabla_e [J(\varepsilon y)]$. Ora possiamo "integrare per parti" sul reticolo.

$$\sum_{y, e > 0} [\eta(y+e) - \eta(y)][J(\varepsilon y) - J(\varepsilon(y+e))] = \sum_{y, e > 0} [J(\varepsilon y)\eta(y+e) - J(\varepsilon y)\eta(y) - J(\varepsilon(y+e))\eta(y+e) + J(\varepsilon(y+e))\eta(y)]$$

Usiamo il fatto che abbiamo condizioni al contorno periodiche per cambiare $y+e$ in y nel terzo termine e y in $y-e$ nel primo

$$+J(\varepsilon y)\eta(y+e) - J(\varepsilon(y+e))\eta(y+e) = +J(\varepsilon(y-e))\eta(y) - J(\varepsilon(y))\eta(y)$$

$$\sum_{y, e} [\eta(y+e) - \eta(y)][J(\varepsilon y) - J(\varepsilon(y+e))] = \sum_{y, e} [J(\varepsilon(y-e)) - 2J(\varepsilon y) + J(\varepsilon(y+e))]\eta(y)$$

il termine in parentesi è l'espressione del Laplaciano discreto di J , $\varepsilon^2 \Delta J(\varepsilon y)$.

$$LZ_\varepsilon = \frac{\varepsilon^d}{2} \sum_{y, e} \Delta J(\varepsilon y)$$

Nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\frac{d}{dt} \int dy J(y) \rho(y, t) = \frac{1}{2} \int dy (\Delta J)(y) \rho(y, t) = \frac{1}{2} \int dy (\Delta \rho)(y) J(y)$$

da cui otteniamo l'equazione per la densità

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(y, t) = \frac{1}{2} (\Delta \rho)(y, t)$$

che è l'equazione del calore.

Caso asimmetrico Prima di tutto troviamo il duale L^* in questo caso.

$$\sum_{\eta} g(\eta) Lf(\eta) = \sum_{\eta} g(\eta) \sum_{xy} [\eta(x)(1 - \eta(y))p(y - x)[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]]$$

Prima di tutto troviamo il duale L^* in questo caso.

$$\sum_{\eta} g(\eta) Lf(\eta) = \sum_{\eta} g(\eta) \sum_{xy} [\eta(x)(1 - \eta(y))p(y - x)[f(\eta^{xy}) - f(\eta)]]$$

sotto lo scambio $\eta \rightarrow \eta^{xy}$ solo nel primo termine si ha

$$\begin{aligned} &= \sum_{xy} \sum_{\eta} g(\eta^{xy}) [\eta(y)(1 - \eta(x))f(\eta)p(y - x) - \sum_{xy} \sum_{\eta} [\eta(x)(1 - \eta(y))p(y - x)f(\eta)g(\eta)] \\ &= \sum_{xy} \sum_{\eta} [\eta(y)(1 - \eta(x))] [g(\eta^{xy}) - g(\eta)] f(\eta) p(x - y) \\ &+ \sum_{xy} \sum_{\eta} [\eta(y)(1 - \eta(x)) - \eta(x)(1 - \eta(y))] p(y - x) f(\eta) g(\eta) \end{aligned}$$

Abbiamo aggiunto e sottratto il termine

$$\sum_{xy} \sum_{\eta} [\eta(y)(1 - \eta(x))] p(y - x) f(\eta) g(\eta)$$

L'ultimo termine senza la somma su η è zero. Infatti

$$= \sum_{xy} [\eta(x) - \eta(y)] p(y - x) = \sum_e p(e) \sum_x [\eta(x + e) - \eta(x)] = 0$$

Nel primo termine basta scambiare $x \rightarrow y$ per ottenere

$$L^*g(\eta) = \sum_{xy} \sum_{\eta} [\eta(x)(1 - \eta(y))] [g(\eta^{xy}) - g(\eta)] f(\eta) p(x - y)$$

cioè il duale si ottiene mettendo $p(x - y)$ al posto di $p(y - x)$. Se ρ è costante si ha $L^*\rho = 0$. Anche in questo caso $L^*\rho = 0$ anche per una funzione che dipende dalla quantità conservata $\sum_x \eta_x$.

Nel caso del processo di esclusione asimmetrico, la situazione del comportamento macroscopico è molto più complicata. Conviene considerare prima il comportamento su scale temporali più brevi, $t \sim \varepsilon^{-1}$. Di nuovo bisogna valutare la corrente

$$\begin{aligned} w_{\varepsilon} &= LZ_{\varepsilon} = \varepsilon^{d-1} \sum_x J(\varepsilon x) \sum_y \sum_{|z-y|=1} c(z, y, \eta) [\eta(x)^{y,z}(x) - \eta(x)] \\ &= \varepsilon^{d-1} \sum_y \sum_{|z-y|=1} c(z, y, \eta) [J(\varepsilon y)(\eta(z) - \eta(y)) + J(\varepsilon z)(\eta(y) - \eta(z))] \\ &= \varepsilon^{d-1} \sum_y \sum_{|z-y|=1} (J(\varepsilon z) - J(\varepsilon y)) c(z, y, \eta) (\eta(y) - \eta(z)) \\ &= \varepsilon^d \sum_y \sum_{e>0} \nabla_e J(\varepsilon y) w_{y,e} \end{aligned}$$

dove

$$w_{y,e} = \eta(y)(1 - \eta(y + e))p(e) - p(-e)\eta(y + e)(1 - \eta(y))$$

Avendo usato

$$\begin{aligned} [\eta(y) - \eta(z)]\eta(z)(1 - \eta(y)) &= \eta(z)(1 - \eta(y))\eta(z) + \eta(y)\eta(z)(1 - \eta(y)) \\ &= -\eta(z) + \eta(z)\eta(y) + \eta(z)\eta(y) - \eta(y)\eta(z) = -\eta(z)(1 - \eta(y)) \end{aligned}$$

e quindi

$$\sum_y \sum_{|z-y|=1} (J(\varepsilon z) - J(\varepsilon y))c(z, y, \eta)(\eta(y) - \eta(z)) = - \sum_y \sum_{e>0} (J(\varepsilon(y+e)) - J(\varepsilon y))(\eta(y+e)(1 - \eta(y))p(-e))$$

La somma su e si divide in due pezzi

$$\begin{aligned} &\sum_y \sum_{e>0} (J(\varepsilon(y+e)) - J(\varepsilon y))(\eta(y+e)(1 - \eta(y))p(-e)) \\ &= \sum_y \sum_{e>0} (J(\varepsilon(y+e)) - J(\varepsilon y))(\eta(y+e)(1 - \eta(y))p(-e)) + \sum_y \sum_{e>0} (J(\varepsilon(y-e)) - J(\varepsilon y))(\eta(y-e)(1 - \eta(y))p(e)) \end{aligned}$$

La seconda somma con $y - e = y'$ diventa

$$\sum_y \sum_{e>0} (J(\varepsilon(y')) - J(\varepsilon(y'+e)))(\eta(y')(1 - \eta(y+e))p(-e))$$

Mettendo insieme le due somme si ottiene l'espressione per la corrente.

Si ha così la tipica struttura del secondo membro dell'equazione in cui compare la divergenza di una corrente. Si deve poi prendere l'attesa condizionata e passare al limite. Il membro di sinistra tende alla derivata temporale della densità e per chiudere l'equazione bisogna ottenere per la attesa della corrente una espressione chiusa nella densità.

Notare che nel caso simmetrico l'equazione si era chiusa automaticamente perchè la corrente era lineare in η ed aveva una struttura di gradiente. Entrambi gli aspetti non sono veri per ASEP.

E' in questo punto che si usa l'ipotesi di equilibrio locale, cioè si suppone il sistema distribuito con la misura invariante locale prodotto, in cui il parametro λ non è più costante come all'equilibrio, ma dipende lentamente da x (funzione di variabile macroscopica):

$$\mu_\lambda(\eta) = \frac{1}{Z_\Lambda} \Pi_x e^{\lambda(\varepsilon x)\eta_x} = \Pi_x \frac{e^{\lambda(\varepsilon x)\eta(x)}}{1 + e^\lambda}$$

La variabile coniugata è data dall'attesa di η rispetto a questa misura ed è $\rho(\varepsilon x)$. Basta ora calcolare l'attesa della corrente rispetto a questa misura e poichè è una misura prodotto si ha che la media del prodotto è il prodotto delle medie

$$E[\eta(y)\eta(y+e)] = E[\eta(y)]E[\eta(y+\varepsilon)]$$

e per la corrente

$$w_{y,e} = (p_e - p_{-e})\rho(\varepsilon y)(1 - \rho(\varepsilon y)).$$

Passando al limite si ottiene l'equazione

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(y, t) = \frac{\partial}{\partial y}(2p - 1)[\rho(y, t)(1 - \rho(x, t))]$$

detta equazione di Burgers inviscida.

A volte l'equazione di Burgers è scritta in una forma alternativa. Sia $2p - 1 = b$

$$b \frac{\partial}{\partial y}[\rho(y, t)(1 - \rho(x, t))] = b(1 - 2\rho) \frac{\partial}{\partial y}\rho$$

Con la sostituzione $1 - 2\rho = u$ si ottiene

$$b(1 - 2\rho) \frac{\partial}{\partial y} \rho = bu \frac{\partial}{\partial y} u$$

da cui

$$\frac{\partial}{\partial t} u(y, t) + 2bu \frac{\partial}{\partial y} u = 0$$

Da questo conto si vede che se si riscalda il tempo come ε^{-2} nel caso asimmetrico il termine di trasporto non lineare nell'equazione di Burgers diverge come ε^{-1} . Per ottenere un limite finito si può considerare una asimmetria $\delta = p(e) - p(-e)$ di ordine ε . La corrente si può in generale decomporre in una parte gradiente (simmetrica) con coefficiente $p(e) + p(-e)$ e una parte non gradiente (antisimmetrica) con coefficiente δ . Il primo termine genera il Laplaciano mentre il secondo termine si può far vedere che va a zero nel limite. Si ottiene così l'equazione di Burgers viscosa

$$\frac{\partial}{\partial t} u(y, t) + 2bu \frac{\partial}{\partial y} u = \frac{1}{2} \Delta u$$

Per ottenere un coefficiente di viscosità non banale è possibile un approccio simile a quello del limite incompressibile. Si sceglie uno stato iniziale in cui la densità è una perturbazione di ordine ε di un profilo omogeneo:

$$\rho_0(\varepsilon x) = \frac{1}{2} - \varepsilon h_0(z)$$

Assumendo che questa forma persista nel tempo, la corrente macroscopica sarebbe

$$J = \frac{1}{4} + \varepsilon^2 h^2,$$

e l'equazione per la densità della forma

$$\partial_t h + \frac{\partial}{\partial x} h^2 = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} h$$

Il coefficiente di diffusione D , che ha una forma data dalle relazioni di Green-Kubo, viene dalla parte antisimmetrica della corrente. Tale parte può essere decomposta in una parte gradiente, moltiplicata per D e una parte della forma LF per qualche F , che nel limite non dà contributo.

Questa equazione può essere ottenuta rigorosamente nel limite solo per $d > 2$ e in tal caso l'espressione di D è

$$D_{i,j} = \delta_{i,j} + (2\chi)^{-1} \int_0^\infty dt \sum_{x \in Z^d} E^\mu [\sigma_{e_i} e^{Lt} \sigma_{x, x+e_j}]$$

dove μ è la misura invariante di parametro corrispondente a $\rho = \frac{1}{2}$ and $\chi = \frac{1}{4}$ is the compressibility. Inoltre

$$\sigma_{x, x+e_j} = \bar{w}_{x, x+e_j} - P[w_{x, x+e_j}]$$

con $\bar{w}_{x, x+e_j} = w_{x, x+e_j} - E[w_{x, x+e_j}]$ e $x P$ il proiettore sullo spazio nullo dell'operatore.

Referenze [10] e [4].

11. DINAMICA DEI FLUIDI

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

$$\int_{A_t} dx g(x, t)$$

e a valutarne la loro derivata temporale. A questo scopo ricordiamo il Teorema del trasporto

Se g ed u sono differenziabili in A_t , per $t \in [0, \bar{t}]$ e Φ è regolare, allora

$$\frac{d}{dt} \int_{A_t} dx g(x, t) = \int_{A_t} dx \left[\frac{Dg}{Dt} + g \operatorname{div} u \right] (x, t). \quad (11.1)$$

Osservazione 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.

Passeremo ora a formulare le leggi fondamentali della Meccanica dei sistemi continui.

11.1. Leggi di bilancio. Scriviamo le leggi di bilancio per un fluido macroscopico, bilancio della massa, dell'impulso e dell'energia.

I moti di un sistema continuo soddisfano un sistema di equazioni locali della forma (in assenza di forze esterne)

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) &= \operatorname{div} S, \\ \rho(\partial_t e + u \cdot \nabla_x e) &= \operatorname{Tr}(\nabla_x u S) - \operatorname{div} q \end{aligned} \quad (11.2)$$

che rappresentano le leggi di bilancio della massa, dell'impulso e dell'energia, dove S è il tensore degli sforzi che rappresenta l'azione delle altre parti del sistema su una zona data e q è il vettore flusso di calore che tiene conto dei fenomeni di trasferimento di calore

Una forma alternativa di queste equazioni che spesso risulta utile è

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t (\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u - S] &= 0, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + e \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + e \right) - Su + q \right] &= . \end{aligned} \quad (11.3)$$

11.2. Equazioni idrodinamiche. *Fluido ideale (o di Eulero).*

I modelli di sistema continuo di cui ci occuperemo saranno esclusivamente i *fluidi*.

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

$$\varphi(x, t, n) = -p(x, t)n \quad (11.4)$$

Il campo $p(x, t)$ è detto *pressione*.

Per il tensore degli sforzi si ha allora

$$S_{i,j} = -p\delta_{i,j}. \quad (11.5)$$

che è quello che succede in condizioni idrostatiche.

Il fluido ideale è caratterizzato dalle seguenti proprietà:

- (1) *il fluido ideale non è in grado di esplicitare sforzi di taglio;*
- (2) *il fluido ideale non è conduttore di calore.*

La condizione 1) vuol dire per un fluido ideale

$$S_{i,j} = -p\delta_{i,j} \quad (11.6)$$

La condizione 2) equivale ad assumere che non vi sia flusso di calore (*fluido termicamente isolante*):

$$q = 0. \quad (11.7)$$

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. Sulla base della Termodinamica, occorre assegnare una *equazione di stato*, cioè una funzione regolare $\hat{p}(\rho, e)$ tale che per ogni x e t la pressione sia data dalla relazione

$$p = \hat{p}(\rho, e). \quad (11.8)$$

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 $p(\rho, T)$ e $e(\rho, T)$ in modo che per ogni x e t l'energia interna specifica e la pressione siano date dalle relazioni

$$e(\rho(x, t), T(x, t)), \quad p(\rho(x, t), T(x, t)). \quad (11.9)$$

Utilizzando le precedenti assunzioni nelle (11.2) e (11.3), si ottengono le equazioni

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p(\rho, T) &= 0, \\ \rho(\partial_t e(\rho, T) + u \cdot \nabla_x e(\rho, T)) + p(\rho, T) \operatorname{div} u &= 0. \end{aligned} \quad (11.10)$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t (\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p(\rho, T) \mathbf{I}] &= 0, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + e(\rho, T) \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + e(\rho, T) + p(\rho, T) \right) \right] &= 0. \end{aligned} \quad (11.11)$$

Le equazioni (11.11) appaiono come un sistema di cinque equazioni differenziali a derivate parziali nelle cinque funzioni incognite ρ , u e T che 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*.

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

$$p = R\rho T, \quad e = c_v T. \quad (11.12)$$

la costante R prende il nome di *costante dei gas perfetti* mentre

$$c_v = \frac{3}{2}R \quad (11.13)$$

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

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p &= 0, \\ \frac{3}{2}\rho(\partial_t T + u \cdot \nabla_x T) + p \operatorname{div} u &= 0, \end{aligned} \quad (11.14)$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p \mathbf{I}] &= 0, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \frac{3}{2} T \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + \frac{5}{2} T \right) \right] &= 0. \end{aligned} \quad (11.15)$$

con

$$p = \rho T. \quad (11.16)$$

Una notevole proprietà del fluido ideale, che segue dalle 11.14 è la seguente: si ponga

$$s(\rho, T) = -\log \left[\frac{\rho}{T^{3/2}} \right]. \quad (11.17)$$

Risulta allora

$$\frac{Ds}{Dt} = \left(-\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{3}{2} \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} \right) = \frac{1}{T} \left(\frac{p}{\rho} \operatorname{div} u + \frac{3}{2} \frac{DT}{Dt} \right) = 0. \quad (11.18)$$

Per ottenere l'equazione (11.18) basta differenziare la (11.17), sostituire la $D\rho/Dt$ usando l'equazione di continuità, usare le (11.12) ed infine l'ultima delle (11.14).

La quantità s è denominata *entropia specifica (termodinamica)*. La giustificazione di tale nome richiederebbe l'introduzione di un contesto più generale, nel quale la (11.18) 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

$$T\rho \frac{Ds}{Dt} = p \operatorname{div} u + \rho \frac{De}{Dt}. \quad (11.19)$$

Non discuteremo tale aspetto in queste note. Osserviamo soltanto che, nell'ambito della Teoria cinetica dei gas, la (11.18) è conseguenza del *Teorema H* di Boltzmann.

La (11.18) può sostituire la terza delle equazioni (11.14), in quanto è ad essa equivalente. È a volte conveniente considerare, in luogo di tale sistema, il sistema

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p &= 0, \\ \partial_t s(\rho, T) + u \cdot \nabla_x s(\rho, T) &= 0, \end{aligned} \quad (11.20)$$

In particolare, 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

$$p = B\rho^\gamma, \quad (11.21)$$

con

$$\gamma = \frac{5}{3}, \quad B = \exp\left[\frac{2s_0}{3}\right]. \quad (11.22)$$

In queste condizioni le prime due equazioni (11.20) o (11.15) 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

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p(\rho) &= 0, \end{aligned} \quad (11.23)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p(\rho) \mathbf{I}] &= 0, \end{aligned} \quad (11.24)$$

con

$$p(\rho) = B\rho^\gamma.$$

I flussi del fluido perfetto che soddisfano le equazioni (11.23), (11.24) sono detti *flussi isoentropici*. Si denominano *equazioni di Eulero per un fluido isoentropico* equazioni della forma (11.23) o (11.24) anche se la funzione $p = p(\rho)$ non è data necessariamente dalla (11.21). Infatti anche se il fluido ideale non è perfetto, è possibile trovare ugualmente una funzione entropia specifica (in generale non data dalla (11.17)) che soddisfa la (11.19) (Basta infatti trovare $s(\rho, T)$ tale che

$$\frac{\partial s}{\partial T} = \frac{1}{T} \frac{\partial e}{\partial T} = \frac{1}{T^2} e, \quad \frac{\partial s}{\partial \rho} = -\frac{p}{T\rho^2},$$

che derivano dalle relazioni termodinamiche.

Ammetteremo comunque che risulti sempre $p'(\rho) \neq 0$. Le equazioni (11.20) sono una forma alternativa per le equazioni del fluido ideale, anche quando esso non è perfetto. Le considerazioni che seguono la (11.20) 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 (11.23) e (11.24), con una pressione $p = p(\rho)$ piú generale della (11.21).

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 questo 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.

Per includere gli sforzi di taglio, per il fluido di Navier-Stokes si assumerà

$$S = -p\mathbb{I} + \sigma. \quad (11.25)$$

La pressione p e l'energia interna specifica e saranno assunte ancora legate alla densità ρ ed alla temperatura T dalle relazioni (11.9) 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 σ 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. 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

$$S_{ij} := -p\delta_{ij} + \sigma_{ij} \quad (11.26)$$

dove

$$\sigma_{ij} := \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \delta_{ij} \nabla \cdot u = 2\mu D_{ij} + \lambda \delta_{ij} \nabla \cdot u \quad (11.27)$$

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 (??) si rileva che il contributo alla variazione di energia interna è

$$2\mu \text{Tr}(D^2) + \lambda (\text{div } u)^2.$$

con $D = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$. Questa quantità è positiva per ogni scelta di u non costante se $\mu > 0$ e $\lambda > 0$. I coefficienti μ, λ 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 conveniente utilizzare un tensore σ_{ij} in cui l'oggetto che moltiplica μ sia un tensore a traccia nulla.

$$\sigma_{ij} := -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot u \right) - \left(\lambda + \frac{2}{3} \mu \right) \delta_{ij} \nabla \cdot u \quad (11.28)$$

Possiamo così scrivere le equazioni corrette per un fluido reale

I coefficienti λ e μ sono detti rispettivamente *coefficiente di viscosità di volume (bulk viscosity)* e *coefficiente di viscosità di slittamento (shear viscosity)*. 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

$$q'_i := q_i - k \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (11.29)$$

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

$$q = -\kappa \nabla_x T. \quad (11.30)$$

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 (11.30) è nota come *legge di Fourier*. Usando le precedenti relazioni nelle equazioni di bilancio (11.2) e (11.3), otteniamo le equazioni

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p(\rho, T) &= \mu \Delta_x u + (\lambda + \mu) \nabla_x \operatorname{div} u +, \\ \rho(\partial_t e(\rho, T) + u \cdot \nabla_x e(\rho, T)) + p(\rho, T) \operatorname{div} u & \\ = \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda(\operatorname{div} u)^2. & \end{aligned} \quad (11.31)$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t (\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p(\rho, T) \mathbf{I}] &= \mu \Delta_x u + (\lambda + \mu) \nabla_x \operatorname{div} u, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + e(\rho, T) \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + e(\rho, T) + p(\rho, T) \right) \right] & \\ = \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda(\operatorname{div} u)^2, & \end{aligned} \quad (11.32)$$

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

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \operatorname{div} u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + u \cdot \nabla_x u) + \nabla_x p &= \mu \Delta_x u + (\lambda + \mu) \nabla_x \operatorname{div} u, \\ \frac{3}{2} \rho(\partial_t T + u \cdot \nabla_x T) + p \operatorname{div} u &= \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D)^2 + \lambda(\operatorname{div} u)^2. \end{aligned} \quad (11.33)$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div} [\rho u] &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \operatorname{div} [\rho u \otimes u + p \mathbf{I}] &= \mu \Delta_x u + (\lambda + \mu) \nabla_x \operatorname{div} u, \\ \partial_t \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \frac{3}{2} T \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + \frac{5}{2} T \right) \right] \\ &= \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda(\operatorname{div} u)^2. \end{aligned} \quad (11.34)$$

con

$$p = \rho T.$$

Valutiamo la derivata temporale dell'entropia specifica in corrispondenza di tali equazioni. Differenziando la (11.17) ed usando le (11.33), si ottiene

$$\rho \frac{Ds}{Dt} = - \operatorname{div} \left(\frac{q}{T} \right) + \pi, \quad (11.35)$$

con

$$\pi = \frac{1}{T} \left(4\kappa (\nabla_x \sqrt{T})^2 + \lambda(\operatorname{div} u)^2 + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) \right). \quad (11.36)$$

La quantità π 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*

$$\rho \frac{Ds}{Dt} \geq - \operatorname{div} \left(\frac{q}{T} \right), \quad (11.37)$$

che esprime la *seconda legge della Termodinamica* per i sistemi non reversibili.

Condizioni al contorno La natura fisica delle interazioni del fluido con il contenitore è complessa, ma noi ci limiteremo solo alle condizioni al contorno più comuni. Supporremo i campi ρ ed u prolungati fino alla frontiera $\partial\Omega$. Per determinare i valori da assegnare a ρ ed u sul bordo, osserviamo innanzitutto che, se $\{A_\varepsilon\}$ è una famiglia di parti di Ω con frontiera regolare e tale che $|A_\varepsilon|/|\partial A_\varepsilon| \rightarrow 0$, e se i campi coinvolti e le loro derivate sono limitati in A_ε , allora, dalle relazioni di bilancio e dal teorema della divergenza, si ottiene

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\partial A_\varepsilon|} \int_{\partial A_\varepsilon} d\sigma(x) \rho u \cdot n &= 0, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\partial A_\varepsilon|} \int_{\partial A_\varepsilon} d\sigma(x) S n &= 0, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\partial A_\varepsilon|} \int_{\partial A_\varepsilon} d\sigma(x) [u \cdot S n - q \cdot n] &= 0. \end{aligned} \quad (11.38)$$

Se il fluido è ideale, tali condizioni divengono poi

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\partial A_\varepsilon|} \int_{\partial A_\varepsilon} d\sigma(x) \rho u \cdot n &= 0, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\partial A_\varepsilon|} \int_{\partial A_\varepsilon} d\sigma(x) p n &= 0, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|\partial A_\varepsilon|} \int_{\partial A_\varepsilon} d\sigma(x) p u \cdot n &= 0. \end{aligned} \quad (11.39)$$

Ammettiamo ora che i campi ρ ed u e le loro derivate siano limitate fino al bordo. Per ogni $x \in \partial\Omega$ si può allora considerare la famiglia $\{A_\varepsilon\}$ costituita da cilindri di generatrice $n(x)$ avente per base cerchi di centro x e raggio ε altezza ε^2 . Applicando le 11.39 a tale famiglia, si ottiene che le quantità $\rho u \cdot n$, p e $p u \cdot n$ sono continue in $x \in \partial\Omega$. La continuità di p implica ovviamente la continuità di ρ , poiché $p'(\rho) \neq 0$. In conseguenza $u \cdot n$ è anche continuo. L'ultima delle condizioni 11.39 non aggiunge informazioni.

La discussione precedente mostra che vicino al bordo è naturale prescrivere la pressione e la componente normale della velocità. D'altra parte, in una situazione sperimentale standard, la pressione al bordo è una costante, p_e e il contenitore a riposo. Pertanto le equazioni idrodinamiche per un fluido ideale vengono completate dalle condizioni al bordo

$$p(x, t) = p_e, \quad u(x, t) \cdot n(x) = 0, \quad x \in \partial\Omega$$

Che tali condizioni siano anche sufficienti a determinare in modo unico le soluzioni non è evidente. Si rinvia per tale questione a teorema di unicità per i fluidi ideali.

Osservazione 1: La condizione $u \cdot n = 0$ sul bordo può essere interpretata come condizione di impermeabilità del contenitore. Infatti, ricordando che la corrente di massa $j_\rho = \rho u$, ne segue che non vi è flusso di massa attraverso $\partial\Omega$ e quindi la massa totale del sistema si conserva.

(Conservazione della massa totale):

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} dx \rho(x, t) = 0$$

Osservazione 2: Nulla è specificato per la componente tangenziale di u , che può essere non nulla: il fluido ideale può infatti scivolare sulle pareti del contenitore. Questa è una differenza fondamentale rispetto alle proprietà del fluido viscoso per il quale, come si vedrà, anche la componente tangenziale della velocità deve annullarsi al bordo, cioè il fluido aderisce alle pareti.

Nel caso di fluido viscoso i termini che compaiono al contorno sono Sn , $u \cdot Sn - q \cdot n$. Per quanto detto sopra, si fissa $u \cdot n = 0$, per la impenetrabilità del contenitore. Dalla legge di bilancio sull'impulso, si deve mettere a zero $(\nabla u + \nabla^T u)n$. Si può quindi fissare la componente tangenziale di $(\nabla u + \nabla^T u)n$ o quella di u o una combinazione delle due (condizioni miste di Robin)

$$(\nabla u + \nabla^T u)n)_\tau + u_\tau,$$

Nella pratica le condizioni più comuni sono fissare $u_\tau = 0$, no-slip, cioè il fluido aderisce alle pareti, oppure $u_\tau \neq 0$, slip, cioè il fluido scivola sulle pareti e $(\nabla u + \nabla^T u)n)_\tau = 0$.

Per quanto riguarda la condizione nella conservazione dell'energia, nelle applicazioni pratiche si considera il sistema non isolato ma in contatto con un reservoir che fissa la temperatura al bordo.

11.3. Fluido incomprimibile. Nella pratica spesso si considerano situazioni nelle quali si possono trascurare le variazioni locali di volume. Quando ciò si verifica si parla di *fluido incomprimibile*. 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

$$\operatorname{div} u = 0 \tag{11.40}$$

è detta *condizione di incomprimibilità*.

Accanto alla (11.40), sebbene ciò non sia strettamente indispensabile, assumeremo anche che la densità di massa sia costante nello spazio e nel tempo:

$$\rho(x, t) = \bar{\rho}. \tag{11.41}$$

Con tali assunzioni, evidentemente l'equazione di continuità è automaticamente soddisfatta dai fluidi incomprimibili. Tuttavia, le altre equazioni per il fluido e cioè le (11.20)_{2,3} o le (11.33)_{2,3}, con p data dall'equazione di stato $p = p(\rho, T)$, non sono in generale compatibili con tali assunzioni, essendo la (11.40), 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 incomprimibilità (11.40) 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 incomprimibilità. In conseguenza di tale assunzione, l'equazione di bilancio dell'energia risulta disaccoppiata da quella dell'impulso e pertanto le equazioni del fluido incomprimibile divengono

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u &= 0, \\ \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x \frac{p}{\rho} &= 0, \end{aligned} \tag{11.42}$$

nel caso di fluido perfetto e

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u &= 0, \\ \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x \frac{p}{\rho} &= \frac{\mu}{\rho} \Delta_x u, \end{aligned} \tag{11.43}$$

nel caso di fluido viscoso.

Nelle (11.42) 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 incomprimibile.

Nella (11.43) invece la densità $\bar{\rho}$ è presente anche nel rapporto μ/ρ . 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 (11.43) si scrivono, senza far apparire esplicitamente la densità, come

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u &= 0, \\ \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x p &= \nu \Delta_x u + b, \end{aligned} \quad (11.44)$$

Le (11.42) sono dette *equazioni di Eulero incomprimibili* mentre le (11.44) sono dette *equazioni di Navier-Stokes incomprimibili*. Poichè queste ultime rappresentano il caso piú ampiamente studiato di equazioni viscose, ci si riferisce spesso ad esse semplicemente come *equazioni di Navier-Stokes* riservando alle (11.33) 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 (11.42) e (11.44) 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*.

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

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -\nabla p(\rho) \end{aligned} \quad (11.45)$$

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

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_1 + \rho_0 \operatorname{div} u_1 &= 0 \\ \rho_0 \partial_t u_1 + p'(\rho_0) \nabla \rho_1 &= 0 \end{aligned} \quad (11.46)$$

Differenziando la prima rispetto ad t e la seconda rispetto ad x si ottiene

$$\partial_{tt}^2 \rho_1 - p'(\rho_0) \Delta \rho_1 = 0. \quad (11.47)$$

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

$$x' = \frac{x}{L},$$

$$\begin{aligned}
t' &= \frac{t}{\tau}, \\
u' &= \frac{\tau u}{V} = \frac{u\tau}{L}, \\
\rho' &= \frac{\rho}{R}, \\
p' &= \frac{p}{P} = \frac{p}{p(R)}
\end{aligned} \tag{11.48}$$

Sostituendo e rimuovendo gli apici si ottiene

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) &= 0 \\
\rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -\delta^2 \nabla p(\rho),
\end{aligned} \tag{11.49}$$

con

$$\delta = \frac{c}{V} \sqrt{\frac{1}{\gamma A}}$$

nel caso $p(\rho) = A\rho^\gamma$.

Il limite incomprimibile corrisponde a velocità V molto piccole rispetto a c e quindi $\delta \rightarrow +\infty$. Si può introdurre la quantità adimensionale $\frac{V}{c}$ che è detta numero di Mach. Quindi limite incomprimibile significa mandare il numero di Mach a zero.

È conveniente riscrivere le (11.49) usando p come incognita invece di ρ :

$$\begin{aligned}
\partial_t p + (u \cdot \nabla)p + g(p)\operatorname{div}(u) &= 0 \\
(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -\delta^2 \rho(p)^{-1} \nabla p,
\end{aligned} \tag{11.50}$$

ove $g(p) = \rho(p)p'(\rho(p)) = \delta p$ nel caso $p(\rho) = A\rho^\gamma$.

Espansione in δ^{-1} .

Si assuma

$$\begin{aligned}
p &= p_0 + \delta^{-1}p_1 + \delta^{-2}p_2 + O(\lambda^{-3}), \\
u &= u_0 + \delta^{-1}u_1 + \delta^{-2}u_2 + O(\delta^{-3}).
\end{aligned} \tag{11.51}$$

Sostituendo tali espansioni nella seconda delle (11.50) ed uguagliando i coefficienti delle potenze di λ otteniamo:

$$\begin{aligned}
\delta^2 : & \quad \nabla p_0 = 0; \\
\delta^1 : & \quad \nabla p_1 = 0; \\
\delta^0 : & \quad \partial_t u_0 + (u_0 \cdot \nabla)u_0 = -\rho(p_0)^{-1} \nabla p_2; \\
\dots & \quad \dots
\end{aligned} \tag{11.52}$$

Sostituendo nella prima delle (11.50) si ottiene invece

$$\begin{aligned}
\delta^0 : & \quad \partial_t p_0 + (u_0 \cdot \nabla)p_0 + g(p_0)\operatorname{div} u_0 = 0; \\
\delta^1 : & \quad \partial_t p_1 + (u_0 \cdot \nabla)p_1 + (u_1 \cdot \nabla)p_0 + g(p_1)\operatorname{div} u_0 + g(p_0)\operatorname{div} u_1 = 0; \\
\dots & \quad \dots
\end{aligned} \tag{11.53}$$

Le prime due delle (11.52) implicano che p_0 e p_1 non dipendono da x , ma possono dipendere da t . Usiamo tale informazione nella prima delle (11.53), integrata su Ω . Poichè

$$\int_{\Omega} dx \operatorname{div} u = \int_{\partial\Omega} d\sigma(x) u \cdot n = 0 \tag{11.54}$$

per le condizioni al bordo assunte (o per la periodicità se $\Omega = \mathbb{T}^3$), ne consegue che

$$\int_{\Omega} dx \partial_t p_0 = \partial_t p_0 |\Omega| = 0. \quad (11.55)$$

Pertanto p_0 non dipende neanche da t . Inoltre, avendo provato che $\partial_t p_0 = 0$ abbiamo anche

$$\operatorname{div} u_0 = 0. \quad (11.56)$$

La seconda delle (11.52) e le precedenti informazioni riducono la (11.53) a

$$\partial_t p_1 + g(p_0) \operatorname{div} u_1 = 0 \quad (11.57)$$

e l'argomento precedente mostra che $\partial_t p_1 = 0$ e $\operatorname{div} u_1 = 0$. In conclusione, all'ordine più basso si ha

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u_0 &= 0, \\ \partial_t u_0 + (u_0 \cdot \nabla) u_0 &= -\nabla \hat{p}, \end{aligned} \quad (11.58)$$

ove abbiamo denotato $\hat{p} = \rho(p_0)^{-1} p_2$.

Il risultato può essere ottenuto rigorosamente seguendo [Majda].

Osservazione

Tali equazioni risultano invarianti sotto lo scaling, $0 < \alpha < 2$,

$$x \rightarrow \varepsilon^{-1} x, \quad t \rightarrow \varepsilon^{-1-\alpha} t, \quad u \rightarrow \varepsilon^{\alpha} u$$

La soluzione di tali equazioni è unica, sia con condizioni al contorno periodiche che con condizioni $u \cdot n = 0$, $p_{\partial\Omega} = \bar{p}$. Siano u_1 e u_2 due diverse soluzioni con lo stesso dato iniziale e la stessa condizione al contorno e sia $v = u_1 - u_2$. Allora

$$\partial_t v + v \cdot \nabla u_2 + u_1 \cdot \nabla v + \nabla(p_1 - p_2) = 0$$

e anche

$$\partial_t \int dx |v|^2 + \int dx v \cdot (v \cdot \nabla u_2) + \int dx v \cdot (u_1 \cdot \nabla v) = 0$$

Il termine

$$\int dx v \cdot (u_1 \cdot \nabla v) = \int dx v^i u_1^j \nabla_j v^i = \frac{1}{2} \int dx u_1^j \nabla_j |v|^2 = 0$$

perchè $\operatorname{div} u = 0$ e per le condizioni al contorno

$$\int_{\partial\Omega} d\sigma u_1 \cdot n (v \cdot v) = 0$$

Inoltre il termine di pressione scompare perchè $\operatorname{div} u = 0$ e le due soluzioni sul contorno hanno lo stesso valore di pressione.

$$\partial_t \int dx |v|^2 + \int dx v_j v_i \cdot \nabla_j u_2^i = 0$$

da cui

$$\partial_t \int dx |v|^2 \leq C \int dx \sum_{ij} |v_i v_j| \leq C' \int dx |v|^2$$

con $C = |\sup_{\Omega} \nabla u_2|$ e

$$\int dx |v|^2 \leq e^{Ct} \int dx v(x, 0)^2 = 0$$

Come conseguenza non si possono aggiungere altre condizioni al contorno, e in particolare non si può fissare la componente tangenziale di u sul bordo.

Caso viscoso

In luogo delle equazioni di Eulero compressibili si considerino ora quelle di Navier-Stokes

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -\nabla p(\rho) + \mu \Delta u + \lambda \nabla \operatorname{div} u \\ \frac{3}{2} \rho(\partial_t T + u \cdot \nabla_x T) + p \operatorname{div} u &= \kappa \Delta_x T + 2\mu \operatorname{Tr}(D^2) + \lambda (\operatorname{div} u)^2 \end{aligned} \quad (11.59)$$

($\lambda = \frac{2\mu}{3}$ per il gas perfetto). La quantità adimensionale $\frac{V}{c}$ è detta numero di Mach e indicato con Ma .

Passando a variabili adimensionali, esse divengono

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -(Ma)^{-2} \nabla p(\rho) + \frac{1}{RVL} \mu \Delta u + \frac{1}{RVL} \lambda \nabla \operatorname{div} u, \end{aligned} \quad (11.60)$$

$$p \frac{D}{Dt} s = \frac{1}{RVL} k \Delta T + \frac{V^2}{c^2} \frac{1}{RVL} 2\mu [(\nabla u)^2 + \frac{2}{3} (\operatorname{div} u)^2]$$

Introduciamo il numero di Reynolds Re e il numero di Prandtl Pr

$$Re = \frac{VL}{\mu}, \quad Pr = \frac{\mu}{k}$$

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) &= 0 \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) &= -Ma^{-2} \nabla p + \frac{1}{Re} \Delta u + \frac{1}{Re} \nabla \operatorname{div} u, \\ \frac{3}{2} \rho(\partial_t T + u \cdot \nabla_x T) + p \operatorname{div} u &= \frac{1}{Pr Re} \Delta T + \frac{Ma^2}{Re} [(\nabla u)^2 + \frac{2}{3} (\operatorname{div} u)^2] \end{aligned} \quad (11.61)$$

Poichè $\mu \sim \frac{Rl_0}{\sqrt{T}}$ possiamo scrivere il numero di Reynolds come $Re = \frac{Ma}{kn}$.

Si può usare lo scaling equivalente

$$x \rightarrow \varepsilon^{-1} x, \quad t \rightarrow \varepsilon^{-2} t, \quad u \rightarrow \varepsilon u$$

che significa considerare il numero di Knudsen $\varepsilon = \frac{l_0}{L}$, il numero di Mach $Ma = \varepsilon = V/c$ in modo che il numero di Reynolds ($Re = \frac{Ma}{Kn}$) rimanga invariato.

Con gli argomenti precedenti le (11.52) e (11.53) vengono sostituite da

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 : \quad & \nabla p_0 = 0; \\ \varepsilon^1 : \quad & \nabla p_1 = 0; \\ \varepsilon^0 : \quad & \partial_t u_0 + (u_0 \cdot \nabla) u_0 = -\rho(p_0)^{-1} \nabla p_2 + \frac{1}{Re} \Delta u_0 + \frac{1}{Re} \nabla \operatorname{div} u_0; \\ \dots & \quad \dots \end{aligned} \quad (11.62)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon^0 : \quad & \partial_t \rho_0 + (u_0 \cdot \nabla) \rho_0 + \rho_0 \operatorname{div} u_0 = 0; \\ \varepsilon^1 : \quad & \partial_t \rho_1 + (u_0 \cdot \nabla) \rho_1 + (u_1 \cdot \nabla) \rho_0 + \rho_1 \operatorname{div} u_0 + \rho_0 \operatorname{div} u_1 = 0; \\ \dots & \quad \dots \end{aligned} \quad (11.63)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon^0 : \quad & \frac{3}{2} \rho_0 (\partial_t T_0 + u_0 \cdot \nabla_x T_0) + p_0 \operatorname{div} u_0 = \frac{1}{Pr Re} \Delta T_0; \\ \dots & \quad \dots \end{aligned} \quad (11.64)$$

Usiamo l'equazione per l'entropia

$$p(\partial_t s + u \cdot \nabla s) = k\Delta T + \mu(\nabla u)^2 + \frac{2}{3}(\operatorname{div} u)^2.$$

che deriva da, ricordando $s = \frac{3}{2} \log T - \log \rho$

$$\frac{3}{2}\rho D_t T - T D_t \rho = p D_t S \quad (11.65)$$

$$p D_t S = p \operatorname{div} u - T \rho \operatorname{div} u + k\Delta T + \mu(\nabla u)^2 + \frac{2}{3}(\operatorname{div} u)^2$$

L'equazione per l'entropia all'ordine più basso

$$p_0(\partial_t s_0 + u_0 \cdot \nabla s_0) = k\Delta T_0$$

si può riscrivere in due modi

$$\begin{aligned} \frac{5}{2}\rho_0[\partial_t T_0 + u_0 \cdot \nabla T_0] - \frac{\partial}{\partial t} p_0 &= \frac{1}{Pr Re} \Delta T_0 \\ \frac{5}{2}p_0 \operatorname{div} u_0 + \frac{3}{2}[\partial_t p_0 + u_0 \cdot \nabla p_0] &= \frac{1}{Pr Re} \Delta T_0 \end{aligned} \quad (11.66)$$

La prima si ottiene da (11.65) scrivendo

$$p_0 D_t S_0 = \frac{5}{2}\rho D_t T - \rho D_t T - T D_t \rho$$

La seconda si ottiene partendo dall'equazione per la densità

$$\frac{3}{2}T_0 D_t \rho_0 + \frac{3}{2}T_0 \rho_0 \operatorname{div} u_0 = 0$$

e sommando all'equazione per la temperatura

$$\frac{3}{2}\rho_0 D_t T_0 + p_0 \operatorname{div} u_0 = \frac{1}{Pr Re} \Delta T_0$$

Si ha

$$\frac{3}{2}D_t p_0 + \frac{5}{2}p_0 \operatorname{div} u_0 = \frac{1}{Pr Re} \Delta T_0$$

Dalla seconda delle (11.66) 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. Poichè $p_0 = \rho_0 T_0$ è costante si ha che anche la densità è costante. Di conseguenza dalla prima delle (11.63) 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 (11.63) e quindi, procedendo come prima, si ottiene

$$\begin{aligned} \operatorname{div} u_0 &= 0, \\ \partial_t u_0 + (u_0 \cdot \nabla) u_0 &= -\nabla \hat{p} + \frac{1}{Re} \Delta u_0. \end{aligned} \quad (11.67)$$

Inoltre considerando le equazioni per ρ_1 e T_1

$$\begin{aligned} \frac{3}{2}\rho_0 D_t T_1 + p_0 \operatorname{div} u_1 &= k\Delta T_1 \\ T_0 D_t \rho_1 + p_0 \operatorname{div} u_1 &= 0 \end{aligned}$$

e sottraendole

$$\frac{3}{2}\rho_0 D_t T_1 - T_0 D_t \rho_1 = k\Delta T_1.$$

Ricordando la condizione $\nabla p_1 = \nabla(\rho_1 + T_1) = 0$, e osservando che come prima $D_t p_1 = 0$ si ottiene una equazione di diffusione per T_1

$$\frac{5}{2}(\partial_t T_1 + u_0 \cdot \nabla_x T_1) = \frac{1}{Pr Re} \Delta T_1;$$

Anche tali equazioni si possono ottenere rigorosamente nel caso isoentropico (che è non fisico in presenza di dissipazione) seguendo [Kleiner mann-Majda] o [Hoff] per un approccio alternativo.

Il carattere dissipativo dell'equazione si può leggere nella decrescita dell'energia

$$E_t = \int dx u^2$$

$$\frac{d}{dt} E_t = \int dx u \frac{d}{dt} u = \nu \int dx u \Delta u = -\nu \int dx |\nabla u|^2$$

Usiamo la diseguaglianza di Poincaré che permette di controllare la norma L^2 del gradiente in termini della norma L^2 della funzione, purchè esista un $x \in \Omega : u(x) = 0$ (a tal fine basta imporre una condizione di normalizzazione $\int dx u(x) = 0$) sul toro oppure $u = 0$ sulla frontiera)

$$\int dx |\nabla u|^2 \geq \int dx |u|^2$$

da cui

$$\frac{d}{dt} E_t \leq -\nu \int dx |u|^2 = -\nu E_t$$

Per la diseguaglianza di Gronwall

$$E_t \leq e^{-\nu t} E_0$$

L'argomento sull'unicità sviluppato per il caso di Eulero si può ripetere anche in questo caso, con la differenza che appare un termine che coinvolge il Laplaciano al secondo membro $v \Delta v$ da cui integrando per parti si ottiene un termine al contorno

$$\int_{\partial \Omega} v n \cdot \nabla v$$

e il termine $-\nu \int dx |\nabla v|^2$. Se si è fissato u (componente normale e tangenziale) sul contorno o $n \cdot \nabla v$ si ottiene l'unicità. Si ricorda che essendo una equazione del secondo ordine in x occorre una ulteriore condizione al contorno e non basta $u \cdot n = 0$. L'ultimo termine si tratta come spiegato prima ottenendo $E_t \leq e^{-\nu t} E_0$, per $E_t = \int dx |v|^2$ e poichè $E_0 = 0$ si ha $E_t = 0$.

Equazione per la vorticità

Prendendo il rotore nell'equazione di Navier-Stokes incomprimibile e ponendo $\text{rot } u = \omega$ si ha

$$\partial_t \omega + u \cdot \nabla \omega - \omega \cdot \nabla u = \nu \Delta \omega \tag{11.68}$$

Identità usate

$$\text{rot}(u \cdot \nabla)u = \text{rot}(u \wedge \text{rot } u)$$

$$\text{rot}(A \wedge B) = (B \cdot \nabla)A - (A \cdot \nabla)B - B \text{div } A + A \text{div } B$$

In questo modo si ottiene una equazione che non coinvolge la pressione. Il problema è come ricostruire u da ω . In $d = 2$ il problema è più semplice perchè il termine $\omega \cdot \nabla u = 0$

In un flusso bidimensionale l'equazione (11.68) si semplifica notevolmente. Infatti, se $u = (u_1, u_2, 0)$ allora $\omega = (0, 0, \omega_3)$ con

$$\omega_3 = \partial_1 u_2 - \partial_2 u_1.$$

In altri termini ω è caratterizzato da una sola quantità scalare ω_3 che nel seguito indicheremo semplicemente con ω . In conseguenza di ciò si ha

$$(\omega \cdot \nabla_x)u = 0.$$

Pertanto nel caso non viscoso diviene (con $\omega = \omega_3$)

$$\frac{D}{Dt}\omega = 0$$

Quindi ω è conservato lungo le traiettorie del flusso.

Per risolvere l'equazione occorre scrivere u in funzione di ω , e quindi risolvere il problema generale

Problema: dato il campo vettoriale ω nell'aperto $D \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$, determinare il campo vettoriale u differenziabile in D e continuo in \bar{D} , tale che

$$\begin{aligned} \omega &= \text{rot}u, & \text{div}u &= 0, & x &\in D, \\ u \cdot n &= 0, & x &\in \partial D. \end{aligned} \quad (11.69)$$

In $d = 2$ conviene introdurre la notazione seguente: se $a = (a_1, a_2) \in \mathbb{R}^2$ è un vettore, il vettore $a^\perp = (a_2, -a_1)$ denota il vettore che si ottiene da a con una rotazione di $\pi/2$ nel verso destrogiro. Analogamente $\nabla^\perp = (\partial_2, -\partial_1)$. In $d = 2$ si ha dunque

$$\text{rot}u = \text{div}u^\perp, \quad \text{div}u = -\text{rot}u^\perp.$$

Inoltre

$$\text{rot}\nabla^\perp = -\Delta.$$

La condizione $\text{div}u = 0$ equivale ad affermare che u^\perp ha rotore nullo e questo implica, poiché il dominio D è semplicemente connesso, che esiste una funzione Ψ tale che

$$u = \nabla^\perp \Psi.$$

La funzione Ψ è detta *potenziale di corrente* o *stream function* in inglese.

Ricordando che

$$\omega = \text{rot}u = \text{rot}\nabla^\perp \Psi = -\Delta \Psi,$$

e che

$$0 = n \cdot u = n \cdot \nabla^\perp \Psi = \tau \cdot \nabla \Psi,$$

ove τ è il versore della tangente a ∂D , possiamo concludere che Ψ è determinato come la soluzione del seguente problema al contorno:

$$\begin{aligned} \Delta \Psi &= -\omega & x &\in D \\ \Psi &= 0, & x &\in \partial D. \end{aligned} \quad (11.70)$$

Infatti, l'annullarsi della derivata tangenziale di Ψ sul bordo assicura che Ψ è costante sul bordo e la costante può essere fissata a 0 visto che Ψ è definito a meno di una costante.

Il problema (11.70) è il problema di Dirichlet per l'equazione di Poisson con densità $-\omega$. La sua soluzione esiste unica per ω sufficientemente regolare e si scrive

$$\Psi(x) = \int_D dy G_D(x, y) \omega(y),$$

ove $G_D(x, y)$ è la funzione di Green relativa al dominio D , cioè la soluzione fondamentale dell'equazione di Laplace in D con condizioni di Dirichlet:

$$\Delta_x G_D(x, y) = -\delta(x - y), \quad x, y \in D, \quad G_D(x, y) = 0 \quad x \in \partial D.$$

Pertanto, posto

$$K_D(x, y) = \nabla_x^\perp G_D(x, y),$$

abbiamo

$$u(x) = \int_D dy K_D(x, y) \omega(y)$$

o, piú brevemente

$$u = K_D * \omega.$$

Occorre ancora mostrare che la u così ottenuta è l'unica soluzione del problema 11.69. Basta osservare che, se u' è un'altra, posto $v = u - u'$, v soddisfa

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} v &= 0, & \operatorname{div} v &= 0, & x &\in D, \\ v \cdot n &= 0, & x &\in \partial D. \end{aligned} \tag{11.71}$$

Essendo D semplicemente connesso allora $v = \nabla \phi$ con ϕ soluzione del problema di Neumann

$$\begin{aligned} \Delta \phi &= 0, & x &\in D \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} &= 0, & x &\in \partial D, \end{aligned} \tag{11.72}$$

che ammette la sola soluzione costante. Pertanto $v = 0$.

Per avere un'espressione piú esplicita di K_D , notiamo che la funzione

$$G(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \ln |x - y|$$

è la soluzione fondamentale dell'equazione di Laplace in \mathbb{R}^2 che tende a 0 all'infinito. Naturalmente essa non soddisfa le condizioni al bordo su ∂D . Pertanto G_D può scriversi

$$G_D = G + \gamma_D,$$

con γ_D soddisfacente le condizioni

$$\begin{aligned} \Delta_x \gamma_D &= 0, & x, y &\in D, \\ \gamma_D(x, y) &= -G(x, y), & x \in \partial D, y \in D. \end{aligned} \tag{11.73}$$

Essendo γ_D una soluzione del problema di Dirichlet per l'equazione di Laplace con dominio e dati regolari, essa è regolare in tutti i punti di D e le singolarità di G_D coincidono con quelle di G . Posto quindi

$$K(x, y) = \nabla_x^\perp G(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \frac{(x - y)^\perp}{|x - y|^2},$$

si ha

$$K_D = K + \mathcal{K}_D,$$

con \mathcal{K}_D funzione infinitamente differenziabile delle variabili x ed y .

Si noti che, per dare senso all'espressione così ottenuta per u in funzione di ω è sufficiente che $\omega \in L_\infty(D)$.

11.4. Teorema di esistenza globale. vedi prova in [5].

11.5. Equazione di Boussinesq. Diamo un esempio di un fluido tra due pareti a differenti temperature. Consideriamo un fluido viscoso e conduttore di calore in un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Fissiamo $d = 3$. Ω è lo the slab $\mathbb{T}^2 \times [-1, 1]$. Sul contorno $\partial\Omega \neq \emptyset$, specifichiamo la temperatura, la pressione e la velocità:

$$\begin{aligned} T(1) &= T_+, & T(-1) &= T_- = T_+ + \delta T \geq T_+, \\ P(1) &= P_+, & U(-1) &= 0 = U(1). \end{aligned} \quad (11.74)$$

Introduciamo il parametro di scala ε , l'inverso della dimensione dello slab in unità originali. Consideriamo il limite di velocità piccole, si assume $U = \varepsilon u$. Occorre riscaldare anche la forza $\varepsilon^2 G$ con $G = -\nabla V$. Con queste assunzioni, per vedere spostamenti finiti dal dato iniziale bisogna aspettare tempi di ordine $\varepsilon^{-2}t$. Perciò lo scaling considerato è

$$x \rightarrow \varepsilon^{-1}x, \quad t \rightarrow \varepsilon^{-2}t, \quad u \rightarrow \varepsilon u, \quad G \rightarrow \varepsilon^2 G \quad (11.75)$$

Scriviamo le equazioni di Navier-Stokes in variabili riscalate come

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (11.76)$$

$$\rho(\partial_t u + u \cdot \nabla u) = \eta \Delta u - \varepsilon^{-2} \nabla P + \varepsilon^{-1} \rho G + \zeta \nabla \operatorname{div} u, \quad (11.77)$$

$$\rho T(\partial_t s + u \cdot \nabla s) = \kappa \Delta T + \varepsilon^2 \eta (\nabla u)^2. \quad (11.78)$$

η and ζ sono i coefficienti di viscosità e κ è la conduttività, che dipendono dalla temperatura. Per semplicità consideriamo i coefficienti di trasporto costanti, ma il risultato è vero in generale. s and P sono l'entropia e la pressione specifiche. Per semplicità consideriamo il caso del gas perfetto $P = c\rho T$ and $s = c_v \log T - c \log \rho$ con $c > 0$ la costante dei gas ideali e $c_v = (3/2)c$ il calore specifico volume costante. La forza esterna interessante è la gravità e quindi assumiamo $V = g(z + 1)$, con $z \in [-1, 1]$ la terza componente di $\underline{x} = (x, y, z)$ e $g > 0$ l'accelerazione di la gravità. Un parametro naturale è il numero di Rayleigh Ra definito da $Ra = [(\kappa\nu)^{-1}(gL^3\delta T/T_+)]^{1/2}$ o anche $Ra = \frac{\delta T/T_+}{FrKn^2}$.

Lo scaling considerato lascia invariato il numero di Rayleigh. Tale numero comparirà nelle equazioni finali davanti al termine di forza moltiplicata per la temperatura.

In alternativa, si possono introdurre variabili adimensionali

$$t' = t\nu L^{-2}, \quad \underline{x}' = \underline{x}L^{-1},$$

$$T' = (T - T_+)(\delta T)^{-1}, \quad u' = (gL\delta T/T_+)^{-\frac{1}{2}}u$$

e riscrivere le equazioni NS in forma adimensionale e giungere allo stesso risultato. In tal caso davanti al termine di forza compare $\frac{1}{FrMa^2}$ dove Fr è il numero di Froude, definito da $Fr = \frac{RT}{Lg}$, che nello scaling considerato va come ε^{-1} (ricordiamo che $T = c^2$).

Per essere consistenti con il riscaldamento i dati iniziali e al contorno devono dipendere da ε in modo opportuno. Assumiamo a tempo zero:

$$T(x, 0) = T_+ + \varepsilon \hat{\theta}(x, 0), \quad \rho(x, 0) = \rho_+ + \varepsilon \hat{r}(x, 0)$$

con ρ_+ la densità costante. Sul contorno assumiamo $(T_+)^{-1}\delta T = 2\lambda\varepsilon$. Ci si aspetta che a tempi positivi si abbia ancora

$$T(x, t) = T_s(x) + \varepsilon \theta(x, t), \quad \rho(x, t) = \rho_s(x) + \varepsilon r(x, t) \quad (11.79)$$

ρ_s and T_s sono le soluzioni del problema stazionario

$$\frac{d}{dz} P_s = -\varepsilon g \rho_s, \quad \Delta T_s = 0, \quad (11.80)$$

con $P_s = c\rho_s T_s$ e condizioni al contorno

$$T_s(-1) = T_-, \quad T_s(1) = T_+, \quad \rho(1) = P_+/(cT_+) = \rho_+.$$

In altri termini r e θ rappresentano fluttuazioni rispetto alla densità e temperatura corrispondenti all'equilibrio idrostatico

$$T_s = T_+(1 + \varepsilon\lambda(1 - z)), \quad \rho_s = \rho_+(1 + \varepsilon\lambda(1 - z))^{\frac{g}{c\lambda T_+} - 1} \quad (11.81)$$

In particolare questo significa che $\theta(-1) = 0 = \theta(1)$. Sostituendo (11.79) in (11.76) si ha

$$-\rho_+ \operatorname{div} u = \varepsilon[\partial_t r + \operatorname{div}(ru)] + \operatorname{div}[u(\rho_s - \rho_+)]$$

Assumiamo che u, r, θ convergono, per $\varepsilon \rightarrow 0$, a limiti finiti (che chiamiamo ancora u, r, θ). Poichè $(\rho_s - \rho_+)$ è di ordine ε , nel limite si ha

$$\operatorname{div} u = 0 \quad (11.82)$$

A causa di 11.79 e 11.82, l'equazione 11.77 dà,

$$-\nabla[P_s + \varepsilon\tilde{P}_1] + \varepsilon[\rho_s + \varepsilon r]G = O(\varepsilon^2)$$

avendo usato $P = P_s + \varepsilon\tilde{P}_1 + \varepsilon^2\tilde{P}_2 + O(\varepsilon^3)$ con $\tilde{P}_1 = \rho_+\theta + T_+r$. Allora, usando (11.80), nel limite si ottiene

$$\nabla\tilde{P}_1 = 0, \quad (11.83)$$

che è detta condizione di Boussinesq

$$\rho_+ \nabla\theta + T_+ \nabla r = 0 \quad (11.84)$$

da cui

$$\rho_+\theta + T_+r = a \quad (11.85)$$

con a indipendente da \underline{x} and t . La costante non dipende da t perchè la pressione è costante nel tempo sul contorno. Infatti, $a = \tilde{P}_1(1) = 0$, poichè $P(1) = P_s(1) = P_+$. La condizione (11.85) è assunta usualmente in letteratura come una "equazione di stato" mentre nell'approccio dei limiti di scala è una conseguenza dello scaling

Passando al limite nell'equazione del momento 11.77 si ottiene:

$$\rho_+(\partial_t u + u \cdot \nabla u) = \eta\Delta u - \nabla\tilde{P}_2 + rG.$$

Usando la condizione di Boussinesq (11.85)

$$\rho_+(\partial_t u + u \cdot \nabla u) = \eta\Delta u - \nabla p - \alpha\rho_+\theta G \quad (11.86)$$

dove $\alpha = T_+^{-1}$ è il coefficiente di espansione termica and $p = \tilde{P}_2$ è la pressione del problema incomprimibile.

Infine l'equazione per l'entropia (11.78) dà

$$\rho c_v D_t T - cT D_t \rho = \kappa\Delta T + O(\varepsilon^2)$$

con $D_t \equiv \partial_t + u \cdot \nabla$. L'equazione di stato implica che $cT D_t \rho = -\rho c D_t T + D_t P$. In base a 11.85 si ha $D_t P = -\varepsilon\rho_+ u_z g + O(\varepsilon^2)$. E infine l'equazione per θ

$$c_p(\partial_t \theta + u \cdot \nabla \theta) + u_z(g - \lambda c_p T_+) = \rho_+^{-1} \kappa \Delta \theta \quad (11.87)$$

con $c_p = c_v + c = (5/2)c$. Le condizioni al contorno associate al sistema 11.82, 11.86, 11.87 sono:

$$u(-1) = 0 = u(1), \quad \theta(-1) = 0 = \theta(1)$$

Riscriviamo (11.86) (11.87) in termini delle variabili $\tilde{\theta} = \theta - (c_p^{-1}g - \lambda T_+)(1 - z)$ come

$$c_p D_t \tilde{\theta} = \rho_+^{-1} \kappa \Delta \tilde{\theta} \quad (11.88)$$

con condizioni al contorno

$$\tilde{\theta}(1) = 0, \quad \tilde{\theta}(-1) = -2(c_p^{-1}g - \lambda T_+). \quad (11.89)$$

L'equazione (11.86) diventa

$$\rho_+(\partial_t u + u \cdot \nabla u) = \eta \Delta u - \nabla \tilde{p} - \alpha \rho_+ \tilde{\theta} G \quad (11.90)$$

con

$$\tilde{p} = p + \alpha \rho_+ g (c_p^{-1}g - \lambda T_+)(1 - z)^2 / 2, \quad (11.91)$$

Il sistema (11.82), (11.90), (11.88) con le condizioni al contorno (11.89) e condizione no-slip per u , differisce dalle usuali equazioni di Oberbeck-Boussinesq (OBE) per il termine proporzionale a g in (11.89) e del termine quadratico g in (11.91). Nelle usuali condizioni sperimentali questi termini sono molto più piccoli degli altri e quindi si trascura l'effetto della variazione di densità con la quota dovuta alla forza gravitazionale cioè si considera $P_s \sim P_+$. Questo effetto diventa però rilevante in situazione in cui la forza g è molto più grande della gravità terrestre. Eliminando questi termini si ottengono le usuali OBE.

Nel fluido in uno slab tra due pareti a differenti temperature soggetto alla forza di gravità, se la temperatura della parete superiore è più bassa di quella inferiore si determina una competizione tra il gradiente di temperatura e la forza che determina l'apparire di moti convettivi. Ci sono quindi più soluzioni stazionarie, a partire da quella in cui il fluido è a riposo e il profilo di temperatura è lineare, interpolando fra le due temperature delle pareti. Le altre soluzioni in cui il moto è convettivo appaiono all'aumentare di un parametro, il numero di Rayleigh, Ra , che è proporzionale al prodotto della gravità per la differenza di temperatura. Quando Ra supera una soglia critica Ra_c appaiono soluzioni stazionarie con un campo di velocità differente da zero, con la presenza di vortici, una soluzione con rotazione in senso orario e l'altra in senso antiorario. Al crescere ulteriore di Ra appaiono soluzioni stazionarie più complesse. Per $Ra < Ra_c$ la unica soluzione conduttiva è stabile, ma per $Ra > Ra_c$ perde stabilità e diventano stabili le due soluzioni col vortice. Si ha cioè un fenomeno di biforcazione dinamica. Al crescere ulteriore di Ra si ha una cascata di biforcazioni.

Referenze [?]

12. TEORIA DI CAMPO MEDIO

Finora abbiamo visto vari esempi di descrizioni di comportamento di un sistema macroscopico ottenute usando limiti di scala. Esiste un altro possibile limite che porta alla teoria di campo medio fuori dall'equilibrio.

Iniziamo col ricordare l'approccio alla teoria di campo medio all'equilibrio per esempio per sistemi di spin. Sia il sistema racchiuso in un box Λ di lato L e sia ℓ la grandezza di riferimento microscopico (nel caso del reticolo il passo reticolare). Chiamiamo il rapporto $\frac{\ell}{L} = \gamma^{-1}$ e sia $\ell = 1$. Il sistema di spin interagisce attraverso il potenziale di Kac $J_\gamma(x - y)$, $x, y \in Z^d$ dove $J_\gamma(x - y) = \gamma^d J(\gamma(x - y))$. Si possono considerare vari casi:

$$1) \gamma^{-1} \gg L, \quad \text{usuale campo medio}$$

$$2) \gamma^{-1} \approx L, \quad \text{scala mesoscopica}$$

3) $\gamma^{-1} \ll L$ limite di Lebowitz-Penrose

L'ultimo limite permette di correggere le anomalie della teoria di campo medio, prendendo prima il limite termodinamico $L \rightarrow \infty$ e poi il limite $\gamma \rightarrow 0$ ottenendo l'involuppo convesso dell'energia libera di campo medio. Adesso siamo interessati alla situazione intermedia. Seguendo l'approccio di Gates-Penrose, definiamo il funzionale sullo spazio dei profili di magnetizzazione m

$$\mathcal{F}_\Lambda\{m\} = \int dx [s(m(x)) + \frac{1}{2} \int dy m(x)J(x-y)m(y)]$$

dove $s(m)$ è l'entropia. Chiariamo il significato del funzionale. Sia Λ_γ un box di lato $\gamma^{-1}L$ e $N_\gamma = n\Lambda_\gamma$. Si ha che

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\Lambda_\gamma} \log Z_{\Lambda_\gamma}(N_\gamma) = \mathcal{F}_\Lambda(n)$$

dove

$$\mathcal{F}_\Lambda(n) = \frac{1}{\Lambda} \inf \mathcal{F}_\Lambda\{m\}$$

dove l'inf è preso sui profili tali che $\int dx m(x) = n$.

Questo limite corrisponde alla situazione 2) in cui emerge anche una struttura spaziale. $m(x)$ ha il significato di una media locale su qualche opportuna scala mesoscopica. Sia $\mathcal{P}_{\Lambda_\gamma}(m_\gamma)$, con $(m_\gamma) = \rho(\gamma^{-1}x)$. La relazione tra $\mathcal{P}_{\Lambda_\gamma}$ e \mathcal{F}_Λ è

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \gamma^{-1} \log \mathcal{P}_{\Lambda_\gamma} = [\mathcal{F}_\Lambda(n) - |\Lambda|f_\Lambda(n)]$$

In altri termini, $\mathcal{P}_{\Lambda_\gamma}$ è la probabilità di vedere un particolare profilo mesoscopico e il membro di destra è il funzionale grandi deviazioni per osservare tale profilo.

Inoltre, Gates e Penrose hanno provato che

$$\mathcal{F}(n) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \mathcal{F}_\Lambda\{m\}$$

Il termine $-\nabla_x \int dy J(x-y)m(y)$ è un esempio di forza autoconsistente. Consideriamo un sistema di particelle interagenti attraverso un potenziale di Kac $U^\gamma(x) = \gamma^d U(\gamma x)$, $U \geq 0$, a supporto compatto e range finito e poniamo il sistema in un toro di lato γ^{-1} , $\Lambda = \mathbb{T}_{\gamma^{-1}}$, $N = n|\Lambda|$

$$Z_N(\beta, n) = \exp -\beta \left\{ \sum_{i \neq j} [-U^\gamma(|q_i - q_j|)] \right\}$$

Il limite di campo medio $\gamma \rightarrow 0$

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_N(\beta, n) = \inf_{\rho: \int_{\mathbb{T}_1} \rho = n} \mathcal{F}_{\mathbb{T}_1}(\beta, \rho)$$

$$\mathcal{F}_{\mathbb{T}_1}(\rho) = \int_{\mathbb{T}_1} s(\rho(x)) dx + \int_{\mathbb{T}_1} [-\beta \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}_1} \rho(x) U(|x-y|) \rho(y) dy] dx$$

Il termine $-\nabla_x \int dy U(x-y)\rho(y)$ è la forza autoconsistente in questo caso. Un altro modo di scrivere il sistema è quello di considerare il sistema nel box di lato L da cui

$$Z_N(\beta, n) = \exp -\beta \left\{ \sum_{i \neq j} \left[-\frac{1}{N} U(|q_i - q_j|) \right] \right\}.$$

La conclusione di questa discussione è che il limite di campo medio corrisponde a considerare un potenziale debole di lungo range.

12.1. Equazione di Vlasov. Dal punto di vista dinamico vogliamo vedere quale è il comportamento fuori dall'equilibrio per un sistema interagente attraverso un potenziale debole di lungo range. Ci sono due possibili approcci per ricavare le equazioni del moto nel limite di campo medio: o partire come usuale dalle equazioni di Newton per tale sistema, oppure considerare la gerarchia BBGKY come si fa per ricavare l'equazione di Boltzmann.

Iniziamo dal primo punto di vista che è simile a quanto si è visto per il limite idrodinamico.

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

$$H(q, v) = \sum_{i=1}^N \frac{v_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i,j:i \neq j} \phi^\gamma(q_i - q_j) \quad (12.1)$$

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 . Il potenziale è definito da $\phi^\gamma(q_i - q_j) = \gamma^d \phi^\gamma(\frac{q_i - q_j}{\gamma})$, con ϕ a supporto compatto.

Riscaliamo il tempo e lo spazio come $t = \gamma\tau$, $x = \gamma q$ e consideriamo il sistema in un box di lato $\gamma^{-1}L$. Il numero di particelle cresce come $N = \gamma^d$ in modo che la densità sia finita. Il termine di potenziale diventa

$$\phi^\gamma(q_i - q_j) = \gamma^d \phi(x_i - x_j) = \frac{1}{N} \phi(x_i - x_j)$$

Usiamo ora le equazioni di Newton riscalate

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i \quad , \quad \frac{dv_i}{dt} = - \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{1}{N} \frac{\partial \phi}{\partial x_i}(|x_i - x_j|) \quad i = 1, \dots, N \quad (12.2)$$

La differenza rispetto al caso del limite idrodinamico è che in questo caso si parte dalla misura empirica sullo spazio delle fasi a N particelle, che indichiamo con $F_N(\underline{x}, \underline{v}, t)$, perchè nel limite si deve ottenere una equazione per la densità sullo spazio delle fasi a una particella,

$$F_N(x, v, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) \delta(v - v_i) \quad (12.3)$$

Consideriamo una funzione test smooth $g(\underline{x}, \underline{v})$, integriamo e deriviamo rispetto al tempo

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int dx dv F_N(x, v, t) g(x, v) &= \frac{1}{N} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N g(x_i, v_i) \\ \frac{1}{N} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N g(x_i, v_i) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial g}{\partial x_i^\beta} v_i^\beta + \frac{\partial g}{\partial v_i^\beta} \frac{d}{dt} v_i^\beta \right] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial g}{\partial x_i^\beta} v_i^\beta - \frac{1}{N} \sum_j \frac{\partial g}{\partial v_i^\beta} \frac{\partial \phi}{\partial x_i^\beta}(|x_i - x_j|) \right] \end{aligned} \quad (12.4)$$

Integrando per parti si ha

$$\frac{\partial}{\partial t} F_N = -v \cdot \nabla_x F_N + \nabla_v F_N \cdot \int dy \nabla_y \phi(|x - y|) \bar{\rho}(y)$$

da cui passando al limite si ottiene l'equazione di Vlasov

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x, v; t) = -v \cdot \nabla_x \rho + \nabla_v \rho \cdot \int dy dw \rho(y, w; t) \nabla_y \phi(|x - y|) \quad (12.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N f(x_i, v_i) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial g}{\partial x_i^\beta} v_i^\beta - \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{1}{N} \frac{\partial g}{\partial v_i^\beta} \frac{\partial \phi}{\partial x_i^\beta} (|x_i - x_j|) \right] \\ &= \int dx dv v \cdot \nabla_x g F_N - \int dx dv F_n \nabla_v g \cdot \int dy dw \nabla_y \phi(|x - y|) F_N(y, w) \\ &= \int dx dv v \cdot \nabla_x g F_N - \int dx dv F_n \nabla_v g \cdot \int dy \nabla_y \phi(|x - y|) \bar{\rho}(y) \end{aligned}$$

dove $\bar{\rho}(y) = \int dw F_N(y, w)$.

Il secondo approccio parte dall'equazione di Liouville.

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. Lo stato x del sistema nello spazio delle fasi ad N particelle $\Gamma = (\Lambda \times \mathbb{R}^3)^N$ è definito dalla relazione

$$x := (x_1, \dots, x_N) = (q_1, v_1, \dots, q_N, v_N) \quad (12.6)$$

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

$$\frac{\partial P_t}{\partial t}(x) = \{H, P_t\}(x) \quad (12.7)$$

dove

$$\{f, g\} := \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial v_i} - \frac{\partial g}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial v_i} \right) \quad (12.8)$$

è detta *parentesi di Poisson* delle osservabili f e g . Calcolando la (12.7) sull'hamiltoniana (12.1) e definendo l'operatore differenziale lineare

$$H_N f(x) := \sum_{i=1}^N \left(-v_i \frac{\partial f}{\partial q_i}(x) + \sum_{j:j \neq i} \frac{\partial \phi}{\partial q_i}(q_i - q_j) \frac{\partial f}{\partial v_i}(x) \right) \quad (12.9)$$

l'equazione di Liouville può essere scritta nella forma

$$\frac{\partial P_t}{\partial t}(x) = H_N P_t(x) \quad (12.10)$$

Definiamo le funzioni di correlazione a j particelle ($j = 1, \dots, N$) nel modo seguente

$$\rho_j(x_1, \dots, x_j; t) := \frac{N!}{(N-j)!} \int_{(\Lambda \times \mathbb{R}^3)^{(N-j)}} dx_{j+1} dx_{j+2} \dots dx_N P_t(x_1, \dots, x_N) \quad (12.11)$$

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 12.11 per $j = 1$, si ottiene

$$\rho_1(x_1; t) = N \int dx_2 \dots dx_N P_t(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (12.12)$$

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 (12.11) rispetto a t , portando la derivata sotto il segno di integrale e applicando l'equazione di Liouville (12.10). Il risultato è

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t}(t; x_1, \dots, x_j) = \frac{N!}{(N-j)!} \int dx_{j+1} \dots dx_N \left[- \sum_{i=1}^N v_i \frac{\partial P_t}{\partial q_i} + \sum_{i,k:i \neq k}^{1,N} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial P_t}{\partial v_i} \right] \quad (12.13)$$

È possibile semplificare tale equazione nel modo seguente. Cominciamo a lavorare sulla prima somma. Poniamo

$$\Theta(x_1, \dots, x_j; t) := - \frac{N!}{(N-j)!} \sum_{i=1}^N \int dx_{j+1} \dots dx_N v_i \frac{\partial P_t}{\partial q_i} \quad (12.14)$$

La somma che definisce Θ può essere sempre scritta nella forma

$$\Theta(x_1, \dots, x_j; t) = \sum_{i=1}^j (\dots) + \sum_{i=j+1}^N (\dots) = \quad (12.15)$$

$$- \sum_{i=1}^j v_i \frac{\partial \rho_j}{\partial q_i} - \frac{N!}{(N-j)!} \sum_{i=j+1}^N \int dx_{i=j+1} \dots x_N v_i \frac{\partial P_t}{\partial q_i} \quad (12.16)$$

L'ultima somma nella (12.16) è identicamente nulla. Infatti

$$\int_{\Lambda \times \mathbb{R}^3} dq_i dp_i v_i \frac{\partial P_t}{\partial q_i} = \int_{\mathbb{R}^3} dv_i \int_{\Lambda} dq_i \nabla \cdot (P_t v_i) = \int_{\mathbb{R}^3} dv_i \int_{\partial \Lambda} d\sigma(q_i) n \cdot v_i P_t \quad (12.17)$$

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

$$\Theta(x_1, \dots, x_j; t) = - \sum_{i=1}^j v_i \frac{\partial \rho_j}{\partial q_i}(x_1, \dots, x_j; t) \quad (12.18)$$

Lavoriamo ora sulla seconda somma nell'equazione (12.13). Poniamo

$$\Delta(x_1, \dots, x_j; t) := \frac{N!}{(N-j)!} \sum_{i,k:i \neq k}^{1,N} \int dx_{j+1} \dots dx_N \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial P_t}{\partial v_i} \quad (12.19)$$

Come nel caso precedente, scriviamo Δ nella forma

$$\Delta = \sum_{i=1}^j \sum_{k \neq i} (\dots) + \sum_{i=j+1}^N \sum_{k \neq i} (\dots) \quad (12.20)$$

Con un argomento analogo a quello utilizzato nella (12.17) dimostriamo che la somma su i da $j+1$ ad N è nulla.

$$\begin{aligned} \int dq_i dp_i \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial P_t}{\partial v_i} &= \int_{\Lambda} dq_i \int_{R^3} dv_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left(P_t \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \right) = \\ &= \int_{\Lambda} dq_i \int_{S_{\infty}} d\sigma(v_i) \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \cdot n P_t = 0 \end{aligned} \quad (12.21)$$

in quanto sulla sfera all'infinito S_{∞} nello spazio delle velocità la P_t è identicamente nulla. Possiamo allora scrivere

$$\begin{aligned} \Delta(x_1, \dots, x_j; t) &= \frac{N!}{(N-j)!} \left(\sum_{i,k:i \neq k}^{1,j} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial}{\partial v_i} \int dx_{j+1} \dots dx_N P_t + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i=1}^j \sum_{k=j+1}^N \int dx_{j+1} \dots dx_N \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial P_t}{\partial v_i} \right) \end{aligned} \quad (12.22)$$

La prima somma nella (12.22) 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

$$\begin{aligned} &\frac{N!}{(N-j-1)!} \sum_{i=1}^j \int dx_{j+1} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_{j+1}) \frac{\partial}{\partial v_i} \int dx_{j+2} \dots dx_N P_t = \\ &= \sum_{i=1}^j \int dx_{j+1} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_{j+1}) \frac{\partial \rho_{j+1}}{\partial v_i} \end{aligned} \quad (12.23)$$

Raccogliendo tutti i termini sviluppati, possiamo scrivere l'equazione differenziale per la ρ_j nella forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_j}{\partial t} (x_1, \dots, x_j; t) &= - \sum_{i=1}^j v_i \frac{\partial \rho_j}{\partial q_i} + \sum_{i,k=1:i \neq k}^j \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_k) \frac{\partial \rho_j}{\partial v_i} \\ &\quad + \sum_{i=1}^j \int dx_{j+1} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_{j+1}) \frac{\partial \rho_{j+1}}{\partial v_i} \end{aligned} \quad (12.24)$$

ovvero

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} = H_j \rho_j + C_{j,j+1} \rho_{j+1} \quad j = 1, \dots, N \quad (12.25)$$

dove si è posto

$$C_{j,j+1} h = \sum_{i=1}^j \int dx_{j+1} \frac{\partial \phi}{\partial q_i} (q_i - q_{j+1}) \frac{\partial h}{\partial v_i} \quad (12.26)$$

Il sistema di equazioni (12.25) 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 (12.25) è invariante per inversione temporale. Infine, poichè risulta

$$\rho_N = N!P_t \quad \text{e} \quad \rho_{N+1} \equiv 0 \quad (12.27)$$

l'equazione per ρ_N coincide con l'equazione di Liouville. Se consideriamo una interazione in termine di un potenziale di Kac $U_\gamma(q_i - q_j)$ e riscaliamo tempo e spazio come $q_i = \gamma^{-1}z_i$ e $\tau = \gamma^{-1}t$ le equazioni in termini delle variabili macroscopiche t, z per un sistema di $N = \gamma^{-d}$ particelle si scrivono

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x_i(t) &= v_i(t) \\ \frac{d}{dt}v_i(t) &= -\gamma^d \sum_{j=1}^N \nabla U(z_i - z_j) \end{aligned}$$

Se si scrivono le equazioni della gerarchia e si ripetono i conti precedenti si vede che i termini $C_{j,j+1}$ che accoppiano le equazioni sopravvivono nel limite e si ottiene la gerarchia di Vlasov. Se si assume un dato iniziale fattorizzato, le soluzioni della gerarchia di Vlasov rimangono fattorizzate e nel limite nel termine C compaiono i prodotti.

L'equazione per la funzione di correlazione a un punto è:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t}(z_1, v_1; t) = -v_i \frac{\partial \rho_1}{\partial z_1} + \frac{1}{N} \frac{\partial \phi}{\partial z_1}(q_1 - q_2) \frac{\partial \rho_1}{\partial v_1} + \int dv_2 dz_2 \nabla \phi \frac{\partial \rho_2(v_1, v_2, z_1, z_2)}{\partial v_1} \quad (12.28)$$

Nel limite il secondo termine tende a zero e $\rho(v_1, v_2, z_1, v_2 z_2) = \rho(v_1, z_1)\rho(v_2, z_2)$ e si ha l'equazione di Vlasov

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(z, v; t) = -v \cdot \nabla_z \rho + \nabla_v \rho \cdot \int dz' dw \rho(z', w; t) \nabla_y \phi(|z - z'|) \quad (12.29)$$

in cui compare la forza autoconsistente data in termini della densità di Vlasov $\rho(y, w; t)$.

Osservazione. Se non si considera il potenziale di Kac (cioè non c'è il fattore $\frac{1}{N}$ davanti al potenziale), si fa crescere N come γ^{-2} (limite di Boltzmann-Grad), i termini $C_{j,j+1}$ danno un contributo finito e le equazioni sono accoppiate. In seguito all'ipotesi di caos molecolare si riesce a disaccoppiare le equazioni e nel limite si ottiene l'equazione di Boltzmann.

In letteratura si dice che si ottiene l'equazione di Vlasov dalla gerarchia per un gas privo di collisioni. Con questo si intende che non è presente un termine di potenziale a corto range, che è necessario per descrivere un plasma. E' possibile aggiungere le collisioni e sotto uno opportuno scaling ottenere l'equazione di Vlasov-Boltzmann o fare altre approssimazioni e ottenere altre equazioni tipo ad es. Lenard-Balescu.

12.2. Modelli di swarming. L'equazione di Vlasov ha molte applicazioni, principalmente nelle teoria dei plasmii e anche in astrofisica. Qui consideriamo alcuni modelli per il volo di uccelli la cui teoria di campo medio è descritta da una variante dell'equazione di Vlasov.

Il modello di Cucker-Smale tenta di fornire un modello per il volo degli uccelli basato sul principio dell'allineamento: gli uccelli tentano di individuare la direzione in cui vola il gruppo e di allinearsi con esso. E' un modello semplice, che non tiene conto di altri effetti importanti, come la necessità di una repulsione a corta distanza e di una attrazione a lunga distanza. Il modello è definito dalle seguenti equazioni del moto

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i \quad (12.30)$$

$$\frac{dv_i}{dt} = \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{1}{N} H(|x_i - x_j|)(v_j - v_i) \quad i = 1, \dots, N \quad (12.31)$$

dove

$$H(r) = \frac{K}{(a^2 + r^2)^\gamma}$$

La forza in questo modello dipende dalla differenza di velocità in modo che ogni uccello aggiusta la sua velocità tenendo conto di una media pesata delle differenze di velocità degli altri uccelli e la media dipende dalla distanza in modo che gli uccelli più vicini hanno più influenza di quelli più lontani.

Siccome la forza ha un fattore di scala $\frac{1}{N}$, se si ripetono i conti precedenti si arriva ad una equazione tipo Vlasov per questo modello

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x, v; t) + v \cdot \nabla_x \rho = \nabla_v [\rho \xi(\rho)]$$

dove

$$\xi(\rho) = \int dy dw \rho(y, w; t) \frac{K(v - w)}{(a^2 + |x - y|^2)^\gamma}$$

in cui come al solito compare la forza autoconsistente ma c'è anche un termine di derivata della forza rispetto alla velocità perchè in questo modello la forza dipende anche dalla velocità.

Derivazione

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{1}{N} \sum_i f(x_i, v_i) &= \frac{1}{N} \sum_i v_i \cdot \nabla_x f + \frac{1}{N^2} \sum_{ij} H(|x_i - x_j|) \nabla_v f \cdot (v_j - v_i) \\ &= \frac{1}{N} \sum_i v_i \cdot \nabla_x f - \frac{1}{N} \sum_i \left[\frac{1}{N} \sum_j H(|x_i - x_j|) \nabla_v f \cdot v_i + \frac{1}{N} \sum_i \left[\frac{1}{N} \sum_j H(|x_i - x_j|) v_j \right] \cdot \nabla_v f \right] \end{aligned}$$

Osserviamo che

$$\left[\frac{1}{N} \sum_j H(|x - x_j|) \right] = \int dx H(x - y) \frac{1}{N} \sum_j \delta(y - x_j) = \int dx H(x - y) \int dv F^N(y, v)$$

dove

$$\int dv F^N(y, v) = \int dv \frac{1}{N} \sum_i \delta(y - x_i) \delta(v - v_i) := \rho_{F^N}$$

Inoltre

$$\left[\frac{1}{N} \sum_j H(|x_i - x_j|) v_j \right] = \int dx H(x - y) \frac{1}{N} \sum_j \delta(y - x_j) v_j = \int dx H(x - y) \int dv v F^N(y, v)$$

dove

$$\int dv v F^N(y, v) = \int dv \frac{1}{N} \sum_i \delta(y - x_i) \delta(v - v_i) v_i := m_{F^N}$$

Passando al limite, $F^N(y, v) \rightarrow \rho(y, v)$ e

$$\frac{d}{dt} \int dx dv \rho(y, v) f(x, v) = \int dx dv \rho(y, v) [v \cdot \nabla_x f(x, v) - H \star \rho \nabla_v f \cdot v + H \star m_\rho \cdot \nabla_v f]$$

Che è la forma debole della equazione per ρ . Infatti, integrando per parti,

$$\frac{d}{dt}\rho(y, v) = -v \cdot \nabla_x \rho + \nabla_v \cdot (v\rho)(H \star \int dv \rho) - \nabla_v \cdot (H \star m_\rho \rho)$$

Simulazioni numeriche confermano che il modello è in grado di prevedere il volo allineato.

Un altro modello più complesso è dato da

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i \quad (12.32)$$

$$\frac{dv_i}{dt} = (\alpha - \beta|v_i|^2)v_i - \sum_{j:j \neq i}^{1,N} \frac{1}{N} \nabla U(|x_i - x_j|) \quad i = 1, \dots, N \quad (12.33)$$

Il termine con α modella l'auto propulsione del singolo elemento, mentre il termine con β rappresenta la frizione. La combinazione e il bilanciamento di questi due termini determinano la tendenza del sistema a raggiungere una velocità asintotica $|v| = \frac{\alpha}{\beta}$. Una scelta tipica per il potenziale è quella del potenziale radiale di Morse

$$U(r) = -C_A e^{-\frac{r}{\ell_A}} + C_B e^{-\frac{r}{\ell_B}}$$

il primo termine è attrattivo, con intensità C_A e range ℓ_A e il secondo è repulsivo, con intensità C_B e range ℓ_B .

La scelta ottimale è $C := C_B/C_A \ell_A > 1$ and $\ell = \ell_B/\ell_A < 1$ che corrisponde a attrazione di lungo range e repulsione a corto raggio. Il limite di campo medio è dato da

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x, v; t) + v \cdot \nabla_x \rho = \nabla_v \rho \cdot (\nabla_x U \star \int dv \rho) - \nabla_v [(\alpha - \beta|v|^2)v\rho]$$

12.3. Sistema di vortici. Un altro esempio di limite di campo medio è basato sulla interpretazione dell'equazione di Eulero per la vorticità in 2d come una equazione di Vlasov.

Approssimiamo la vorticità in un fluido non viscoso in termini della media empirica

$$\omega^N(x) = \frac{1}{N} \sum_i \omega_i \delta(x_i - x)$$

in modo che

$$\int_A dx f(x) \omega^N(x) = \frac{1}{N} \sum_i \omega_i f(x_i)$$

con ω_i l'intensità del vortice. Per N fissato possiamo pensare ad un profilo di vorticità concentrato intorno ad alcuni punti.

In base alla relazione formula (11.3)

$$u(x) = \int_D dy K_D(x, y) \omega(y)$$

con

$$K_D(x, y) = \nabla_x^\perp G_D(x, y) = \nabla_x^\perp G(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \frac{(x-y)^\perp}{|x-y|^2} + \mathcal{K}_D, ,$$

abbiamo che il campo di velocità u è approssimato da

$$\int_A dx f(x) u^N(x) = \frac{1}{N} \sum_i \omega_i f(x_i) K_D(x, x_i)$$

Consideriamo un modello di campo medio di vortici interagenti la cui dinamica è data in termini di un potenziale $K_D(x_i, x_j)$

$$\frac{d}{dt}x_i = \frac{1}{N} \sum_j \omega(x_j) K_D(x_j, x_i)$$

Notare che il potenziale è singolare.

Derivando $\frac{1}{N} \sum_i \omega_i f(x_i)$ rispetto al tempo si ottiene

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{N} \sum_i \omega_i f(x_i) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} \omega_i \frac{1}{N} \sum_j \omega_j^\alpha f_j K_D(x_j, x_i)$$

Nel limite si ottiene una equazione per ω

$$\frac{d}{dt} \int f(x) \omega(x) = \int dx \omega(x) \nabla f \cdot u(x)$$

che è la forma debole dell'equazione di Eulero per la vorticità. Infatti

$$\int dx f(x) \omega(x) + \int dx f(x) u \cdot \nabla \omega = 0$$

integrando per parti il secondo termine diventa

$$\int dx \omega \cdot \nabla (uf) = \int dx \omega u(x) \cdot \nabla f$$

perchè u è a divergenza nulla.

Il modello dei vortici può essere simulato numericamente dando informazioni sulle soluzioni dell'equazione di Eulero.

12.4. Equazione di Vlasov-Fokker-Planck. Consideriamo una equazione in cui siano presenti sia il termine di Vlasov che il termine di Fokker-Planck

$$\partial_\tau f + v \cdot \nabla_x f + F \cdot \nabla_v f = L_\beta f \quad (12.34)$$

dove β è la temperatura inversa del reservoir di calore la cui interazione col sistema è modellato dal termine di Fokker-Planck, che è un operatore sullo spazio delle velocità \mathbb{R}^3

$$L_\beta f := \nabla_v \cdot \left(M_\beta \nabla_v \left(\frac{f}{M_\beta} \right) \right), \quad M_\beta(v) = \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{-3/2} \exp(-\beta|v|^2/2)$$

F è la forza autoconsistente

$$F(x, \tau) = -\nabla_x \int dx' U(|x - x'|) \int dv f(x', v, \tau),$$

Il sistema si può ottenere come limite di campo medio di un sistema stocastico di particelle interagenti descritto da processi di Ornstein-Uhlenbeck interagenti.

Questa evoluzione ammette un funzionale di Liapunov, che ha il significato di energia libera per il sistema

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(f) := & \int dx dv [(f \ln f)(x, v) + \frac{\beta}{2} \int dx dv f v^2 \\ & + \beta \int dx dy U((x - y)) \int dv f(x, v) \int dv' f(y, v')] \end{aligned}$$

\mathcal{G} è un funzionale decrescente nel tempo sulle soluzioni dell'equazione di VFP. La parte di Vlasov dà contributo zero alla derivata. Infatti

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int dx dv f \log f &= - \int dx dv (1 + \log f) (v \cdot \nabla_x + F \cdot \nabla_v) f \\ &= \int dx dv [\nabla_x \cdot (v f \log f) + \nabla_v \cdot (F f \log f)] = 0 \end{aligned}$$

e ancora

$$\frac{d}{dt} \int dx dv f \beta \left[\frac{v^2}{2} + U \star \rho \right] = - \int dx dv \beta \left[\frac{v^2}{2} + U \star \rho \right] [(v \cdot \nabla_x + F \cdot \nabla_v) f] + \int dx dv \beta f U \star \dot{\rho}$$

Il primo termine è zero. Infatti si riduce a

$$\int dx dv [\beta v \cdot F f + \beta U \star \rho v \cdot \nabla_x f] = \int dx dv [\beta F f - \beta v \cdot \nabla_x (U \star \rho) f] = 0$$

Il termine $A = \int dx dv \beta f U \star \dot{\rho}$ si tratta così

$$\int dx dv \beta f U \star \dot{\rho} = - \int dx dv \beta f(xv) dy U(x-y) \int dw [(w \cdot \nabla_y + F \cdot \nabla_w) f(w, y)]$$

La derivata rispetto a w integrando per parti dà zero.

La derivata rispetto a y invece

$$\beta \int dx dy dv dw f(xv) U(x-y) w \cdot \nabla_y f(w, y) = 0$$

perchè è anche uguale a

$$\begin{aligned} - \int dx dv dw dy \beta f(xv) w \cdot \nabla_y U(x-y) f(w, y) &= + \beta \int dx dy dv dw f(xv) w \cdot \nabla_x U(x-y) f(w, y) = \\ &= - \beta \int dx dy dv dw w \cdot \nabla_x f(xv) U(x-y) f(w, y) \end{aligned}$$

e quindi è uguale al suo opposto (scambiando x con y) e quindi è zero.

L'unico termine che dà un contributo differente da zero alla derivata temporale di \mathcal{G} è quello di Fokker-Planck

$$\frac{d}{dt} \mathcal{G} = \int dx dy \nabla_v \cdot (M_\beta \nabla_v \frac{f}{M_\beta}) \ln \frac{f}{M_\beta} = - \int dx dy \frac{M_\beta^2}{f} [\nabla_v \frac{f}{M_\beta}]^2 \leq 0 \quad (12.35)$$

ed è zero se e solo se f è una funzione gaussiana della velocità. Gli stati di equilibrio sono Maxwelliane locali con media zero $u = 0$, varianza $T = \beta^{-1}$, e densità ρ : $\rho = \int dv f(x, v, \tau)$. Inoltre, il funzionale \mathcal{G} valutato su funzioni della forma $f(x, v, \tau) = M_\beta(v) \rho(x, \tau)$ con massa totale fissata $\int dv f$, coincide con il funzionale macroscopico energia libera

$$\mathcal{F}(\rho) = \int dx [(\rho \ln \rho)(x)] + \beta \int dx dy U((x-y)) \rho(x) \rho(y). \quad (12.36)$$

che si ottiene nella teoria di campo medio. I minimizzatori di $\mathcal{F}(\rho)$ sono le soluzioni stazionarie dell'equazione di VFP.

Referenze [1], [2] e [5].

REFERENCES

- [1] J. A. Carrillo, Young-Pil Choi, and M. Hauray, *The derivation of swarming models: mean-field limit and Wasserstein distances*. Part of the CISM International Centre for Mechanical Sciences book series (CISM, volume 553)
- [2] J. A. Carrillo, M. Fornasier, G. Toscani, and F. Vecil *Mathematical Modeling of Collective Behavior* pp 297-336 In: Naldi G., Pareschi L., Toscani G. (eds) *Mathematical Modeling of Collective Behavior in Socio-Economic and Life Sciences. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology*. Birkhuser Boston
- [3] K L Chung *Markov Chains with Stationary Transition Probabilities* Springer New York 1967
- [4] R. Esposito and R. Marra *Hydrodynamics as scaling limit of kinetic systems and stochastic particle systems*, Trends in Statistical Physics 3, Research Trends, (2000).
- [5] C. Marchioro, M. Pulvirenti *Mathematical Theory of Incompressible Non viscous Fluids*, Applied math Sciences **96** 1994
- [6] E. Nelson *Dynamical Theories of Brownian Motion* Princeton University Press (1967)
- [7] G. Parisi "Statistical Field Theory", *Frontiers in Physics*, Addison Wesley, New York, (1988),
- [8] A. Sokal *Monte Carlo methods in Statistical; Mechanics: Foundations and New Algorithms* In: DeWitt-Morette C., Cartier P., Folacci A. (eds) *Functional Integration. NATO ASI Series (Series B: Physics)*, vol 361. Springer, Boston, MA, (1997)
- [9] Rozanov *Probability theory: a concise course*, Dover Publications Inc. (1977)
- [10] H. Spohn, *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*, Springer-Verlag (1991)