Il contributo di Enrico Fermi ai sistemi non lineari: L'influenza di un articolo mai pubblicato

Massimo Falcioni e Angelo Vulpiani

1. – Introduzione

Nella produzione scientifica di Enrico Fermi ha una posizione importante e molto particolare l'articolo "Studies of non linear problems", frutto di una collaborazione con J. Pasta e S. Ulam [1]. Seguendo la consuetudine in uso tra gli studiosi del settore ci riferiremo a questo lavoro utilizzando la sigla FPU. L'articolo, scritto come nota interna dei laboratori di Los Alamos, fu completato nel maggio 1955, dopo la morte di Fermi, ma apparve per la prima volta nel 1965, come contributo N. 266 a "Note e Memorie", raccolta di scritti di Fermi curata, tra gli altri, da Emilio Segrè e pubblicata dall'Accademia dei Lincei e dall'Università di Chicago [2].

Il FPU ha avuto un ruolo decisivo nello sviluppo di importanti filoni di ricerca, per esempio quelli legati allo studio dei sistemi integrabili o del caos dinamico. S. Ulam nel commento al FPU scritto in occasione della pubblicazione di "Note e Memorie", riporta le opinioni dello stesso Fermi sul grande interesse dei risultati trovati e, più in generale, su

a) l'importanza di uno studio sistematico di sistemi non lineari
b) la necessità dell'utilizzo di simulazioni numeriche come metodo di indagine complementare allo studio teorico e all'esperimento in laboratorio.

È da sottolineare tuttavia che la rilevanza del lavoro non fu immediatamente riconosciuta dalla comunità dei fisici, tant'è che al FPU sono riservate appena tre righe nella unica biografia scientifica di Fermi, scritta da E. Segrè [3].

In questo capitolo discuteremo con un certo dettaglio il FPU, inquadrandolo nelle problematiche dalle quali è nato (cioè i fondamenti della meccanica statistica) e nei nuovi settori di ricerca che, prendendo ispirazione da esso, si sono sviluppati a partire dagli anni sessanta (meccanica non lineare, caos, sistemi integrabili e simulazioni numeriche).

© Società Italiana di Fisica

Lo schema del capitolo è il seguente. Nella sezione **2** è discusso il problema generale dei fondamenti della meccanica statistica e il problema ergodico. La sezione **3** è dedicata a illustrare lo stato dell'arte del problema ergodico e, più in generale, della "termalizzazione" nei sistemi non lineari prima del FPU. Nella sezione **4** saranno discussi i risultati ottenuti nel FPU. La sezione **5** illustrerà alcuni degli sviluppi che da questo lavoro hanno tratto diretta ispirazione: caos in sistemi hamiltoniani, sistemi integrabili (solitoni) e simulazioni numeriche (dinamica molecolare).

2. – Una breve panoramica sui fondamenti della meccanica statistica

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.

Se $\mathbf{q}_i$ e $\mathbf{p}_i$ indicano, rispettivamente, il vettore posizione e impulso della i-esima 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 $6N$, 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 (il caso quantistico non aggiunge molto, almeno a livello concettuale, al problema) e quindi $\Gamma(t)$ si evolve nello spazio delle fasi in accordo con le equazioni di Hamilton. Nel seguito supporremo sempre che la hamiltoniana non dipenda esplicitamente dal tempo, allora l'energia è una quantità conservata durante il moto, il quale quindi si sviluppa su una ipersuperficie ad energia fissata. Indicando con $V(\{\mathbf{q}_j\})$ il potenziale di interazione tra le particelle, la funzione 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 $i = 1, \ldots, N$. È fondamentale a questo punto notare che la scala dei tempi macroscopici, quelli di osservazione del 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 in realtà il risultato di un'unica osservazione durante la quale 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 $\overline{A}$ 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 $\overline{A}$ dipendesse in maniera molto forte dallo stato iniziale del sistema, non si potrebbero neanche fare previsioni di tipo statistico, anche trascurando la difficoltà di integrare il sistema (2). L'ipotesi ergodica permette di superare questo ostacolo [4]. 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 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, se T è sufficientemente grande, la media in (3) dipende solo dall'energia del sistema ed 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 $P_{\mathrm{mc}}(\Gamma)$, l'ipotesi ergodica permette di scrivere:

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

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 con una media nello spazio delle fasi, costituisce il problema ergodico. Poiché se un sistema isolato 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. Per quanto sopra esposto, a proposito della non decomponibilità metrica della superficie di energia costante, risulta chiaro il legame tra lo studio della validità della (4) e la ricerca dell'esistenza di costanti del moto, diverse dall'energia. Infatti, se esistessero integrali primi oltre all'energia il sistema risulterebbe sicuramente non ergodico in quanto non metricamente transitivo: scegliendo come osservabile A uno degli integrali primi si avrebbe $\overline{A} = A(\Gamma(0))$, che dipende dalla condizione iniziale $\Gamma(0)$ ed è quindi generalmente diverso da $\langle A\rangle$.

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 [5]. Non entreremo nei dettagli della teoria ergodica in tutta la sua generalità, ma limiteremo la discussione ad alcuni aspetti relativi alla meccanica statistica e ai sistemi con molti gradi di libertà.

Esiste una scuola di pensiero (che ha tra i suoi maggiori esponenti A. I. Khinchin [6] e L. D. Landau [7]) che considera tutta la problematica sulla ergodicità sostanzialmente irrilevante nel contesto della meccanica statistica, in quanto l'ipotesi ergodica sarebbe di fatto non necessaria per giustificare l'eq. (4) per osservabili fisicamente rilevanti. Questo punto di vista si basa sui fatti seguenti:

a) nei sistemi che interessano la meccanica statistica il numero di gradi di libertà è molto grande;

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

Le conclusioni di questa impostazione del problema sono contenute nel seguente teorema [6, 8]:
Se A è esprimibile come somma di N componenti, dipendenti ognuna dalle variabili di una sola particella ($A = \sum_{i=1}^{N} f(\mathbf{q}_i\,, \mathbf{p}_i)$) allora la misura relativa (ovvero la probabilità rispetto alla misura microcanonica P_{mc}) dei punti, sulla ipersuperficie di energia fissata, per i quali vale la disuguaglianza

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

(dove k 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; e questo indipendentemente dai dettagli della dinamica.

La richiesta di ergodicità (cioè la validità della (4), anche nella sua forma più debole per particolari osservabili e nel limite $N \to \infty$) non è da sola sufficiente per assicurare il "buon comportamento" statistico di un sistema hamiltoniano descritto dalle eq. (2). Un'ulteriore naturale richiesta è che i tempi per il raggiungimento dell'equilibrio statistico (cioè quei tempi lunghi dal punto di vista microscopico affinché la media temporale (3) sia uguale alla media sull'insieme statistico) siano ancora abbastanza brevi dal punto di vista macroscopico. Si desidera quindi che, in tempi "ragionevoli", un sistema perda il ricordo del suo particolare stato iniziale per raggiungere l'equilibrio, e questo si può ottenere richiedendo che due traiettorie nello spazio delle fasi che partano da stati vicini si separino rapidamente; un comportamento di tal genere è tipico dei sistemi caotici, le cui evoluzioni sono estremamente sensibili allo stato iniziale.

Una possibile caratterizzazione dell'avvicinamento all'equilibrio avviene mediante il concetto di "mescolamento" [5], o *mixing* con terminologia inglese, nozione risalente a

W. Gibbs. Allo scopo di avere un'idea intuitiva di come ci si avvicini all'equilibrio, si può considerare un insieme di sistemi identici, copie mentali di uno stesso sistema, i cui punti rappresentativi (i vari Γ), a un certo istante, siano concentrati in una piccola regione, che indicheremo con F, della ipersuperficie con energia costante. È naturale aspettarsi (in accordo con Gibbs) che, dopo un certo tempo, in seguito all'evoluzione, i punti rappresentativi vadano a distribuirsi in modo praticamente uniforme sulla ipersuperficie, cioè secondo la misura microcanonica. La rapidità con cui avviene il "riempimento" della regione permessa dà un'idea dei tempi di rilassamento all'equilibrio. Da un punto di vista più rigoroso, il mescolamento si può definire come segue. Un sistema dinamico, cioè una regola deterministica di evoluzione $\Gamma(0) \to \Gamma(t) = S^t\Gamma(0)$ (nel nostro caso l'evoluzione è data dalle equazioni di Hamilton), si dice mescolante rispetto a una distribuzione di probabilità $P(\Gamma)$, invariante sotto l'evoluzione, (nel nostro caso la distribuzione microcanonica) se per ogni coppia di regioni, G ed F, dello spazio delle fasi si ha

$$\mu\left(G \cap S^t F\right) \stackrel{t\to\infty}{\longrightarrow} \mu\left(G\right)\,\mu\left(F\right)\,, \tag{6}$$

dove $S^t F$ indica l'insieme nel quale si è evoluto F dopo un tempo t e $\mu\left(G\right) = \int_G P(\Gamma)\mathrm{d}\Gamma$ è il peso relativo della regione G. Il significato della proprietà di mescolamento definito dalla (6) è intuitivo se riferito all'esempio esposto poco sopra: la frazione di sistemi che al tempo $t = 0$ si trovano nella regione F dello spazio delle fasi e che al tempo t sono contenuti nella regione G tende ad un valore costante, proporzionale al volume della regione G. Il tempo di mescolamento, cioè il tempo necessario perché sia raggiunta la situazione limite nella (6), può essere pensato come il tempo necessario per perdere il ricordo delle condizioni iniziali e quindi per raggiungere l'equilibrio. Per quanto detto sopra, affinché risulti fisicamente significativo, il mescolamento deve avvenire in tempi ragionevoli. A differenza dell'ergodicità, la richiesta di mescolamento non ha semplificazioni nel limite $N \to \infty$.

3. – Qualche risultato della meccanica analitica e connessioni con il problema ergodico

La tematica dell'ergodicità si intreccia con il problema dell'esistenza di integrali primi (*i.e.*, quantità conservate) non banali, nei sistemi hamiltoniani; questione, questa, tipica della meccanica celeste. Data una hamiltoniana $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, con $\mathbf{q}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^N$, se esiste una trasformazione canonica che fa passare dalle variabili $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ alle variabili azione-angolo $(\mathbf{I}, \phi)$, in modo tale che l'hamiltoniana dipenda solo dalle azioni $\mathbf{I}$:

$$H = H_0(\mathbf{I})\,, \tag{7}$$

allora il sistema è detto integrabile. In questo caso l'evoluzione temporale del sistema è semplice da scrivere:

$$\begin{cases} I_i(t) &= I_i(0)\,, \\ \phi_i(t) &= \phi_i(0) + \omega_i(\mathbf{I}(0))\,t\,, \end{cases} \tag{8}$$

dove $\omega_i = \partial H_0/\partial I_i$ e $i = 1, \ldots, N$. Notare che in un sistema integrabile si hanno N integrali del moto indipendenti, in quanto tutte le azioni I_i si conservano, e i moti si sviluppano su tori N-dimensionali. Un importante esempio di sistema integrabile è fornito dal Sistema Solare, qualora si trascurino le interazioni tra i pianeti: in questo limite ci si riconduce al problema a due corpi (Sole-pianeta) per il quale è facile dimostrare l'integrabilità.

È abbastanza naturale porsi il problema dell'effetto di una perturbazione alla (7), cioè studiare l'hamiltoniana

$$H(\mathbf{I}, \phi) = H_0(\mathbf{I}) + \epsilon H_1(\mathbf{I}, \phi)\,. \tag{9}$$

Nel caso del Sistema Solare, ciò significherebbe tener conto delle interazioni tra i pianeti e si avrebbe $\epsilon \sim 10^{-3}$, che è il rapporto tra la massa di Giove (il maggiore dei pianeti) e il Sole. Le traiettorie del sistema perturbato (9) risultano "vicine" a quelle del sistema integrabile (7)? E l'introduzione del termine $\epsilon H_1(\mathbf{I}, \phi)$ permette ancora l'esistenza di integrali del moto in aggiunta all'energia?

Queste domande sono di ovvio interesse per la meccanica celeste, e sono rilevanti anche per il problema ergodico, come è stato osservato nella sezione precedente. Curiosamente in meccanica statistica e in meccanica celeste si hanno aspettative o, meglio, desideri opposti: in meccanica statistica si vorrebbero comportamenti dinamici "irregolari", in modo da giustificare l'ipotesi ergodica; al contrario, in meccanica celeste sono auspicati comportamenti "regolari", in modo che siano possibili previsioni accurate.

In un importantissimo lavoro del 1890, H. Poincaré [9] ha dimostrato che, in generale, un sistema del tipo (9), con $\epsilon \neq 0$, non ammette integrali primi analitici oltre all'energia. Un tale risultato sembra essere molto negativo per quanto concerne la meccanica celeste; vedremo tuttavia, nelle sezioni seguenti, che questa conclusione non è affatto scontata. Nel 1923 il giovane Fermi [10] prima generalizza il teorema di Poincaré, dimostrando che una ipersuperficie contenente tutte le traiettorie che hanno origine dai suoi punti deve coincidere con una ipersuperficie di energia costante; quindi mostra che prese a piacere due regioni, comunque piccole, di una ipersuperficie $H =$ costante esiste sempre qualche traiettoria che le attraversa entrambe. Da questi risultati Fermi argomentò, e questa conclusione venne sostanzialmente accettata da tutti (almeno nella comunità dei fisici), che i sistemi hamiltoniani in genere (*i.e.* a parte i casi integrabili, che sono da considerarsi atipici) sono ergodici, non appena $\epsilon \neq 0$.

4. – Un risultato inaspettato

Con i lavori di Fermi del 1923 sembrava che il problema dell'ergodicità fosse stato di fatto risolto (almeno per i fisici): anche in assenza di una vera dimostrazione, c'era un vasto consenso nel ritenere che i teoremi sulla non esistenza degli integrali primi regolari implicassero l'ergodicità. Negli anni trenta il problema ergodico diventò un settore di ricerca studiato quasi esclusivamente dai matematici, che lo affrontarono in modo generale ed astratto, con scarso interesse per le sue connessioni con la meccanica statistica.

Dopo la guerra Fermi continuò a frequentare periodicamente i laboratori di Los Alamos e, come scrive Ulam nella introduzione al FPU in "Note e Memorie", rapidamente si interessò allo sviluppo dei computer e soprattutto alle loro potenzialità di utilizzo nella ricerca scientifica. L'uso del computer che aveva in mente Fermi era estremamente originale (questo aspetto sarà trattato nella sezione **5**) e andava molto oltre il tradizionale utilizzo (per dirla in modo molto semplificato, di grossa calcolatrice per effettuare molte operazioni con numeri a molte cifre) che se ne era fatto fino agli anni quaranta. Fermi e Ulam avevano in mente un progetto di indagine sistematica, attraverso i computer finalmente disponibili, dei comportamenti dinamici di certi sistemi non lineari. Tale programma venne poi portato avanti da Ulam e J. Pasta e, in senso lato, da una nuova generazione di ricercatori che, a partire dagli anni sessanta e settanta cominciarono ad utilizzare la simulazione numerica come tecnica di indagine sistematica per i problemi non lineari.

Nel FPU venne studiata l'evoluzione dinamica di una catena di $N+2$ particelle uguali, di massa m, connesse da molle non lineari (cioè, per le quali la legge di Hooke non vale esattamente). La hamiltoniana del sistema è

$$H = \sum_{i=0}^{N} \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{K}{2}\big(q_{i+1} - q_i\big)^2 + \frac{\epsilon}{r}\big(q_{i+1} - q_i\big)^r \right] \tag{10}$$

con $q_0 = q_{N+1} = p_0 = p_{N+1} = 0$ e $r = 3$ oppure $r = 4$. Per $\epsilon = 0$ il sistema è integrabile, in quanto equivalente a N oscillatori armonici indipendenti. Infatti, introducendo i modi normali:

$$a_k = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_i q_i \sin \frac{i\,k\,\pi}{N+1} \qquad (k = 1, \ldots, N)\,, \tag{11}$$

si riduce il sistema a N oscillatori armonici non interagenti, con frequenze angolari

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{K}{m}}\, \sin \frac{k\,\pi}{2(N+1)} \tag{12}$$

ed energie

$$E_k = \frac{1}{2}\,\left(\dot{a}_k^2 + \omega_k^2 a_k^2\right)\,. \tag{13}$$

Le E_k, in questo caso, sono chiaramente delle costanti del moto e risultano proporzionali alle variabili di azione $E_k = \omega_k\, I_k$. La (10) è quindi un tipico esempio di sistema integrabile perturbato. Quando si considerano piccoli valori di ϵ non è difficile calcolare tutte le quantità termodinamicamente rilevanti nell'ambito della meccanica statistica, cioè mediando su un insieme statistico (ad esempio il microcanonico o il canonico). In particolare, si può mostrare che

$$\langle E_k \rangle \simeq \frac{E_{\rm tot}}{N}\,, \tag{14}$$

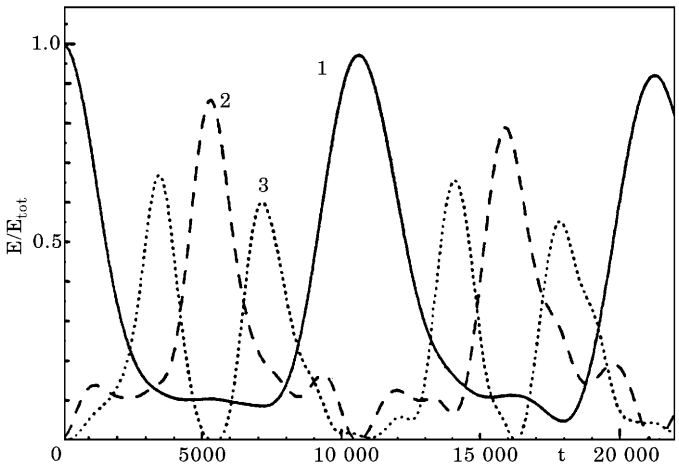

Figura 1. – $E_1(t)$, $E_2(t)$ e $E_3(t)$ per il modello FPU con $N = 32$, $r = 3$, $\epsilon = 0,1$ e $\mathcal{E} \simeq 0,07$. Questa figura, come tutte le altre, è tratta dalla ref. [16].

per $\epsilon = 0$ si ha l'uguaglianza esatta. L'eq. (14) è uno dei modi di scrivere la famosa legge di equipartizione dell'energia. Bisogna notare che la previsione di equipartizione è valida per $\epsilon = 0$ oppure piccolo; tuttavia, per sperare che $\overline{E_k}$ (*i.e.* la media calcolata lungo la traiettoria) coincida con $\langle E_k \rangle$, ϵ deve essere necessariamente diverso da zero, in modo da fare interagire tra loro i modi normali, sicché possano essere "dimenticate" le condizioni iniziali.

Che cosa succede se si sceglie una configurazione iniziale in cui l'energia è tutta concentrata su pochi modi normali, per esempio $E_1(0) \neq 0$ e $E_k(0) = 0$ per $k = 2, \ldots, N$? Prima del FPU praticamente tutti si sarebbero aspettati (sulla base della discussione nella sezione **3**) che il primo modo normale avrebbe ceduto progressivamente energia agli altri e che, dopo un certo tempo di rilassamento, ogni $E_k(t)$ avrebbe fluttuato intorno al comune valor medio, dato dalla (14). Anche se non si hanno testimonianze precise (Ulam non ne parla esplicitamente), è sensato credere che anche Fermi condividesse questa aspettativa. Probabilmente Fermi era interessato ad una simulazione numerica, non tanto per controllare la sua "dimostrazione" dell'ipotesi ergodica, quanto per indagare sui tempi di termalizzazione, cioè sul tempo necessario al sistema per passare da una situazione fuori dall'equilibrio statistico (tutta l'energia concentrata su un solo modo) alla situazione di equipartizione, aspettata sulla base della meccanica statistica. Nel FPU venne effettuata una simulazione numerica con $N = 16, 32, 64$, $\epsilon \neq 0$ e tutta l'energia concentrata inizialmente sul primo modo normale. Contrariamente a quanto ci si attendeva, non si osservò nessuna tendenza verso l'equipartizione, anche dopo tempi molto lunghi. In altri termini quel che si vide effettivamente fu una violazione dell'ergodicità e del mescolamento.

In fig. 1 è mostrato l'andamento, in funzione del tempo, della quantità E_k/E_{tot}, per vari k, nel caso $N = 32$ e $r = 3$. Invece che una perdita di memoria della condizione iniziale, sembra osservarsi quasi un modo periodico: dopo un certo tempo (lungo) il si-

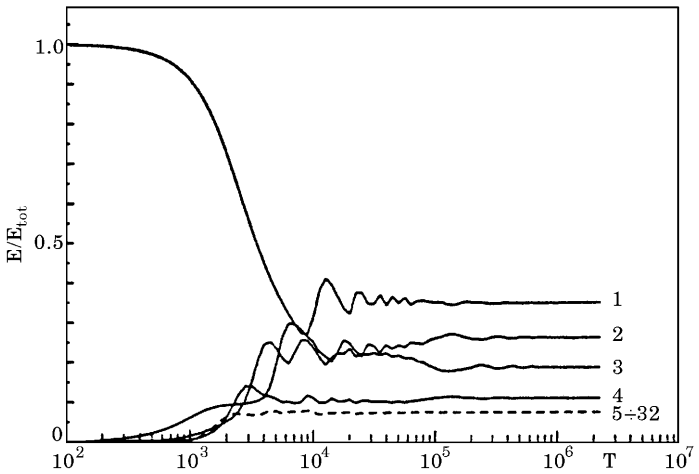

Figura 2. – Medie temporali $\overline{E_1}(T), \ldots, \overline{E_4}(T)$ (linee piene dall'alto in basso) e $\sum_{k=5}^{32} \overline{E_k}(T)$ (linea tratteggiata), nelle stesse condizioni della fig. 1.

stema ritorna praticamente nello stato iniziale. La non equipartizione dell'energia risulta ben evidente dalla fig. 2, che mostra l'energia media nel modo k, in funzione del tempo di osservazione T:

$$\overline{E_k}(T) = \frac{1}{T}\int_0^T E_k(t)\mathrm{d}t\,, \qquad \text{con} \quad k = 1, \ldots, N\,. \tag{15}$$

Ci si potrebbe domandare se i risultati nelle figg. 1 e 2 possano essere degli effetti numerici, dovuti, per esempio, a un tempo di simulazione troppo breve, o se possano essere comportamenti legati al particolare sistema studiato. In fig. 3 è mostrato l'andamento di E_k/E_{tot} per tempi molto lunghi: ma anche in questo caso è ben chiara l'assenza di mescolamento. Per quanto riguarda la genericità del comportamento non ergodico a bassa energia si veda la discussione nella sezione seguente. I risultati ottenuti nel FPU sono decisamente contrari a quanto era atteso e lo stesso Fermi, a quanto scrisse Ulam, ne rimase sorpreso ed espresse l'opinione che si era di fronte a un'importante scoperta che mostrava, in modo inequivocabile, come i convincimenti prevalenti, sulla genericità delle proprietà di mescolamento e termalizzazione nei sistemi non lineari, potessero non essere sempre giustificati. Fermi era stato invitato a tenere una prestigiosa relazione (la Gibbs Lecture) nell'ambito della conferenza del 1955 della American Mathematical Society, e aveva deciso di parlare proprio dei risultati del FPU. A causa della malattia che lo portò alla morte, non tenne mai la conferenza.

La soluzione del problema, che costituisce un capitolo importante della fisica-matematica moderna, era (paradossalmente) già stata trovata nel 1954, un anno prima della stesura della nota di Los Alamos e all'insaputa degli autori, dal matematico sovietico A. N. Kolmogorov [11].

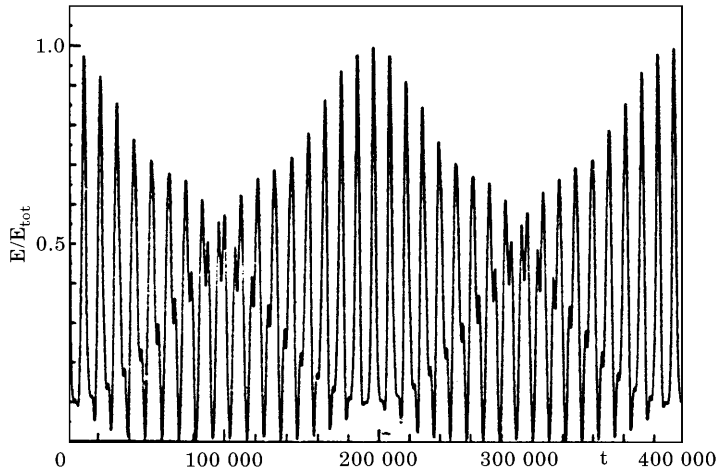

Figura 3. – $E_1(t)$, nelle stesse condizioni di fig. 1.

5. – Alcuni sviluppi moderni

5˙1. *Il teorema KAM e i fondamenti della meccanica statistica.* – Nel 1954 A. N. Kolmogorov enunciò (senza presentare una prova dettagliata, ma con l'idea di fondo chiaramente espressa) un importante teorema, la cui dimostrazione venne in seguito completata da V. Arnold [12] e J. Moser [13]. Il teorema, ora noto con la sigla KAM, si può enunciare come segue:

Data una hamiltoniana $H(\mathbf{I}, \phi) = H_0(\mathbf{I}) + \epsilon H_1(\mathbf{I}, \phi)$*, con* $H_0(\mathbf{I})$ *sufficientemente regolare e inoltre* $\det|\partial^2 H_0(\mathbf{I})/\partial I_i \partial I_j| \neq 0$*, se* ϵ *è piccolo allora sulla superficie di energia costante sopravvivono dei tori invarianti (che sono detti tori KAM e che risultano una piccola deformazione di quelli presenti per* $\epsilon = 0$*) in un insieme la cui misura tende a* 1 *quando* $\epsilon \to 0$*.*

Il teorema KAM potrebbe sembrare intuitivo, se non si conoscessero i teoremi sulla non esistenza di integrali primi non banali. Al contrario, a causa di questi teoremi, l'esistenza dei tori KAM risulta un fatto molto delicato e altamente controintuitivo. Si ha infatti che per ogni valore di ϵ (anche piccolo) alcuni tori del sistema imperturbato, quelli detti risonanti, sono completamente distrutti, e ciò impedisce l'esistenza di integrali del moto analitici. Nonostante ciò, quando ϵ è piccolo, la maggior parte dei tori, leggermente deformati, sopravvive; quindi il sistema perturbato (per condizioni iniziali "non patologiche") ha un comportamento non molto dissimile da quello integrabile. È certo che gli autori del FPU non erano a conoscenza del teorema enunciato da Kolmogorov. Si può dire che i risultati del FPU sono una "verifica" del teorema KAM e, soprattutto, della sua rilevanza fisica, cioè del fatto che i tori sopravvivono per valori del parametro di non linearità (ϵ) che sono fisicamente significativi.

Riconsideriamo la simulazione della sezione **4**: Izrailev e Chirikov [14] per primi hanno notato che per alti valori di ϵ (cioè quando il teorema KAM non si applica) si ha un buon comportamento statistico, vedi fig. 4. Si ha cioè che l'energia, inizialmente concentrata

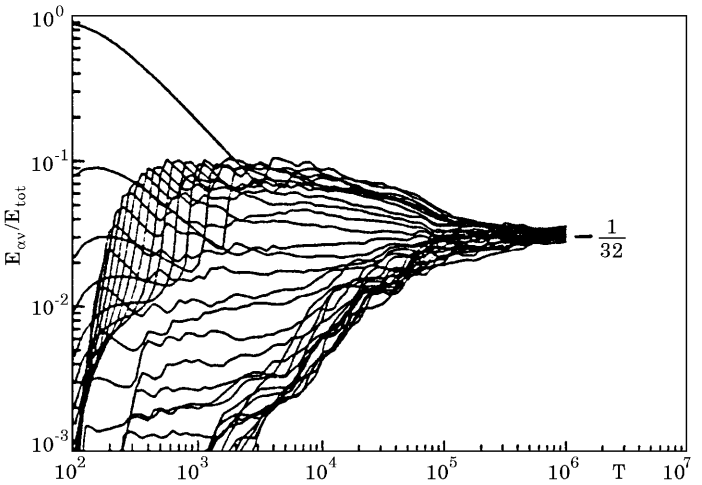

Figura 4. – Medie temporali $\overline{E_k}(T)$, $k = 1, \ldots, 32$ per il modello FPU con $N = 32$, $r = 3$, $\epsilon = 0, 1$ e $\mathcal{E} = 1, 2$.

solo sul modo normale di frequenza più bassa, si divide equamente su tutti i modi normali, in accordo con la meccanica statistica di equilibrio. Per un fissato numero di particelle N si ha sostanzialmente il seguente scenario [15, 16]:

a una data densità di energia $\mathcal{E} = E/N$ esiste una soglia ϵ_c per la intensità della perturbazione tale che

a) se $\epsilon < \epsilon_c$ i tori KAM sono preponderanti e il sistema non equipartisce;

b) se $\epsilon > \epsilon_c$ i tori KAM hanno rilevanza trascurabile, il sistema equipartisce e si ha accordo con l'usuale meccanica statistica.

È facile convincersi che se, con maggiore attinenza alle situazioni fisiche, si fissa il valore della perturbazione ϵ, la densità di energia assume il ruolo di parametro di controllo ed esiste un valore di soglia $\mathcal{E}_c$ che separa il comportamento regolare da quello caotico.

Da un punto di vista fisico si pongono diversi problemi:

1) se questo comportamento (regolare per piccole non linearità e caotico per grandi non linearità) è una peculiarità del modello di hamiltoniana usata nel FPU;

2) qual è la dipendenza di ϵ_c da N (a $\mathcal{E}$ fissato) oppure, equivalentemente, qual è la dipendenza di $\mathcal{E}_c$ da N (a ϵ fissato);

3) quali sono i tempi caratteristici del processo di equipartizione.

Il punto 1) è ben chiaro: il meccanismo di transizione al caos all'aumentare di ϵ è generico in tutti i sistemi che (come il FPU) sono perturbazioni di sistemi armonici. Inoltre questo comportamento è presente non solo in reticoli in una dimensione, ma anche in reticoli in più dimensioni (per esempio, in sistemi bidimensionali di tipo Lennard-Jones a bassa energia, limite nel quale è possibile scrivere la hamiltoniana nella forma (9), cioè una

parte armonica più una perturbazione anarmonica [17]). Per quanto riguarda i punti 2) e 3), che sono i più importanti dal punto di vista della meccanica statistica, le cose non sono del tutto ben stabilite. La dipendenza di ϵ_c (o equivalentemente, fissando ϵ, di $\mathcal{E}_c$) da N è ovviamente di grande rilevanza: nel caso che $\epsilon_c \to 0$ quando $N \to \infty$, si recupera il punto di vista "tradizionale", cioè quello precedente all'FPU. Al contrario, se ϵ_c fosse indipendente da N ci si troverebbe di fronte a una sostanziale discrepanza con i risultati attesi usando la meccanica statistica di equilibrio. Sui punti 2) e 3) sono state effettuate dettagliate simulazioni numeriche e calcoli analitici. Nonostante gli sforzi profusi, a causa delle difficoltà tecniche e numeriche, non si ha ancora un quadro completamente chiaro che trovi l'accordo di tutti [15, 16, 18]. Non essendo questa la sede per una dettagliata analisi, ci limiteremo a discutere brevemente alcuni lavori recenti, che mostrano quanto alcune delle questioni rilevanti siano ancora, in parte, senza risposta.

Casetti *et al.* [19] danno una chiara evidenza che, nel FPU con non linearità cubica ($r = 3$), per densità di energia minore di $\mathcal{E}_c = E_c/N \sim 1/N^2$ la dinamica è molto regolare, anche nel limite $N \to \infty$, con comportamento solitonico (vedi la sezione successiva), in accordo con l'interpretazione di Zabusky e Kruskal. Al di sopra di questa soglia il sistema ha un buon comportamento statistico. Tuttavia, il tempo, $\tau_R(\mathcal{E})$, necessario per avere una buona equipartizione, partendo da una condizione iniziale molto lontana dall'equilibrio statistico (per esempio, tutta l'energia concentrata in pochi modi normali) può essere molto lungo: $\tau_R \sim \mathcal{E}^{-3}$. De Luca *et al.* [20] ottengono risultati qualitativamente simili per non linearità quartiche (cioè $r = 4$). Per essere precisi, τ_R oltre che da $\mathcal{E}$, può dipendere anche dal numero di gradi di libertà N; ad esempio, se i modi normali inizialmente eccitati sono sempre quelli tra k_1 e k_2 (con k_1 e k_2 fissati), al crescere di N si ha $\tau_R \sim N^{1/2}\mathcal{E}^{-1}$ [21]. Poiché i sistemi hamiltoniani non hanno un attrattore, la scelta delle condizioni iniziali (in particolare se $N \gg 1$) è una grande difficoltà tecnica in quanto può influenzare in modo non banale, anche a livello qualitativo, il rilassamento all'equilibrio statistico. Senza entrare nei dettagli, citiamo solo il fatto che, anche partendo da condizioni iniziali tipiche dell'equilibrio statistico, si osservano comportamenti in parte quasi-regolari anche sopra la soglia della stocasticità ($\mathcal{E} > \mathcal{E}_c$) [22]. Notiamo inoltre che lo scenario si è rivelato ben più complicato di quanto congetturato inizialmente. Infatti, anche se il sistema risulta caotico (cioè con esponente di Lyapunov positivo) e la maggior parte dei tori KAM sono distrutti, non si ottiene l'automatica validità, almeno su tempi lunghi ma finiti, della ordinaria meccanica statistica [23].

5˙2. *Solitoni*. – Discutiamo ora, brevemente, l'influenza del FPU nello sviluppo di un altro settore della ricerca. Negli anni sessanta N. J. Zabusky e M. D. Kruskal [24] svilupparono l'idea che la regolarità del comportamento del sistema associato alla hamiltoniana (10) sia da attribuire a certe soluzioni, dette solitoni, di un'equazione alle derivate parziali, di cui le equazioni di Hamilton, ricavabili dalla hamiltoniana (10), costituiscono una approssimazione discreta.

Le equazioni che governano l'evoluzione temporale del sistema FPU, nel caso $r = 3$, sono

$$m\,\frac{\mathrm{d}^2 q_n}{\mathrm{d}t^2} = f(q_{n+1} - q_n) - f(q_n - q_{n-1})\,, \tag{16}$$

dove $f(y) = Ky + \epsilon y^3$. Assumendo che $q_n(t)$ sia il valore di una variabile spazialmente continua, il campo $\psi(x,t)$, nel punto $n\,\Delta x$, essendo Δx il passo di un reticolo con cui si vuole approssimare un dato intervallo continuo, è facile scrivere un'equazione alle derivate parziali per $\psi(x,t)$:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \left(a + 2\,g\,\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\,, \tag{17}$$

dove si è assunto che, nel limite $\Delta x \to 0$, si abbia

$$\frac{(\Delta x)^2}{m} \to c\,, \quad \frac{K}{(\Delta x)^2} \to a\,, \quad \epsilon(\Delta x) \to g\,. \tag{18}$$

È possibile mostrare [25] che le soluzioni dell'eq. (17) sviluppano delle discontinuità spaziali dopo un tempo finito $t_{\rm c} \sim 1/(gc\psi_0)$, dove ψ_0 è la massima ampiezza del campo al tempo $t = 0$.

Cerchiamo ora una soluzione della (16) che nel limite del continuo abbia una lenta variazione in t se $x - ct$ è fissato. Introduciamo le variabili

$$\xi = \frac{\tilde\epsilon}{\Delta x}(x - ct)\,, \tau = \frac{\tilde\epsilon^3}{\Delta x}ct\,, \psi = \tilde\epsilon u\,, \tag{19}$$

dove $\tilde\epsilon$ è un parametro (piccolo) legato alla velocità di cambiamento. Assumendo che $\tilde\epsilon \to 0$ quando $\Delta x \to 0$, per la variabile $v = \partial u/\partial\xi$ si ottiene l'equazione

$$\frac{\partial v}{\partial\tau} + \epsilon v\frac{\partial v}{\partial\xi} + \frac{1}{24}\frac{\partial^3 v}{\partial\xi^3} = 0\,. \tag{20}$$

La (20) è uno dei possibili modi di scrivere l'equazione di Korteweg-de Vries (KdV), nota fin dal 1895, quando venne introdotta per descrivere la propagazione di onde di superficie in acqua bassa. Si può mostrare che la (20) ammette una soluzione "a onda solitonica", cioè del tipo $v = F(\xi - V\tau)$, dove V è una costante che rappresenta la velocità dell'onda nel sistema di riferimento in cui vale l'eq. (20) e $F(z)$ è una funzione concentrata in una regione finita e che decade rapidamente per grandi valori di $|\xi - V\tau|$. Le onde solitarie per molto tempo sono state considerate poco più che curiosità matematiche di poca rilevanza fisica. Dopo i lavori di Zabusky e Kruskal sulle vibrazioni dei cristalli anarmonici e le onde nei plasmi, le proprietà di tipo solitonico si sono rivelate fondamentali per molti fenomeni, come il moto delle pareti di Bloch nei cristalli magnetici e la propagazione dei flussi magnetici nelle giunzioni Josephson [25].

La spiegazione originaria di Zabusky e Kruskal della regolarità del sistema FPU in termini delle onde solitarie della equazione di KdV non è però del tutto convincente. Infatti il passaggio dalla eq. (16), per variabili (q_n) definite su un insieme discreto di punti, a una equazione per variabili $(\psi(x))$ definite su un insieme continuo di punti è molto delicato, in quanto assunzioni poco diverse possono condurre a sistemi molto diversi. Per

esempio, si può ottenere una equazione come la (17), che sviluppa singolarità dopo un tempo finito, oppure come la (20) che ha un comportamento estremamente regolare.

A parte i dettagli tecnici, resta il fatto che Zabusky e Kruskal sono partiti proprio dai risultati ottenuti nel lavoro di Fermi, Pasta e Ulam e che lo studio delle equazioni con comportamento solitonico è divenuto un nuovo importante capitolo della fisica matematica.

5˙3. *Il ruolo della simulazione in fisica*. – Il lavoro FPU è stato un contributo pionieristico anche nell'ambito della simulazione al computer, in quanto uno dei primissimi esperimenti numerici. Il FPU è stato preceduto dal lavoro di Metropolis e altri [26] sulle tecniche Monte Carlo (MC) per lo studio delle equazioni di stato dei liquidi, che è da considerarsi il primo caso di simulazione numerica. Anche prima del FPU e del MC ci sono stati esempi di calcoli numerici, anche massicci, e dell'uso del computer nella fisica (in particolare, nelle ricerche a scopo militare a Los Alamos durante la guerra). Tuttavia il FPU e il MC hanno segnato un cambiamento notevole nel modo di utilizzare il computer. Si è passati dall'uso del computer come abaco veloce, macchina alla quale far macinare tante noiose operazioni, all'uso del computer come strumento di sperimentazione.

Fermi e collaboratori non usarono il computer per ottenere dei dettagli numerici nell'ambito di una teoria ben formalizzata e sostanzialmente compresa; effettuarono invece un vero e proprio *gedankenexperiment*, sottoponendo a verifica delle congetture (che nel caso specifico si rivelarono errate) per cercare di far luce su una problematica non compresa appieno. Il nuovo modo di utilizzo del computer negli anni ha fatto scuola e si può dire che la simulazione numerica è diventata una nuova branca della fisica; accanto alla fisica teorica e a quella sperimentale, ora si parla anche di fisica computazionale [27, 28]. Il computer non serve soltanto per studiare un dato fenomeno, ma può anche, in un certo senso, creare il fenomeno attraverso un modello. La simulazione è una sorta di esperimento "addomesticato", nel quale è possibile selezionare solo gli aspetti rilevanti (o ritenuti tali) di un dato fenomeno, portando all'estremo l'obiettivo galileiano di "difalcare gli impedimenti", cosa non sempre possibile in un vero esperimento [27, 29].

Sarebbe troppo lungo discutere in dettaglio i vari settori inclusi nella fisica computazionale: dinamica molecolare, metodi Monte Carlo, fluidodinamica numerica, ...

Indipendentemente dall'aspetto tecnico, è interessante il fatto che l'affermarsi dell'uso del computer non è solo da attribuirsi all'aumento della potenza di calcolo, ma anche all'evoluzione di algoritmi e alla introduzione di nuovi e suggestivi metodi di rappresentazione grafica. A questo riguardo si può citare B. Mandelbrot che sostiene senza mezzi termini la rilevanza della grafica al computer: "Ricordo che al principio tutti erano molto scettici riguardo a quello che stavo facendo. Mi prendevano un po' per un forsennato. Ebbene, li ho convinti con le immagini".

Esagerando un po' si può dire che la maggior parte dei fisici furono convinti dell'importanza dei sistemi non lineari non tanto dalla forza dei teoremi di Kolmogorov Arnold e Moser quanto dalla potenza suggestiva dei disegni ottenuti da simulazioni al computer dei pionieri del caos: Fermi, Pasta e Ulam, Chirikov, Lorenz, Hénon.

L'utilizzo sistematico del computer ha permesso la rinascita di interi settori di ricerca:

gli esempi più rilevanti sono forse la turbolenza e i sistemi dinamici caotici, che erano rimasti marginali e relegati tra le applicazioni ingegneristiche (turbolenza) oppure erano considerati rami un po' esoterici della matematica (sistemi dinamici).

* * *

Ringraziamo G. B. BACHELET, M. CASARTELLI, G. CICCOTTI e S. RUFFO per una lettura critica del manoscritto.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

[1] FERMI E., PASTA J. e ULAM S., *Los Alamos Sci. Lab. Rep.* LA-1940 (1955).
[2] FERMI E., *Note e Memorie (Collected Papers)* (Accademia Nazionale dei Lincei e The University of Chicago Press) 1965.
[3] SEGRÈ E., *Enrico Fermi, fisico* (Zanichelli, Bologna) 1971.
[4] CERCIGNANI C., *Ludwig Boltzmann e la Meccanica Statistica* (La Goliardica Pavese, Pavia) 1997.
[5] ARNOLD V. I. e AVEZ A., *Ergodic Problems of Classical Mechanics* (Benjamin, New York) 1968.
[6] KHINCHIN A. J., *Mathematical Foundation of Statistical Mechanics* (Dover, New York) 1949.
[7] LANDAU L. D. e LIFSCHITZ E. M., *Fisica Statistica* (Editori Riuniti, Roma) 1978.
[8] TRUESDELL C., *Ergodic Theory in Classical Statistical Mechanics* in *Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi', Course XVI*, a cura di P. Caldirola (Academic Press, London) 1961.
[9] POINCARÉ H., *Acta Math.*, **13** (1890) 1.
[10] FERMI E., *Phys. Zeits.*, **24** (1923) 261; traduzione in italiano in FERMI E., *Nuovo Cimento*, **26** (1923) 105; **25** (1923) 267.
[11] KOLMOGOROV A. N., *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **98** (1954) 527.
[12] ARNOLD V. I., *Russ. Math. Surv.*, **18** (1963) 9.
[13] MOSER J. K., *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math. Phys. kl.*, **2** (1962) 1.
[14] IZRAILEV F. M. e CHIRIKOV B. V., *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **166** (1966) 57.
[15] BOCCHIERI P., SCOTTI A., BEARZI B. e LOINGER A., *Phys. Rev. A*, **2** (1970) 2013; CASARTELLI M., CASATI G., DIANA E., GALGANI L. e SCOTTI A., *Theor. Math. Phys.*, **29** (1976) 205; LIVI R., PETTINI M., RUFFO S., SPARPAGLIONE M. e VULPIANI A., *Phys. Rev. A*, **31** (1985) 1039.
[16] BENETTIN G., in *Molecular-Dynamics Simulation of Statistical-Mechanical Systems*, a cura di G. CICCOTTI e W. G. HOOVER, (North-Holland, Amsterdam) 1986.
[17] BENETTIN G. e TENENBAUM A., *Phys. Rev. A*, **28** (1983) 3020.
[18] KANTZ H., *Physica D*, **39** (1989) 322; KANTZ H., LIVI R. e RUFFO S., *J. Stat. Phys.*, **76** (1994) 627.
[19] CASETTI L., CERRUTI-SOLA M., PETTINI M. e COHEN E. G. D., *Phys. Rev. E*, **55** (1997) 6566.
[20] DE LUCA J., LICHTENBERG A. J. e RUFFO S., *Phys. Rev. E*, **60** (1999) 3781.
[21] RUFFO S., in *Chance in Physics: Foundations and Perspectives*, a cura di J. BRICMONT (Springer-Verlag, Berlin) 2000.
[22] ALABISO C. e CASARTELLI M., *J. Phys. A*, **33** (2000) 831.
[23] LIVI R., PETTINI M., RUFFO S. e VULPIANI A., *J. Stat. Phys.*, **48** (1987) 539.

[24] Zabusky N. J. e Kruskal M. D., *Phys. Rev. Lett.*, **15** (1965) 240; Zabusky N. J., in *Nonlinear Partial Differential Equations* a cura di W. Ames (New York) 1967.
[25] Cercignani C., *Riv. Nuovo Cimento*, **7** (1977) 429.
[26] Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H. e Teller E., *J. Chem. Phys.*, **21** (1953) 1087.
[27] Wilson K., *La Recherche*, **14**, n. 146 (1983) 1004.
[28] Ciccotti G., Frenkel D. e McDonald I. R., (Curatori) *Simulation of Liquids and Solids* (North-Holland, Amsterdam) 1987.
[29] Livi R., Pettini M., Ruffo S. e Vulpiani A., *Giornale di Fisica*, **XXVI**, n. 4 (1985) 2851.

Libri consigliati

La bibliografia riportata sopra è spesso non facile e reperibile solo in biblioteche universitarie; letture relativamente semplici, sugli argomenti trattati in questo capitolo, sono:

- Cercignani C., *Ludwig Boltzmann e la Meccanica Statistica* (La Goliardica Pavese, Pavia) 1997;
- Caldirola P., *Dalla Microfisica alla Macrofisica* (Mondadori, Milano) 1974;
- Caldirola P. e Casati G., "Fisica" nell'*Enciclopedia Einaudi*, vol. **15** (Torino) 1981, pag. 256;
- Guerra F., "Reversibilità/irreversibilità" nell'*Enciclopedia Einaudi*, vol. **11** (Torino) 1981, pag. 1067;
- Milani A., "Stabilità/instabilità" nell'*Enciclopedia Einaudi*, vol. **13** (Torino) 1981, pag. 418.
- Vulpiani A., *Determinismo e Caos* (La Nuova Italia Scientifica, Roma) 1994.

Massimo Falcioni, nato nel 1950 a Roma, è attualmente Ricercatore Universitario presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Roma "La Sapienza". Si è occupato di fisica delle particelle elementari; i suoi interessi attuali vertono sui sistemi dinamici caotici.

Angelo Vulpiani, nato nel 1954 a Borgorose (RI), è attualmente Professore Ordinario di Fisica Teorica presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Roma "La Sapienza". Si occupa di meccanica statistica dei sistemi disordinati, turbolenza e sistemi dinamici caotici.