CORSO DI MECCANICA STATISTICA

Nota sull'**IPOTESI ERGODICA**

M. Falcioni, *2005*

I. L' IPOTESI

I sistemi macroscopici sono composti da un numero molto elevato (dell' ordine del numero di Avogadro) di particelle; questo fatto comporta la necessità pratica di una descrizione statistica, in termini di "insiemi statistici" vale a dire, usando una terminologia matematicamente più accurata, in termini di distribuzioni di probabilità nello spazio delle fasi.

Indicando con $\mathbf{q}_i$ e $\mathbf{p}_i$, rispettivamente, il vettore posizione e il vettore impulso della i-ma particella, lo stato di un sistema di N particelle è rappresentato, al tempo t, da un vettore $\Gamma(t) \equiv (\mathbf{q}_1(t), \ldots, \mathbf{q}_N(t), \mathbf{p}_1(t), \ldots, \mathbf{p}_N(t))$ in uno spazio di dimensione $6\,N$, detto spazio delle fasi. Le osservabili del sistema sono rappresentate da funzioni, $A(\Gamma)$, definite nello spazio delle fasi. Le particelle sono soggette alle leggi deterministiche della meccanica classica e quindi $\Gamma(t)$ si evolve in accordo con le equazioni di Hamilton. Se la funzione Hamiltoniana non dipende esplicitamente dal tempo, come assumeremo sempre nel seguito, allora l' energia è una quantità conservata durante il moto, il quale quindi si sviluppa su una ipersuperficie a energia fissata. Indicando con $V(\{\mathbf{q}_j\})$ il potenziale di interazione tra le particelle, l' Hamiltoniana si scrive

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m} + V(\{\mathbf{q}_j\}) \,, \tag{1}$$

e le equazioni di evoluzione sono:

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\mathbf{q}_i/\mathrm{d}t \ &= \partial H/\partial \mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i/m \\ \mathrm{d}\mathbf{p}_i/\mathrm{d}t \ &= -\partial H/\partial \mathbf{q}_i = -\partial V/\partial \mathbf{q}_i \end{aligned} \tag{2}$$

con $i = 1, \ldots, N$. Supponiamo di misurare un' osservabile del sistema, che si trova in equilibrio termodinamico. È fondamentale notare che la scala dei tempi macroscopici, quelli delle osservazioni sul sistema, è molto più grande della scala dei tempi della dinamica microscopica (2), quelli che dettano la rapidità dei cambiamenti a livello molecolare. Ciò significa che un dato sperimentale è il risultato di un' unica osservazione durante la quale, in realtà, il sistema passa attraverso un grandissimo numero di stati microscopici diversi. Se il dato si riferisce all' osservabile $A(\Gamma)$, esso va quindi confrontato con una media eseguita lungo l' evoluzione del sistema e calcolata su tempi molto lunghi (dal punto di vista microscopico):

$$\overline{A}(t_0,\, T) = \frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_0+T} A(\Gamma(t))\mathrm{d}t\,. \tag{3}$$

Il calcolo della media temporale $\overline{A}(t_0, T)$ di un' osservabile qualunque richiede, in linea di principio, sia la conoscenza dello stato microscopico completo del sistema in un certo istante, sia la determinazione della corrispondente traiettoria nello spazio delle fasi. La richiesta è evidentemente inesaudibile per cui, se $\overline{A}(t_0, T)$ dipendesse in maniera molto forte dallo stato iniziale del sistema, non si potrebbero fare previsioni utili neppure di tipo statistico, anche trascurando la difficoltà di integrare il sistema (2).

L' *ipotesi ergodica* indica una via per superare questo ostacolo [1]. Essa sostanzialmente afferma che ogni ipersuperficie di energia fissata è completamente accessibile a qualunque moto con la data energia; ovvero: una ipersuperficie di energia costante non può essere suddivisa in regioni (misurabili) contenenti ognuna moti completi, cioè regioni invarianti per evoluzione temporale (se questa condizione è soddisfatta la ipersuperficie si dice 'metricamente non decomponibile' o 'metricamente transitiva'). Inoltre, per ogni traiettoria il tempo medio di permanenza in una certa regione è proporzionale al volume della regione.

Se le condizioni precedenti, che costituiscono appunto il nucleo dell' ipotesi ergodica, sono soddisfatte, segue che, per T sufficientemente grande, la media in (3) dipende solo dall' energia del sistema e assume quindi lo stesso valore su tutte le evoluzioni con uguale energia; inoltre, questo valore comune è calcolabile eseguendo una media di $A(\Gamma)$ in cui tutti (e solamente) gli stati con la fissata energia contribuiscono con uguale peso. La densità di probabilità uniforme sulla superficie con energia fissata definisce la misura microcanonica, o insieme microcanonico; indicando tale densità con $\rho_{mc}(\Gamma)$, l' ipotesi ergodica permette di scrivere:

$$\overline{A} \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_0+T} A(\Gamma(t))\mathrm{d}t = \int A(\Gamma)\rho_{mc}(\Gamma)\mathrm{d}\Gamma \equiv \langle A\rangle\,. \tag{4}$$

Va sottolineato che la validità della precedente equazione ci libera contemporaneamente dalla necessità di determinare uno stato (iniziale) del sistema e di risolvere le equazioni del moto. La validità, o meno, della (4), cioè la possibilità di sostituire la media nel tempo di un' osservabile qualunque con una media nello spazio delle fasi, costituisce il *problema ergodico*. Poiché se un sistema isolato in equilibrio risulta descrivibile mediante l' insieme microcanonico, non è difficile mostrare, per esempio, che un sistema in contatto con un termostato è ben descritto dall' insieme canonico, la dimostrazione della (4) può essere ritenuta la legittimazione dinamica dell' introduzione degli insiemi statistici.

Il problema ergodico nasce, insieme all' ipotesi ergodica, dalle idee di L. Boltzmann sulla meccanica statistica ed è stato in seguito studiato in termini matematici generali soprattutto da J. von Neumann e D. Birkhoff.

II. COMMENTI

In realtà, per un sistema macroscopico il problema dell' ergodicità, oltre che di difficile soluzione, potrebbe essere sostanzialmente irrilevante nel contesto della meccanica statistica. A causa del grande numero di particelle, e quindi dell' enormità delle regioni di spazio delle fasi coinvolte, i tempi T necessari perché le due medie nell' eq. (4) risultino confrontabili, possono diventare molto piú grandi dell' età dell' Universo, *per osservabili qualunque.* In questo caso T non avrebbe nessun interesse fisico, e ugualmente la relazione (4).

Però, proprio il grande numero di microcomponenti di un sistema macroscopico permette il recupero della (4). Questo è possibile basandosi sulle seguenti considerazioni:

a) la questione interessante per la meccanica statistica è la validità della (4) non per un' osservabile qualunque, bensì per le poche grandezze rilevanti nella termodinamica;

b) queste grandezze (per es., l' energia cinetica, la pressione, la densità) hanno una struttura particolare, cioè sono esprimibili come somma di contributi separati dovuti ai costituenti microscopici;

c) nei sistemi termodinamici, come già notato, il numero di costituenti microscopici è molto grande.

Un esempio delle conclusioni che si possono trarre da questa impostazione del problema è il seguente risultato, dovuto a Khinchin [2], che riguarda un gas ideale:

- se A è esprimibile come somma di N componenti, dipendenti ognuna dalle variabili di una sola particella ($A = \sum_{i=1}^{N} f(\mathbf{q}_i\,, \mathbf{p}_i)$, nel caso più semplice e frequente di componenti tutte uguali) allora, sotto condizioni abbastanza generali, su una ipersuperficie di energia fissata la misura relativa (ovvero la probabilità rispetto alla misura microcanonica ρ_{mc}) dei punti appartenenti a traiettorie per le quali vale la disuguaglianza

$$\left| \frac{\overline{A}}{\langle A \rangle} - 1 \right| > \alpha N^{-1/4} \tag{5}$$

(dove α è una costante indipendente da N) è una quantità piccola dell' ordine di $N^{-1/4}$.

Sostanzialmente si ha che, nel limite $N \to \infty$ la (4) è valida (tranne che in una zona dello spazio delle fasi, che è sempre più piccola all' aumentare di N) per una classe interessante di funzioni (che si possono chiamare *funzioni somma*); e questo indipendentemente dai dettagli della dinamica. L' interesse si sposta quindi dalla ergodicità come proprietà del sistema, alla ergodicità come proprietà dell' osservabile.

Ancora più significativo, per il nostro scopo, è che la proprietà enunciata delle medie temporali ha origine nel fatto che, per grandi valori di N, le osservabili di questo tipo sono soggette alla legge dei grandi numeri e, su una ipersuperficie di data energia, assumono un valore pressoché costante (macroscopicamente). Questo valore ben rappresenta $\langle A \rangle$, la media dell' osservabile nello spazio delle fasi e, d' altra parte, in queste condizioni il risultato di una media temporale non dipende molto da T né, generalmente, dallo stato di partenza, e la relazione (4) può valere anche per 'piccoli' T. Assumeremo quindi che la media sulla distribuzione microcanonica fornisca i valori corretti delle osservabili termodinamiche che si misurano sul sistema in equilibrio.

---

[1] Sull' origine dell' ipotesi ergodica si può leggere il paragrafo **9.1** del libro di G. Gallavotti: *Statistical Mechanics. A short treatise.* Il libro è consultabile nella biblioteca del Dipartimento, ma è anche scaricabile collegandosi all' indirizzo *http://ipparco.roma1.infn.it/pagine/libri.html.*

[2] A. J. Khinchin, *Mathematical Foundation of Statistical Mechanics* (Dover, New York, 1949).