Un lavoro di Boltzmann, l'ipotesi ergodica e un sistema integrabile

La "seconda legge": $\oint \frac{dQ}{T} = 0$ & $\oint \frac{dQ}{T} \leq 0$
Nel 1866 Boltzmann sviluppò l'idea che la seconda legge rifletta una proprietà assai generale della Meccanica Hamiltoniana, $\Rightarrow$ "teorema"

L'ipotesi basilare, [1, Sec. IV,p.24], fu:

"*Supporremo ora che un atomo, selezionato ad arbitrio, qualunque sia lo stato del sistema, in un intervallo di tempo adatto (non importa se molto lungo), di cui t_1 e t_2 sono gli istanti iniziale e finale, al termine dei quali le velocità e le direzioni ritornano al valore originale e negli stessi luoghi, descrivendo una curva chiusa e ripetendo, da questi istanti in poi il loro moto.*

Fundamentalmente i moti sono periodici: $\Rightarrow$ medie si calcolano semplicemente per integrazione sul periodo, *i.e.* sulla fase.

Sia δx la variazione che il moto $t \to x(t)$ subisce in

"*un processo in cui azioni e reazioni sono, durante l'intero processo, reciprocamente uguali per cui all'interno del corpo si trovano sempre o equilibrio termico o un flusso stazionario di calore*",[1].

Il teorema allora diventa una proprietà della variazione $\delta(\overline{K} - \overline{V})$, $V = V_{int} + V_{ext}$. B. assume $V_{ext} = 0$ and $\delta Q = \delta U - \overline{\delta V}_{ext}$ viene interpretato come calore ricevuto se $x \to x' = x + dx$.
Post $V_{ext} = 0$ segue che, *per le equazioni del moto*

$$\frac{\delta Q}{\overline{K}} = 2\,\delta \log(\overline{K} i) \stackrel{def}{=} \delta S$$

Clausius rimprovera che $V_{ext} = 0$, B. ammette ma dice che l'argomento non cambierebbe, Clausius dice no ... Entrambi sono daccordo che la legge è un'espressione del "principio di minima azione" e che ne segue come teorema:

"*Si vede facilmente che la nostra conclusione sul significato delle quatità che intervengono qui è totalmente indipendente dalla teora del calore, e pertanto la seonda legge fondamentale è collegata a un teorema di Meccanica pura al quale corrisponde proprio come il principio della "forza viva" corrisponde alla prima legge; e, come segue immediatamente dalle nostre considerazioni, è collegato al principio della minima azione in forma alquanto generalizzata.*", [1, #2,sec.IV]

""Generalizzazione del principio d'azione" ???:

Ma la questione di priorità (1871) rimase secondaria, grazie ai nuovi sviluppi di B.: nel 1868 aveva derivato la distribuzione canonica per la statistica degli atomi di una singola molecola in un gas in equilibrio termico.

Considera prima un gas molto rarefatto con cui alcune molecole (*e.g.*una) collidono e deduce la loro distribuzione]alertbcanonica. Poi deduce la distribuzione microcanonica per l'intero gas (visto come una molecola gigante).

Qui per la prima volta lo spazio delle fasi è immaginato diviso in celle e la distribuzione viene dedotta contando il numero di modi di distribuire particelle nelle, $6N$-dimensionali, celle di data energia totale: la dinamica entra solo perché si suppone che il sistema assuma periodicamente tutte le possibili configurazioni.

MA in Sec.III del lavoro anche l'ipotesi di gas rarefatto è rimossa e l'analisi diventa davvero generale con energia potenziale interna $\chi(q)$ "arbitraria".

Lo spazio delle fasi di energia totale $n\kappa$ è diviso in celle $d^{3N}qd^{3N}p$ e per ogni $dq \in R^{3N}$ le celle $d^{3N}p$ permesse (*i.e.* con $K = n\kappa - \chi(q)$) contengono (letteralmente anche se in notazione moderna)

$$\frac{\delta(n\kappa - \frac{1}{2}p^2 - \chi(q))\ d^{3N}qd^{3N}p}{norm}$$

$\rightarrow$ distribuzione microcanonica, *e.g.* $(n\kappa - \chi(q))^{\frac{3n-2}{2}} \frac{d^{3n}q}{norm}$ se integrata su p's.

L'argomento è combinatorio e la dinamica appare solo perché tutti i modi di porre atomi nelle celle sono visitati una sola volta ogni ciclo periodico del sistema: ipotesi ergodica.

Così Maxwell in uno dei suoi ultimi lavori commenta B., [3]:
" *The only assumption which is necessary for the direct proof is that the system, if left to itself in its actual state of motion, will, sooner or later, pass through every phase which is consistent with the equation of energy. Now it is manifest that there are cases in which this does not take place*

...

But if we suppose that the material particles, or some of them, occasionally encounter a fixed obstacle such as the sides of a vessel containing the particles, then, except for special forms of the surface of this obstacle, each encounter will introduce a disturbance into the motion of the system, so that it will pass from one undisturbed path into another...."

Può essere necessario un tempo lungo per questo ma alla fine sarà ripetuto.

Quindi il più urgente problema di B. era convincere gli scettici (non ancora in gran numero allora, 1868) che (genericamente) un moto imperturbato errasse nello spazio delle fasi visitando tutti i punti di uguale energia: e beninteso "all" si deve intendere tenedo presente che lo spazio delle fasi è discreto.

Boltzmann necessitava di almeno un semplice esempio di moto che visita densamente il dominio accessibile e con più struttura dei moti di Lissajous: *i.e.* un sistema Hamilt. con orbite dense sulla superficie di energia. Sottolineo che B. riteneva la distrib. di equilibrio dotata di densità regolare, quindi una distribuzione con densità su un insieme denso e in assenza di altri integrali primi doveva essere microcanonica.

Sotto un titolo modesto "Soluzione di un problema meccanico" [2] ("Lösung eines mechanisches Problems", 1868) considera un punto in moto in un potenziale gravitazionale $-\frac{\alpha}{2r}$ e un potenziale centrifugo $\frac{\beta}{2R^2}$. Allo scopo di costruire un esempio, dato che questo "non è realmente di facile reprimento" **(!)**.

È questo un sistema Hamiltoniano a 2 gradi di lib. che ammettte energia e momento angolare conservati risolubile via quadrature elementari: tutti i suoi moti sono quasi-periodici a parte casi speciali (risonanze). The Hamiltonian is

$$H = \frac{1}{2}p^2 - \frac{\alpha}{2R} + \frac{\beta}{2R^2}$$

Se le coord. polari al tempo t sono $t \to (r(r), \varphi(t))$ per un moto con energia $\frac{1}{2}A < 0$ e momento angolare a:

$$\varphi(t) = \varphi(0) + F(r(t), a, A) - F(0, a, A) \equiv \varepsilon + F(r(t), a, A)$$

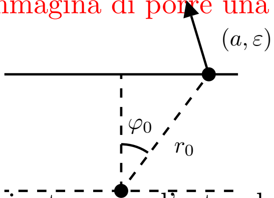
$$F(r, a, A) = \frac{a}{\sqrt{a^2+\beta}} \arccos\Big(\frac{2(a^2+\beta)/r - \alpha}{\sqrt{\alpha^2 + 4A(a^2+\beta)}}\Big)$$

Allo stesso modo si può considerare il caso di un potenziale armonico $\frac{1}{2}\kappa R^2$ e di un potenziale centrifugo $\frac{\beta}{2R^2}$ (Botlzmann lo considerò in seguito):

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{\kappa}{2}R^2 + \frac{\beta}{2R^2}$$

Elementarmente integrabile con tutti i moti quasi periodici.

Quindi Boltzmann immagina di porre una barriera a altezza y:



è la particella, immaginata sopra l'ostacolo, è riflessa elasticamente a ogni collisione.
Momento angolare non è più conservato e le collisioni hanno luogo in uno spazio a 2 dim. Convenienti sono le coordinate (a, φ) di collisioni successive (Poincaré' map). O anche (x, a) with $x = y \tan \varphi$: così l'evoluzione è $(x, a) \to (x', a')$.

L'idea e conclusione di B.'s sembra che, vista la non conserv. del momento ang., il moto già quasi periodico invaderà densamente la superfice di energia; (in seguito questo verrà formalizzato come "ipotesi quasi ergodica", dagli Ehrenfests).

In dettaglio B. dimostra che c'è una densità invariante: ottiene ciò via quello che chiamiamo teorema di Liouville (che nei suoi lavori ricava ogni volta che necessario via espliciti, spesso molto lunghi, calcoli).

Suppone quindi che il numero di eventi (*i.e.* visite) in $dadx$ abbia la forma

$$F(a, x)dadx$$

(diciamo che la probabi;ità di visita è assolutamente continua).

Conclude apparentemente dando per scontato che F è continua sulla superfice, coperta densamente dal moto, di energia. come più volte in lavori successivi (e precedenti). E che non ci sono altre tali distribuzioni invarianti.

Sommario: B. già nei lavori precedenti e in tutti i successivi supponeva
1) i moti errano densamente sulla superficie di energia e
2) visitano regioni con densità che è una funzione continua (3)
Genericamente F è funzione dell'energia.

È vero, in questo caso? **dubbio**.

Il sistema è molto semplice e una simulazione è possibile: i risultati sono un po' sorprendenti

A sinistra caso gravitazione + centrifuga, a destra caso armonico+centrifuga, nel piano in the x, a:

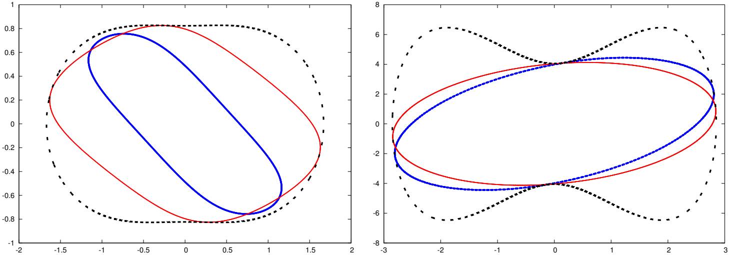


fig.4

La superficie di energia, alle collisioni, è racchiusa dalla curva tratteggiata Le curves sono due traiettorie distinte con uguale energia

Decisamente no ....

Ma ho scelto parametri $y = 1$ (quota dell'ostacolo), e $\beta = .1$ (centrifuga, piuttosto piccola) e $\alpha = 1$ (gravità). Ian Jauslin invece ha preso β grande (~ 10 volte) trovando che il moto was invadeva una regione aperta della superfice di energia.
In questo caso B. sembra corretto.

Perché Boltzmann introduce la forza centrifuga? forse affinchè in assenza di ostacolo i moti fossero già quasi periodici? forse sospettava che senza centrifua il moto fosse ancora quasi periodico?

Studiando il problema con with $\beta = 0$ (no f. centrifuga) e pare che i moti nel piano di Poincaré (a, e or a, e) si svolgono sempre su orbite chiuse, quindi non dense (tranne che casi risonanto in cui consistono di un numero finio di punti).

Si può costruire una teoria della fenomenologia descritta?

Si (o forse)

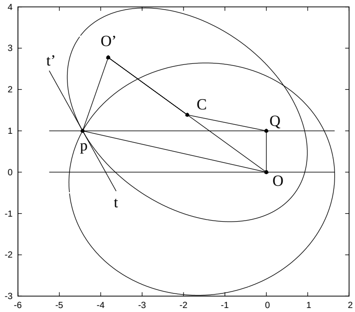
Congettura

In assenza di f. centrifuga il sistema è integrabile e anisocrono per tutte le altezze y. Banale se $y = 0$.

Se vero sarebbe una bella proprietà delle **sezioni coniche**: le orbite fra le collisioni sono una famiglia di coniche (ellissi) $\frac{1}{2}$-confocal and coaxial (*i.e.* con un fuoco comune e semiassi maggiori uguali).
La congettura implicherebbe che i punti di collisione (x, a) sono su curve chiuse nel piano x, α. forse Apollonio lo sapeva?
Famiglie di coniche confocali hanno molte proprietà geometriche; se anche coassiali dovrebbero averne di più ma quelle $\frac{1}{2}$-confocali?

Se la cogettura è corretta le figure mostrate sarebbero conseguenze immediate del teorema KAM theorem (nella versione di Moser) per β piccolo: e il caos osservato a β grande sarebbe parte della teoria di Aubry-Mather.

Una proprietà che si vede facilmente in simulazioni (osservate da I.Jauslin) e che conduce al seguente teorema (G.J.)':



Theorem 1: *Data un'ellisse $\mathcal{E}$ con semiasse maggiore a_M e inclinazione dell'afelio φ_0 e fuoco in O: il centro dell'ellisse C si trova a una distanza R_0 da Q che dipende solo da $\cos(2\lambda)$ con λ l'angolo formed dalla tangente a $\mathcal{E}$ alla intersezione con l'ostacolo $\mathcal{L}$ e lo stesso $\mathcal{L}$.*

Corollario: *Il momento angolare a, l'angolo dell'afelio φ_0 e*

$$\begin{aligned} R_0^2 =& \frac{1}{4}r_0^2 + \frac{1}{4}(2a_M - r_0)^2 + \frac{1}{2}r_0(2a_M - r_0)\cos(2\lambda_0) \\ R =& a_0^2 + e_0 h\alpha \sin\varphi_0, \qquad e_0 = \sqrt{1 + \frac{4Aa_0^2}{\alpha^2}} \end{aligned} \tag{0.1}$$

ove e è l'eccentricità $e = \sqrt{1 + \frac{4Aa^2}{\alpha^2}}$, *definiscono costanti del moto* R, R_0.

Dunque il moto si rappresenta su una curva ($i.e.\ R = const$). Quale è l'angolo coniugato alla costante R ?

Dovrebbe esistere un angolo θ che a ogni collisione avanza di una rotazione costante ω.

I. Jauslin ha proposto che l'angolo possa essere semplicemente la variabile d'azione del sistema Hamiltoniano con Hamiltoniana R and (a_0, φ_0) coniugate:

$$R = a_0^2 + e_0 h\alpha \sin\varphi_0, \qquad e_0 = \sqrt{1 + \frac{4Aa_0^2}{\alpha^2}}$$

ove φ_0 è l'inclinazione dell'afelio sull'asse x-axis dall'ellisse che esce dalla collisione in x_0 e e_0 la sua eccentricità; R è la costante del moto.

Apparentemente questa Hamiltoniana ha *nulla a che fare* con la nostra dinamica. Tuttavia è integrabile per quadrature. Siano I, γ le sue variabili azione-angolo con

$$I = \int_0^{2\pi} a_{A,R}(\psi)d\psi, \qquad \gamma(\varphi_0) = \partial_R \int_0^{\varphi_0} a_{A,R}(\psi)d\psi$$

Allora siano φ, φ' due afelii in 2 collisioni successives: $\theta(A, R)$ sia il tempo fra le collisioni

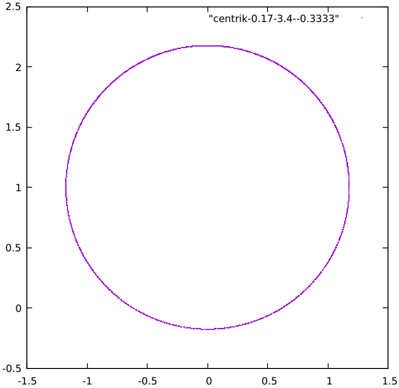
$$\gamma' = \gamma + \omega(A, R), \qquad \omega(A, R) = 2\pi \frac{\theta(A, R)}{\tau(A, R)}$$

Congettura: $\omega(A, R)$ non dipende dalle collisioni se il cerchio su cui si muovono i centri contiene il fuoco e $\partial_R \omega(A, R) \neq 0$.

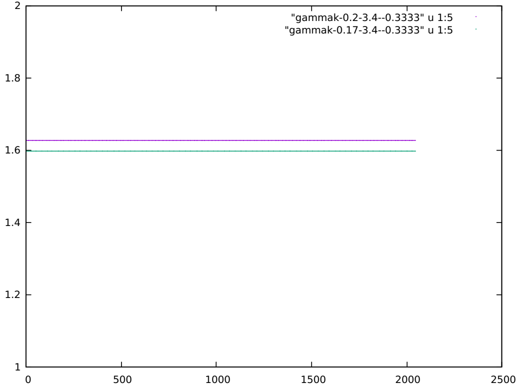
Così I, γ sembrano essere una coppia di coordinate integranti. The $\omega(A, R)$ è esprimibile via integrali ellittici e la sua indipendenza sembra essere un ulteriore idetità fra integrali ellittici. Simulazioni sono in accordo con la congettura.

Conclusione: La proposta di Boltzmann che questo possa essere un semplice esempio di systema caotico se $\beta \neq 0$ non sembra essere sempre corretta. Ma anche se non corretta la sua intuizione sull'importanza della forza centrifuga può essere fondamentalmente corretta e produrre un nuovo sistema integrabile con transizione caotica per perturbazioni.

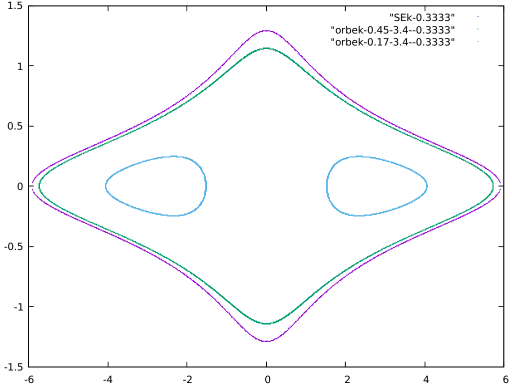
Se il cerchio dei centri delle ellissi non contiene il fuoco la congettura forse è lo stesso valida: è il caso in cui il cerchio dei centri non può essere densamente coperto dal moto dei centri ("pendolo").



La costante del moto $R0$: dal teorema



$\omega(A, R)$ su 2000 iterazioni ognuna di due collisioni successive, dalla congettura di Jauslin



Orbite: nel piano (x, u) la curva esterna racchiude tutti i punti di data energua A; la prima dall'esterno è un'orbita connessa e la second è un'orbita con ellissi più piccole che appare sconnessa. Al decrescere della massima elongazione (ossia al variare di $R \downarrow$) l'orbita connessa si sdoppia in due curve.

Profilo di rotazione: risonanza???

X=

1A1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B
1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B

Y=

1A1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B
1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A
1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B
1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B
1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A
1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B
1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B
1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A1B1A
1B1A1B1A1B

$\Rightarrow$ profilo = XYYXYYX....

1 omega	omega=+1.627
A omega omega omega	omega=-0.644
B omega omega	omega=-0.644

gammak-0.2-3.4–0.3333

[1] L. Boltzmann.

Über die mechanische Bedeutung des zweiten Hauptsatzes der Wärmetheorie.

Wiener Berichte, 53, (W.A.,#2):195–220, (9–33), 1866.

[2] L. Boltzmann.

Lösung eines mechanischen problems.

Wiener Berichte, 58, (W.A.,#6):1035–1044, (97–105), 1868.

[3] J. C. Maxwell.

On Boltzmann's theorem on the average distribution of energy in a system of material points.

Transactions of the Cambridge Philosophical Society, 12:547–575, 1879.