

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA
LA SAPIENZA

Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali

Tesi di Laurea in Fisica

**Studio di un modello stocastico
di particelle interagenti fuori
dall'equilibrio: idrodinamica e
grandi fluttuazioni**

Relatore:
Prof. G. JONA LASINIO

Laureando:
Alberto DE SOLE

Anno Accademico 1997 - 98

Indice

Introduzione	4
0.1 Termodinamica del non-equilibrio: relazioni di simmetria di Onsager e relazione di time reversal di Onsager-Machlup	4
0.2 Modelli stocastici di particelle interagenti	15
Schema riassuntivo della tesi	22
1 Catene di Markov su spazio discreto a tempo continuo	23
1.1 Definizione di catene di Markov a tempo discreto	24
1.2 Catene di Markov a tempo continuo	30
1.3 Generatore, equazioni di Kolmogorov	33
1.4 Misure invarianti, processo aggiunto	36
1.5 Processo di Markov non omogeneo	43
2 Modelli di particelle interagenti	44
2.1 Particelle libere	44
2.2 Processi di interazione a contatto (zero range)	46
2.3 Processi di interazione di sfere dure (esclusione semplice ed esclusione con interazione)	50
2.4 Modello di Ising stocastico e modello elettorale	53
3 Limite idrodinamico	55
3.1 Definizione di equilibrio locale e di limite idrodinamico	56
3.2 Equazione idrodinamica	59
3.3 Comportamento idrodinamico	63
4 Studio delle grandi deviazioni	67
4.1 Esempio: variabili i.i.d.	67
4.2 Principio di grandi deviazioni e teorema di Laplace-Varadhan	69
4.3 Grandi deviazioni dal limite idrodinamico	71
4.4 Applicazioni fisiche dello studio delle grandi deviazioni	78

5	Modello zero range fuori dall'equilibrio	81
5.1	Definizione del modello	81
5.2	Generatore Aggiunto	85
5.3	Equazione Idrodinamica	89
5.4	Modello asimmetrico	98
5.5	Equazione idrodinamica del modello asimmetrico	108
6	Studio delle Grandi Deviazioni	117
6.1	Definizione del processo con campo esterno	121
6.2	Equazione idrodinamica	122
6.3	Funzionale di grandi deviazioni	126
6.3.1	Derivata di Radon-Nikodim	126
6.3.2	Forma variazionale del funzionale di grandi deviazioni .	132
6.3.3	Forma esplicita del funzionale di grandi deviazioni . .	133
	Dimostrazioni	135
6.4	Minimizzazione del funzionale di grandi deviazioni: traiettoria più probabile	139
6.5	Modello a due componenti	142
6.6	Relazioni di Onsager per il modello a due componenti	149
6.6.1	Modello con campo esterno	150
6.6.2	Funzionale di grandi deviazioni	152
6.6.3	Funzionale entropia	153
6.6.4	Relazioni di simmetria di Onsager	155
6.6.5	Osservazioni sulla scelta del funzionale entropia	156
7	Produzione di entropia	159
7.1	Considerazioni sulla definizione di entropia totale per un si- stema di particelle interagenti	160
7.2	Entropia totale per il modello zero range fuori dall'equilibrio .	163
7.3	Calcolo della produzione di entropia	164
7.4	Proprietà della produzione di entropia. Stato di minima pro- duzione di entropia	167
7.5	Equazione per lo stato di minima produzione di entropia . . .	170
7.5.1	Maggiorazione di $\sigma(\mu_{Min})$: espressione esplicita in si- tuazione di equilibrio.	171
7.5.2	Espansione in potenze di $\Delta\lambda$. Principio di minima produzione di entropia	172
A	Elementi di teoria di probabilità	176
A.1	Spazio di probabilità	176
A.2	Variabili casuali	180

A.2.1	Probabilità e valori aspettati condizionali	184
A.2.2	Martingale	187
B	Processi di Markov non omogenei	188
B.1	Derivata di Radom-Nikodim tra due catene di Markov omogenee	188
B.2	Alcune martingale nel contesto dei processi di Markov	191
B.3	Catene di Markov non omogenee	194
	Bibliografia	204

Introduzione

0.1 Termodinamica del non-equilibrio: relazioni di simmetria di Onsager e relazione di time reversal di Onsager-Machlup

La termodinamica del non-equilibrio descrive i processi irreversibili con cui un sistema macroscopico rilassa verso lo stato di equilibrio o, viceversa, a partire dallo stato di equilibrio fluttua in uno stato di non-equilibrio.

L'assunzione di partenza è quella di *equilibrio locale*. Consideriamo un sistema macroscopico racchiuso nel dominio spaziale V ed indichiamo con u un generico punto di tale dominio. Effettuiamo inoltre una partizione di tale dominio V in elementi I_u ognuno dei quali deve essere infinitamente piccolo rispetto al volume macroscopico V , ma allo stesso tempo deve essere infinitamente grande rispetto la distanza intermolecolare in modo da contenere un numero elevato di particelle e poter essere considerato quindi un sistema termodinamico a sé stante. Il punto di vista di partenza consiste nel rinunciare ad osservare all'interno di tali domini I_u , presi come elementi fondamentali; si dà così una "descrizione a grana grossa" (o *coarse graining*) del sistema. L'ipotesi di equilibrio locale si esprime dicendo che ogni elemento I_u può essere considerato in ogni istante di tempo τ in equilibrio termodinamico descritto dai parametri di stato $A_1(u), \dots, A_n(u)$.

In tal senso la termodinamica del non-equilibrio è una teoria del continuo, in cui i parametri di stato sono trattati come campi, cioè funzioni continue dello spazio e del tempo: $A_i(\tau, u)$. Le relazioni tra i parametri di stato sono definite dando una formulazione locale delle leggi di conservazione (ovvero del primo principio della termodinamica) e della legge di aumento di entropia (secondo principio della termodinamica).

Per avere una formulazione completa della teoria è necessario conoscere le leggi della dinamica dei parametri di stato $A_i(\tau, u)$ durante i processi ir-

reversibili che fanno evolvere il sistema verso lo stato di equilibrio globale. Fin dal secolo scorso esiste un gran numero di leggi fenomenologiche che descrivono processi irreversibili nella forma di relazioni di proporzionalità : la legge di Fourier tra il flusso di calore ed il gradiente di temperatura, la legge di Fick tra il flusso di materia ed il gradiente di densità, la legge di Ohm tra la corrente elettrica ed il gradiente di potenziale elettrico, ...

Ognuna di queste leggi può essere descritta da una formula del tipo:

$$J = LX \tag{1}$$

dove J rappresenta una *corrente*, cioè la derivata temporale del parametro di stato di interesse α , che può essere la densità di calore, di materia, di carica elettrica, ... e descrive lo svolgersi di un processo irreversibile; X rappresenta la *forza termodinamica*, come il gradiente di temperatura, di densità, di potenziale elettrico, ... che genera il processo irreversibile medesimo. Quando due o più processi irreversibili avvengono simultaneamente nascono fenomeni di accoppiamento. Esempi di accoppiamento sono l'effetto Soret, cioè la formazione di gradienti di concentrazione in conseguenza di un gradiente di temperatura, o la forza termoelettrica, cioè la forza elettromotrice ottenuta applicando un gradiente di temperatura alla giunzione tra due metalli. Per descrivere tali effetti bisogna generalizzare la relazione (1) assumendo che ogni forza termodinamica può generare qualunque corrente:

$$J_i = \sum_{j=1}^n L_{ij} X_j \tag{2}$$

L_{ij} sono coefficienti fenomenologici noti come *coefficienti di trasporto* (o di Onsager).

A partire dall'ipotesi di reversibilità della dinamica microscopica e scegliendo in modo opportuno le correnti J_i e le forze termodinamiche X_i , nel 1930-31 Onsager (cf. [7] e [8]) ha fatto vedere che la matrice dei coefficienti di trasporto deve essere simmetrica:

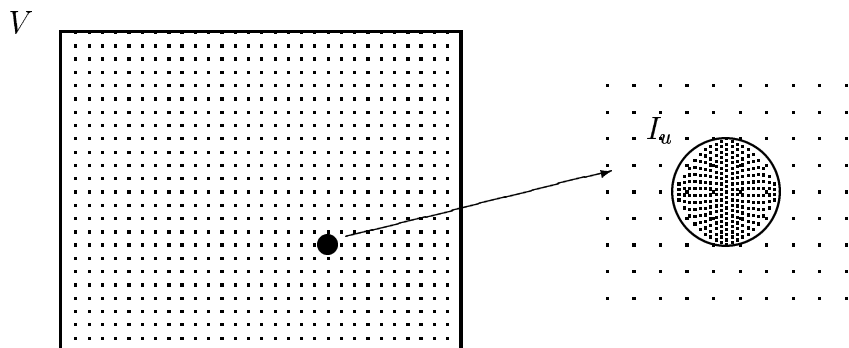
$$L_{ij} = L_{ji} \tag{3}$$

Tali identità sono note come *relazioni di reciprocità di Onsager*.

Nel seguito cercheremo di vedere qual è l'idea alla base delle relazioni di Onsager (si rimanda il lettore interessato agli articoli originali di Onsager o ai testi di S. R. De Groot e P. Mazur [10] e [11]).

Consideriamo un sistema macroscopico di volume V e all'interno di esso un elemento infinitesimo I_u . Per semplicità supponiamo che il sistema

macroscopico sia in una situazione di equilibrio descritta dai parametri di stato A_1^0, \dots, A_n^0 , ma che l'elemento infinitesimo I_u sia in un equilibrio locale differente: $A_1(u), \dots, A_n(u)$.



Le differenze:

$$\alpha_1 = A_1(u) - A_1^0, \dots, \alpha_n = A_n(u) - A_n^0$$

misurano la lontananza dall'equilibrio dell'elemento I_u . L'entropia totale del sistema si scompone nell'entropia dell'elemento I_u più l'entropia del resto del sistema (che indichiamo come ambiente):

$$S_{tot} = S_a + S(u)$$

Se si fa evolvere liberamente il sistema si genera un processo irreversibile a conclusione del quale anche l'elemento I_u si porta in equilibrio con l'ambiente. La variazione di entropia totale:

$$\Delta S_{tot} = \Delta S_a + \Delta S(u) > 0$$

è positiva per il secondo principio della termodinamica. La variazione di entropia $\Delta S(u)$ dell'elemento I_u può essere immaginata come somma di due contributi:

$$\Delta S(u) = \Delta S_e(u) + \Delta S_i(u)$$

Il termine $\Delta S_e(u)$ descrive il flusso reversibile di entropia tra l'elemento I_u e l'ambiente; si compensa quindi con la variazione di entropia dell'ambiente:

$$\Delta S_e(u) + \Delta S_a = 0$$

Il termine $\Delta S_i(u)$ descrive invece l'entropia prodotta all'interno dell'elemento I_u durante i processi irreversibili che lo portano all'equilibrio. Per il secondo principio della termodinamica deve essere positivo:

$$\Delta S_i(u) > 0$$

Indichiamo con $\sigma(u)$ la *produzione locale di entropia*, ovvero l'entropia prodotta nell'elemento I_u nell'unità di tempo:

$$\sigma(u) = \frac{d}{dt} S_i(u) > 0$$

tale produzione di entropia è legata ai processi irreversibili in I_u , dunque alle forze termodinamiche $X_i(u)$ e le corrispondenti correnti $J_i(u)$. Questo legame è espresso dalla relazione, valida in generale:

$$\sigma(u) = \sum_{i=1}^n X_i(u) J_i(u) \quad (4)$$

ed il fatto che $\sigma(u)$ è non negativa si traduce nel fatto che la matrice dei coefficienti di trasporto deve essere definita positiva. Tale relazione (4) può essere presa come definizione delle forze termodinamiche X_i e delle correnti J_i ; questo però non fissa in modo unico le J_i e X_i in quanto si possono sempre sostituire con delle combinazioni lineari. Il teorema di reciprocità di Onsager si esprime dicendo che per tutte le scelte di X_i e J_i che verificano la (4) valgono le relazioni di reciprocità (3).

Da ora in poi non consideriamo i flussi di entropia tra l'elemento I_u e l'ambiente. A tale scopo poniamo $\Delta S_e(u) = 0$. Ciò equivale a considerare l'elemento infinitesimo I_u isolato ma, nonostante ciò, soggetto a delle forze termodinamiche $X_i(u)$ che fissano lo stato di equilibrio, caratterizzato da:

$$\alpha_1 = 0, \dots, \alpha_n = 0$$

In corrispondenza di questo stato l'entropia dell'elemento I_u è massima. Un'ipotesi ragionevole è quindi immaginare l'entropia come una funzione convessa nelle variabili $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ con un massimo in $\vec{\alpha} = 0$. Per piccole fluttuazioni dall'equilibrio una buona approssimazione si ha sviluppando al secondo ordine:

$$\Delta S(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} s_{ij} \alpha_i \alpha_j \quad (5)$$

dove ΔS è la variazione di entropia rispetto a quella di equilibrio e s_{ij} è una matrice simmetrica definita positiva. Derivando rispetto al tempo la relazione (5) si ottiene un'espressione della produzione locale di entropia:

$$\sigma = - \sum_{i=1}^n \frac{d\alpha_i}{dt} \left(\sum_{j=1}^n s_{ij} \alpha_j \right) \quad (6)$$

che ci permette di identificare le correnti con:

$$J_i = \frac{d\alpha_i}{dt} \quad (7)$$

e le forze termodinamiche con:

$$X_i = - \sum_{j=1}^n s_{ij} \alpha_j \quad (8)$$

L'evoluzione temporale dei parametri di stato locali α_i nel processo irreversibile che porta all'equilibrio è descritta dalle equazioni fenomenologiche (2), che assumono la forma:

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = - \sum_{j,k=1}^n L_{ik} s_{kj} \alpha_j = - \sum_{j=1}^n D_{ij} \alpha_j \quad (9)$$

D_{ij} è nota come matrice di diffusione. Vale dunque la nuova espressione per i coefficienti di trasporto di Onsager:

$$L_{ij} = \sum_{k=1}^n D_{ik} R_{kj} \quad (10)$$

avendo indicato con R_{ij} la matrice inversa di s_{ij} .

In meccanica statistica si postula la seguente relazione tra l'entropia di un sistema isolato nello stato $\vec{\alpha}$ e la probabilità che il sistema si trovi in quello stato:

$$P[\alpha_1, \dots, \alpha_n] \sim e^{\Delta S(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \frac{1}{K}} \quad (11)$$

Con tale interpretazione, sviluppare al secondo ordine l'entropia come in (5) equivale a considerare fluttuazioni gaussiane dall'equilibrio; e ciò sappiamo che è ben verificato nei limiti di validità del teorema del limite centrale, cioè per fluttuazioni dell'ordine $\sim \frac{1}{\sqrt{N}}$.

Date queste premesse possiamo ricavare le relazioni di reciprocità di Onsager (2) a partire dall'ipotesi di reversibilità della dinamica microscopica. Immediata conseguenza della reversibilità microscopica è:

$$\overline{\alpha_i(t)\alpha_j(t+\tau)} = \overline{\alpha_i(t)\alpha_j(t-\tau)} \quad (12)$$

Il valor medio è preso su un ensemble distribuito secondo la probabilità definita dalla relazione (11) e, per il teorema ergodico, coincide con la media temporale. Tale relazione (12) si esprime dicendo che la correlazione tra lo stato al tempo t ed al tempo successivo $t + \tau$ è uguale alla correlazione con lo stato al tempo precedente $t - \tau$. In altri termini, fissato lo stato a $t = 0$, le fluttuazioni nel futuro e nel passato hanno la stessa distribuzione. Una forma equivalente della relazione (12) è:

$$\overline{\alpha_i(t)\alpha_j(t+\tau)} = \overline{\alpha_i(t+\tau)\alpha_j(t)} \quad (13)$$

ottenuta riscaldando il tempo a secondo membro. È ragionevole assumere che il processo $\vec{\alpha}(t)$ sia un processo di Markov. In questo caso la relazione (13) è equivalente a:

$$\overline{\overline{\alpha_i(t)\{\alpha_j(t+\tau)\}_{\alpha_1(t),\dots,\alpha_n(t)}}} = \overline{\overline{\alpha_j(t)\{\alpha_i(t+\tau)\}_{\alpha_1(t),\dots,\alpha_n(t)}}$$

dove la media interna è fatta supponendo fissato lo stato all'istante t . Sottraendo $\overline{\alpha_i(t)\alpha_j(t)}$ ad entrambi i membri si ottiene:

$$\overline{\overline{\alpha_i(t)\{\alpha_j(t+\tau) - \alpha_j(t)\}_{\alpha_1(t),\dots,\alpha_n(t)}}} = \overline{\overline{\alpha_j(t)\{\alpha_i(t+\tau) - \alpha_i(t)\}_{\alpha_1(t),\dots,\alpha_n(t)}}} \quad (14)$$

Per come è stata definita la corrente J_i possiamo identificare:

$$J_i(t) = \frac{1}{\tau} \overline{\overline{\{\alpha_i(t+\tau) - \alpha_i(t)\}_{\alpha_1(t),\dots,\alpha_n(t)}}$$

dunque, usando le relazioni fenomenologiche (2), la (14) assume la forma:

$$\sum_{k=1}^n L_{j,k} \overline{\overline{\alpha_i X_k}} = \sum_{k=1}^n L_{i,k} \overline{\overline{\alpha_j X_k}} \quad (15)$$

Resta da calcolare le correlazioni $\overline{\overline{\alpha_i X_j}}$ e ciò si fa con un calcolo diretto utilizzando l'approssimazione (5) per l'entropia:

$$\overline{\overline{\alpha_i X_j}} = \int d\alpha_1 \dots d\alpha_n e^{\Delta S(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \frac{1}{k}} \alpha_i X_j =$$

$$= - \sum_{k=1}^n s_{j,k} \int d\alpha_1 \dots d\alpha_n \exp\left\{-\frac{1}{2K} \sum_{a,b} s_{ab} \alpha_a \alpha_b\right\} \alpha_i \alpha_k = -K \delta_{i,j}$$

Sostituendo nella (15) si ottengono le relazioni di reciprocità.

Per semplificare la notazione consideriamo d'ora in poi un unico parametro di stato α (il che equivale ad avere un sistema con un solo tipo di processo dissipativo). L'assunzione fatta fin'ora è che, a partire da una fluttuazione α , di entropia $\Delta S(\alpha) = -\frac{1}{2}s\alpha^2$, il sistema rilassa all'equilibrio seguendo, in media, l'equazione fenomenologica:

$$J = LX \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d\alpha}{dt} = -Ls\alpha(t) \quad (16)$$

Il principale limite di tale ipotesi è legata al fatto che l'equazione (16) è deterministica, dunque non è possibile descrivere eventuali fluttuazioni a partire dallo stato di equilibrio. Per risolvere tale limitazione Onsager ha proposto di considerare $\alpha(t)$ come un processo stocastico, la cui evoluzione temporale in media è soluzione dell'equazione deterministica (16). Un'ipotesi ragionevole è che il parametro α si possa scrivere, in un modello cinetico, come somma algebrica di variabili molecolari. Dunque per il teorema del limite centrale ci aspettiamo che le fluttuazioni di $\alpha(t)$ dalla traiettoria deterministica siano descritte da un processo gaussiano a media nulla. Il modo più semplice per ottenere ciò si ha prendendo $\alpha(t)$ soluzione dell'equazione differenziale stocastica:

$$Rd\alpha(t) = -s\alpha(t)dt + \varepsilon dW(t) \quad (17)$$

essendo $W(t)$ il processo di Wiener ed ε un parametro che misura le fluttuazioni stocastiche e va legato alle costanti fenomenologiche $R = L^{-1}$ ed s .

Dall'interpretazione probabilistica di entropia otteniamo la densità di probabilità delle fluttuazioni ad un istante di tempo generico:

$$f\left(\frac{\alpha}{t}\right) \propto e^{-\Delta S(\alpha)\frac{1}{K}} \simeq e^{-\frac{s}{2K}\alpha^2} \quad (18)$$

In generale definiamo la densità di probabilità congiunta di p eventi tramite:

$$f\left(\begin{matrix} \alpha_1 & \dots & \alpha_p \\ t_1 & & t_p \end{matrix}\right) d\alpha_1 \dots d\alpha_p = P[\alpha(t_1) \in (\alpha_1, \alpha_1 + d\alpha_1); \dots; \alpha(t_p) \in (\alpha_p, \alpha_p + d\alpha_p)]$$

e la densità di probabilità dell'evento $\alpha(t_2) = \alpha_2$ condizionata dall'evento $\alpha(t_1) = \alpha_1$:

$$f\left(\begin{array}{c} \alpha_2 \\ t_2 \end{array} \middle| \begin{array}{c} \alpha_1 \\ t_1 \end{array}\right) d\alpha_2 = P[\alpha(t_2) \in (\alpha_2, \alpha_2 + d\alpha_2) \mid \alpha(t_1) = \alpha_1]$$

Per la proprietà di Markov vale la relazione:

$$f\left(\begin{array}{c} \alpha_1 \quad \dots \quad \alpha_p \\ t_1 \quad \dots \quad t_p \end{array}\right) = f\left(\begin{array}{c} \alpha_1 \\ t_1 \end{array}\right) f\left(\begin{array}{c} \alpha_2 \\ t_2 \end{array} \middle| \begin{array}{c} \alpha_1 \\ t_1 \end{array}\right) \dots f\left(\begin{array}{c} \alpha_p \\ t_p \end{array} \middle| \begin{array}{c} \alpha_{p-1} \\ t_{p-1} \end{array}\right)$$

dunque risulta particolarmente interessante conoscere la densità di probabilità condizionata $f\left(\begin{array}{c} \alpha_2 \\ t_2 \end{array} \middle| \begin{array}{c} \alpha_1 \\ t_1 \end{array}\right)$, poichè ci permette di conoscere la densità di probabilità congiunta di p eventi $f\left(\begin{array}{c} \alpha_1 \quad \dots \quad \alpha_p \\ t_1 \quad \dots \quad t_p \end{array}\right)$. Partiamo dall'equazione differenziale stocastica (17). La soluzione formale è:

$$\alpha(t) = \alpha(0)e^{-\gamma t} + \frac{\varepsilon}{R} \int_0^t e^{-\gamma(t-s)} dW(s)$$

con $\gamma = \frac{s}{R}$. Il processo:

$$Y(t) = e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma s} dW(s)$$

è un processo gaussiano di media nulla e varianza:

$$E[Y(t)^2] = e^{-2\gamma t} \int_0^t e^{2\gamma s} ds = \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})$$

Utilizzando questi risultati otteniamo l'espressione della densità di probabilità condizionata:

$$f\left(\begin{array}{c} \alpha \\ t + \tau \end{array} \middle| \begin{array}{c} \alpha_0 \\ t \end{array}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi \frac{\varepsilon^2}{Rs} (1 - e^{-2\gamma\tau})}} \exp\left\{-\frac{(\alpha - \alpha_0 e^{-\gamma\tau})^2}{\frac{\varepsilon^2}{Rs} (1 - e^{-2\gamma\tau})}\right\}$$

Per $\tau \rightarrow \infty$, $\alpha(t)$ ed $\alpha(t + \tau)$ sono variabili indipendenti, quindi questa espressione si deve ridurre alla (18). Tale richiesta fissa il valore del parametro ε pari a $\sqrt{2KR}$. Risulta dunque:

$$f\left(\begin{array}{c} \alpha \\ t + \tau \end{array} \middle| \begin{array}{c} \alpha_0 \\ t \end{array}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{K}{s} (1 - e^{-2\gamma\tau})}} \exp\left\{-\frac{(\alpha - \alpha_0 e^{-\gamma\tau})^2}{\frac{K}{s} (1 - e^{-2\gamma\tau})}\right\} \quad (19)$$

Cerchiamo di riscrivere la relazione (19) in una forma più interessante fisicamente. Dividiamo l'intervallo di tempo τ in intervalli di lunghezza $\Delta = \frac{\tau}{p}$:

$$t_1 = t, t_2 = t + \Delta, \dots, t_{p+1} = t + \tau$$

Per l'equazione di Chapman-Kolmogorov abbiamo:

$$\begin{aligned} f \left(\begin{array}{c|c} \alpha_{p+1} & \alpha_1 \\ t_{p+1} & t_1 \end{array} \right) &= \int d\alpha_2 \dots d\alpha_p f \left(\begin{array}{c|c} \alpha_2 & \alpha_1 \\ t_2 & t_1 \end{array} \right) \dots f \left(\begin{array}{c|c} \alpha_{p+1} & \alpha_p \\ t_{p+1} & t_p \end{array} \right) = \\ &= \int d\alpha_2 \dots d\alpha_p \left[2\pi \frac{K}{s} (1 - e^{-2\gamma\Delta}) \right]^{-\frac{p}{2}} \exp \left\{ -\frac{s}{2K} \sum_{i=1}^p \frac{(\alpha_{i+1} - \alpha_i e^{-\gamma\Delta})^2}{1 - e^{-2\gamma\Delta}} \right\} \simeq \end{aligned}$$

per $\Delta \simeq 0$

$$\simeq \frac{1}{(4\pi \frac{K}{R} \Delta)^{\frac{p}{2}}} \int d\alpha_2 \dots d\alpha_p \exp \left\{ -\frac{R}{4K\Delta} [(\alpha_{p+1} - \lambda\alpha_p)^2 + \dots + (\alpha_2 - \lambda\alpha_1)^2] \right\}$$

avendo indicato $\lambda = 1 - \gamma\Delta$. Un aspetto interessante è che, a meno di una costante di proporzionalità, ogni integrazione può essere sostituita prendendo il minimo dell'esponente rispetto la corrispondente variabile. Con un calcolo diretto si trova infatti che:

$$\begin{aligned} \int d\beta \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} [(\gamma - \lambda\beta)^2 + (\beta - \lambda\alpha)^2] \right\} &= \sqrt{2\pi \frac{\sigma^2}{1 + \lambda^2}} \exp \left\{ -\frac{(\gamma - \lambda^2\alpha)^2}{2(1 + \lambda^2)\sigma^2} \right\} = \\ &= \sqrt{2\pi \frac{\sigma^2}{1 + \lambda^2}} \exp \left\{ -\min_{\beta \in \mathbb{R}} \frac{1}{2\sigma^2} [(\gamma - \lambda\beta)^2 + (\beta - \lambda\alpha)^2] \right\} \end{aligned}$$

Usando tale risultato otteniamo:

$$f \left(\begin{array}{c|c} \alpha_{p+1} & \alpha_1 \\ t_{p+1} & t_1 \end{array} \right) = \left(\frac{2}{1 + \lambda^2} \right)^{\frac{p}{2}} \exp \left\{ -\frac{R}{4K\Delta} \min_{\alpha_2, \dots, \alpha_p} [(\alpha_{p+1} - \lambda\alpha_p)^2 + \dots + (\alpha_2 - \lambda\alpha_1)^2] \right\}$$

Per $\Delta \rightarrow 0$ la somma ad esponente tende ad un integrale e minimizzare su $\alpha_2, \dots, \alpha_p$ si traduce nel minimizzare rispetto tutte le traiettorie $\alpha(\cdot) \in C^{(1)}$ che soddisfano i vincoli: $\alpha(t_i) = \alpha_i$; $\alpha(t_f) = \alpha_f$:

$$f \left(\begin{array}{c|c} \alpha_2 & \alpha_1 \\ t_2 & t_1 \end{array} \right) \propto \exp \left\{ -\frac{R}{4K} \inf_{\substack{\alpha(t_1) = \alpha_1 \\ \alpha(t_2) = \alpha_2}} \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{d\alpha(t)}{dt} + \gamma\alpha(t) \right]^2 \right\} \quad (20)$$

Cerchiamo di capire qual è la traiettoria $\alpha_{min}(t)$ per cui il funzionale:

$$I_{\alpha_1, \alpha_2}^{t_1, t_2}(\alpha(\cdot)) = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{d\alpha(t)}{dt} + \gamma\alpha(t) \right]^2$$

assume il valore minimo condizionato dai vincoli: $\alpha(t_1) = \alpha_1$, $\alpha(t_2) = \alpha_2$.
Tale punto di minimo è soluzione dell'equazione di Eulero-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{\alpha}} L(\alpha, \dot{\alpha}) = \frac{\partial}{\partial \alpha} L(\alpha, \dot{\alpha})$$

con funzione lagrangiana:

$$L(\alpha, \dot{\alpha}) = [\dot{\alpha} + \gamma\alpha]^2$$

Esplicitando l'equazione di Eulero-Lagrange si ha:

$$\frac{d^2}{dt^2} \alpha(t) = \gamma^2 \alpha(t)$$

la cui soluzione generale è:

$$\alpha(t) = A_+ e^{\gamma t} + A_- e^{-\gamma t}$$

I coefficienti A_+ e A_- vanno fissati in base alle condizioni al contorno. Due situazioni particolarmente semplici sono:

1) per $t_2 = \infty$ e $\alpha(\infty) = 0$ abbiamo:

$$\alpha_{min}(t) = \alpha_0 e^{-\gamma t}$$

2) per $t_1 = -\infty$ e $\alpha(-\infty) = 0$ risulta:

$$\alpha_{min}(t) = \alpha_0 e^{\gamma t}$$

A partire dalla relazione (20) possiamo cercare in generale la distribuzione di probabilità congiunta di p eventi:

$$\begin{aligned} f \left(\begin{array}{ccc} \alpha_1 & \dots & \alpha_p \\ t_1 & & t_p \end{array} \right) &= f \left(\begin{array}{c} \alpha_1 \\ t_1 \end{array} \right) f \left(\begin{array}{c|c} \alpha_2 & \alpha_1 \\ t_2 & t_1 \end{array} \right) \dots f \left(\begin{array}{c|c} \alpha_p & \alpha_{p-1} \\ t_p & t_{p-1} \end{array} \right) \propto \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{s}{2K} \alpha_1^2 - \frac{R}{4K} \inf_{\substack{\alpha(t_1) = \alpha_1 \\ \alpha(t_2) = \alpha_2}} \int_{t_1}^{t_2} dt [\dot{\alpha}(t) + \gamma\alpha(t)]^2 + \dots \right. \\ &\quad \left. \dots - \frac{R}{4K} \inf_{\substack{\alpha(t_{p-1}) = \alpha_{p-1} \\ \alpha(t_p) = \alpha_p}} \int_{t_{p-1}}^{t_p} dt [\dot{\alpha}(t) + \gamma\alpha(t)]^2 \right\} = \end{aligned}$$

$$= \exp \left\{ -\frac{s}{2K} \alpha_1^2 - \frac{s}{4K} [\alpha_p^2 - \alpha_1^2] - \frac{R}{4K} \inf_{\substack{\alpha(t_1) = \alpha_1 \\ \dots \\ \alpha(t_p) = \alpha_p}} \int_{t_1}^{t_p} dt [\dot{\alpha}(t)^2 + \gamma^2 \alpha(t)^2] \right\}$$

Estendiamo l'integrale ad esponente tra $-\infty$ e $+\infty$ aggiungendo e sottraendo le parti mancanti. A tale scopo si utilizzano le relazioni:

$$\begin{aligned} \inf_{\substack{\alpha(-\infty) = 0 \\ \alpha(t_1) = \alpha_1}} \int_{-\infty}^{t_1} dt [\dot{\alpha}(t)^2 + \gamma^2 \alpha(t)^2] &= \gamma \alpha_1^2 \\ \inf_{\substack{\alpha(t_p) = \alpha_p \\ \alpha(\infty) = 0}} \int_{t_p}^{\infty} dt [\dot{\alpha}(t)^2 + \gamma^2 \alpha(t)^2] &= \gamma \alpha_p^2 \end{aligned}$$

si giunge così al risultato finale:

$$f \left(\begin{array}{ccc} \alpha_1 & \dots & \alpha_p \\ t_1 & & t_p \end{array} \right) \propto \exp \left\{ -\frac{R}{4K} \inf_{\substack{\alpha(-\infty) = \alpha(\infty) = 0 \\ \alpha(t_1) = \alpha_1 \\ \dots \\ \alpha(t_p) = \alpha_p}} \int_{-\infty}^{\infty} dt [\dot{\alpha}(t)^2 + \gamma^2 \alpha(t)^2] \right\} \quad (21)$$

Questa relazione è molto interessante. Interpretiamo il funzionale:

$$I(\alpha(\cdot)) = \frac{R}{4K} \int_{-\infty}^{\infty} dt [\dot{\alpha}(t)^2 + \gamma^2 \alpha(t)^2]$$

come funzionale entropia; permette infatti di stimare la probabilità che la traiettoria $\alpha(t)$ sia all'interno di un generico insieme \mathcal{G} :

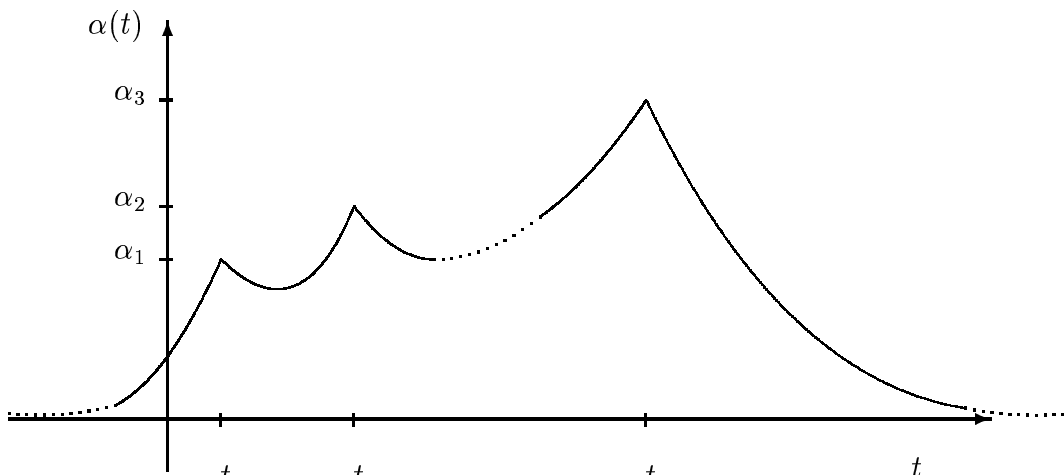
$$P[\alpha(\cdot) \in \mathcal{G}] \sim \exp \left\{ -\inf_{\mathcal{G}} I(\alpha(\cdot)) \right\}$$

Inoltre il punto di minimo del funzionale $I(\alpha(\cdot))$ corrisponde alla traiettoria più probabile fra quelle dell'insieme \mathcal{G} .

Possiamo quindi concludere che la traiettoria più probabile che soddisfa i vincoli: $\alpha(t_1) = \alpha_1$, ..., $\alpha(t_p) = \alpha_p$ è soluzione dell'equazione:

$$\ddot{\alpha}(t) = \gamma^2 \alpha(t)$$

in ogni aperto (t_k, t_{k+1}) con condizioni di continuità agli estremi di tali intervalli; negli istanti t_k ci saranno in generale delle singolarità.



Come caso particolare, la traiettoria più probabile che soddisfa i vincoli $\alpha(0) = \alpha_0$ e $\alpha(\infty) = 0$ è:

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{\gamma t}$$

Ciò vuol dire che, se si parte da uno stato α fuori dall'equilibrio, il sistema rilassa all'equilibrio seguendo la traiettoria deterministica definita dall'equazione:

$$\dot{\alpha}(t) = -\gamma \alpha(t)$$

che è proprio l'equazione fenomenologica (16). La situazione speculare è quella con vincoli: $\alpha(-\infty) = 0$ e $\alpha(0) = \alpha_0$. In questo caso la traiettoria più probabile è:

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{\gamma t}$$

Dunque la traiettoria più probabile che descrive una fluttuazione a partire dallo stato di equilibrio si ottiene con un'operazione di time reversal sulla soluzione dell'equazione fenomenologica (16) che descrive il rilassamento verso l'equilibrio. Tale risultato è noto come *relazione di time reversal di Onsager-Machlup*.

0.2 Modelli stocastici di particelle interagenti

Anche per la termodinamica del non-equilibrio, così come per quella di equilibrio, si cerca di ricavare ed interpretare le leggi fondamentali studiando modelli microscopici.

In un modello deterministico le particelle vengono considerate punti materiali (o corpi rigidi) interagenti l'uno con l'altro con evoluzione definita dalle equazioni cardinali della dinamica. A partire dagli anni '60 si è cominciato a studiare modelli stocastici di particelle interagenti su reticolo. Un tipico sistema di particelle interagenti è costituito da un numero finito di particelle, ognuna delle quali evolve stocasticamente su un reticolo spaziale. In assenza di interazioni si descrive il moto di ogni particella come un random walk indipendente; a questo moto si sovrappongono le interazioni con le altre particelle con il risultato che il moto delle singole particelle dipende in ogni istante dalla configurazione di tutte le altre particelle.

Nella tesi si analizzano il limite idrodinamico e le grandi deviazioni di un modello stocastico su reticolo unidimensionale che descrive un gas con interazioni locali (zero range) a contatto con due riserve di particelle che forzano il sistema fuori dall'equilibrio. A seguito di tale studio si trova che, anche per questo modello di non-equilibrio, valgono le relazioni di reciprocità di Onsager e si trova una generalizzazione della relazione di time reversal di Onsager-Machlup.

Definiamo il modello supponendo che le particelle possano muoversi da un sito all'altro di un reticolo unidimensionale di $(2L + 1)$ punti: $\Lambda_L = \{-L, -L + 1, \dots, L - 1, L\}$. Indichiamo con $\eta_t(x)$ il numero di particelle in x all'istante t ; la configurazione del gas al tempo t è per definizione:

$$\eta_t = \{\eta_t(x), x \in \Lambda_L\} \in \mathbb{N}^{\Lambda_L}$$

Gli stati del sistema sono dati dalle distribuzioni di probabilità sullo spazio delle configurazioni:

$$\mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{N}^{\Lambda_L})$$

Resta da definire la dinamica del sistema. Supponiamo che una generica particella del sito x possa saltare con ugual probabilità verso destra o verso sinistra su un sito primo vicino ed il salto avviene con un tasso di transizione $g(\eta(x))$ dipendente solo dal numero di particelle in x (interazioni locali). Inoltre dai bordi entrano particelle con un tasso di transizione $\frac{1}{2}p_{\pm}$, essendo p_- e p_+ le fugacità delle riserve di particelle rispettivamente a sinistra e a destra del reticolo.

Possiamo dunque calcolare la probabilità $P_t(\eta, \eta')$ che il sistema passi dalla configurazione η alla configurazione η' nell'intervallo di tempo $[0, t]$. Tale probabilità è soluzione delle equazioni di Kolmogorov:

$$\frac{d}{dt}P_t = \Omega_L \circ P_t = P_t \circ \Omega_L$$

avendo indicato con \circ il prodotto di convoluzione tra operatori. Ω_L è noto come *generatore* della dinamica ed è espresso dalla sua azione sulle funzioni in \mathbb{N}^{Λ_L} :

$$\Omega_L f(\eta) = \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda_L} g(\eta(x)) [f(\eta^{x,x+1}) + f(\eta^{x,x-1}) - 2f(\eta)] + \frac{1}{2} \sum_{+,-} p_{\pm} [f(\eta^{\pm L}) - f(\eta)]$$

Data la configurazione η , la configurazione $\eta^{x,x+1}$ (risp. $\eta^{x,x-1}$) si ottiene, per definizione, a seguito del salto di una particelle verso destra (risp. sinistra); mentre η^L (risp. η^{-L}) si ottiene a seguito dell'ingresso di una particella dal bordo destro (risp. sinistro) del reticolo.

Dato un generico stato iniziale $\mu_0 \in \mathcal{M}_1(\mathbb{N}^{\Lambda_L})$, lo stato del sistema ad ogni istante t è definito da:

$$\mu_t = \mu_0 \circ P_t \quad \Leftrightarrow \quad \mu_t[\eta] = \sum_{\eta' \in \mathbb{N}^{\Lambda_L}} \mu_0[\eta'] P_t(\eta', \eta)$$

ovvero, per l'equazione di Kolmogorov, è soluzione di:

$$\frac{d}{dt} \mu_t = \mu_t \circ \Omega_L$$

Il primo risultato interessante è l'esistenza ed unicità della misura stazionaria μ_L , cioè dello stato che soddisfa la relazione di stazionarietà: $\mu_L \circ \Omega_L = 0$. Tale distribuzione di probabilità è una misura prodotto sullo spazio \mathbb{N}^{Λ_L} con marginali:

$$\mu_L[\eta(x) = k] = \frac{p_L(x)^k}{g(k)!} \frac{1}{\mathcal{Z}(p_L(x))}$$

essendo $p_L(x)$ il profilo lineare di fugacità tra p_- e p_+ :

$$p_L(x) = \alpha \frac{x}{L+1} + \beta$$

con $\alpha = \frac{p_+ + p_-}{2}$ e $\beta = \frac{p_+ - p_-}{2}$. $\mathcal{Z}(p)$ è la costante di normalizzazione (o funzione di partizione): $\mathcal{Z}(p) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^k}{g(k)!}$.

Gli stati di equilibrio si ottengono per $p_+ = p_- = \varphi$. Si ha così una famiglia di stati di equilibrio: $\{\mu_{\varphi}; \varphi \in \mathbb{R}^+\}$, parametrizzata dalla fugacità φ . Ad ogni valore del parametro φ corrisponde una densità

$$\rho(\varphi) = \mu_{\varphi}[\eta(0)]$$

Dunque la famiglia di misure di equilibrio può essere parametrizzata tramite la densità: $\{\nu_{\rho} \equiv \mu_{\varphi(\rho)}; \rho \in \mathbb{R}^+\}$ essendo $\varphi(\rho)$ la funzione inversa di $\rho(\varphi)$, espressa da:

$$\varphi(\rho) = \nu_{\rho}[g(\eta(0))]$$

Dato uno stato μ è definito il prodotto scalare tra funzioni in \mathbb{N}^{Λ_L} :

$$\langle f, g \rangle_\mu = \sum_{\eta \in \mathbb{N}^{\Lambda_L}} \mu[\eta] f(\eta) g(\eta)$$

Indichiamo con $L_2(\mu)$ lo spazio delle funzioni a norma finita, cioè tali che $\langle f, f \rangle_\mu < \infty$. Il generatore Ω_L si può interpretare come operatore sullo spazio $L_2(\mu)$ ed ha senso chiedersi qual è l'operatore aggiunto Ω_L^* definito da:

$$\langle f, \Omega_L g \rangle_\mu = \langle \Omega_L^* f, g \rangle_\mu$$

per ogni coppia di funzioni f e g in $L_2(\mu)$. È noto che se μ è lo stato stazionario allora l'operatore aggiunto Ω_L^* può essere interpretato come generatore della dinamica che si ottiene sottoponendo il sistema a time reversal. La sua espressione operatoriale è:

$$\begin{aligned} \Omega_L^* f(\eta) = & \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda_L} g(\eta(x)) \left\{ \frac{p_L(x+1)}{p_L(x)} f(\eta^{x,x+1}) - f(\eta) \right\} + \frac{p_L(x-1)}{p_L(x)} [f(\eta^{x,x-1}) - f(\eta)] \Big\} + \\ & + \frac{1}{2} p_L(L) [f(\eta^L) - f(\eta)] + \frac{1}{2} p_L(-L) [f(\eta^{-L}) - f(\eta)] \end{aligned}$$

Una volta noto lo stato stazionario si può esaminare l'evoluzione macroscopica del sistema a partire da uno stato differente da quello stazionario. All'istante iniziale $t = 0$ si descrive la situazione di non-equilibrio con un disegno di equilibrio locale. Si suppone cioè che ogni intorno macroscopico I_u sia "vicino" allo stato di equilibrio caratterizzato dalla densità $\gamma(u)$. Durante l'evoluzione ci aspettiamo che tale disegno di equilibrio locale evolva in modo dolce. Più precisamente ci aspettiamo che ad un tempo macroscopico successivo τ l'intorno I_u sia ancora vicino ad uno stato di equilibrio $\rho(\tau, u)$, benché differente da quello iniziale, ed è ragionevole supporre che l'andamento temporale $\rho(\tau, u)$ sia regolare.

In altri termini, benché la dinamica sia intrinsecamente stocastica, quando la si osserva da un punto di vista "macroscopico" si ottiene un comportamento deterministico per la funzione densità $\rho(\tau, u)$, definito da un'equazione alle derivate parziali di tipo parabolica.

Specificiamo in che modo va adottato il punto di vista macroscopico.

1. Riscaldiamo innanzitutto lo spazio. Supponiamo cioè che la distanza tra due siti reticolari sia $\frac{1}{L}$. In questo modo quando si considera il limite $L \rightarrow \infty$ il gas resta nel dominio finito $[-1, 1]$, ma la distanza tra i siti reticolari tende a zero (limite continuo). In conclusione ad ogni sito reticolare $x \in \Lambda_L$ è associata la posizione macroscopica $u = \frac{x}{L} \in [-1, 1]$.

2. Il tempo va riscaldato quadraticamente rispetto lo spazio perchè il sistema

è di tipo diffusivo. Dunque al tempo microscopico t è associato il tempo macroscopico $\tau = \frac{t}{L^2}$.

3. Infine riscaldiamo le masse associando ad ogni particella un peso $\frac{1}{L}$.

In base a queste considerazioni la densità macroscopica risulta descritta dalla *misura empirica*:

$$\pi_\tau^L(du) = \sum_{x \in \Lambda_L} \frac{1}{L} \eta_{L^2\tau}(x) \delta_{\frac{x}{L}}(du)$$

($\delta_a(\cdot)$ è la delta di Dirac su $[-1, 1]$ concentrata in a). Tale misura associa ad ogni dominio macroscopico $A \subset [-1, 1]$ il valore della massa delle particelle in esso contenute all'istante macroscopico τ . La misura empirica è ovviamente funzione della configurazione $\eta_{L^2\tau}$ del sistema al tempo $L^2\tau$; dunque va interpretata come variabile casuale a valori nello spazio $\mathcal{M}_+([-1, 1])$ delle misure positive su $[-1, 1]$.

Si può dimostrare che vale una legge dei grandi numeri per la misura empirica secondo cui, nel limite $L \rightarrow \infty$, tende debolmente ed in probabilità ad un proceso deterministico assolutamente continuo rispetto la misura di Lebesgue:

$$\pi_\tau^L(du) \xrightarrow{p} \rho(\tau, u) du$$

purché si suppone che lo stato iniziale μ_0^L descriva una situazione di “equilibrio locale” con profilo di densità $\rho(0, u) = \rho_0(u)$. Diciamo dunque che il sistema ha *comportamento idrodinamico* e l'equazione alle derivate parziali che definisce la densità limite $\rho(\tau, u)$ è nota come *equazione idrodinamica*.

Per il modello zero range di non-equilibrio definito sopra si ha che l'equazione idrodinamica diretta è:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u))$$

mentre l'idrodinamica aggiunta è descritta da:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \alpha \partial_u \frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)}$$

Entrambe queste equazioni vanno considerate insieme ai vincoli sulla fugacità definiti dalle riserve di particelle ai bordi:

$$\varphi(\rho(\tau, \pm 1)) = p_\pm$$

ed alla condizione iniziale:

$$\rho(0, u) = \rho_0(u)$$

La situazione stazionaria, soluzione di $\partial_\tau \rho(\tau, u) = 0$, è caratterizzata dal profilo lineare della fugacità:

$$\varphi(\rho(u)) = p(u) = \alpha u + \beta$$

Nel seguito indicheremo con $\tilde{\rho}_\gamma$ (risp. $\tilde{\rho}_\gamma^*$) la soluzione dell'equazione idrodinamica diretta (risp. aggiunta) corrispondente al profilo iniziale $\gamma(u)$.

La soluzione dell'equazione idrodinamica definisce il comportamento medio, più probabile, del sistema a partire da uno stato di equilibrio locale di profilo $\gamma(u)$. Uno sviluppo naturale della teoria consiste nello studiare le fluttuazioni da tale comportamento medio. Si cerca cioè con che probabilità l'evoluzione macroscopica del sistema segue un andamento fissato $\rho(\tau, u)$ che non è soluzione dell'equazione idrodinamica. Si può chiedere ad esempio con che probabilità il sistema, partendo a $t = -\infty$ dallo stato stazionario, fluttua raggiungendo all'istante $t = 0$ una configurazione di equilibrio locale di profilo $\gamma(u)$.

Il risultato che si trova è che vale un principio di grandi deviazioni, secondo cui la probabilità che l'evoluzione macroscopica $\rho(\tau, u)$ sia all'interno di un insieme di traiettorie $\mathcal{G} \subset C([0, \infty) \times [-1, 1])$ è:

$$P_L[\rho(\tau, u) \in \mathcal{G}] \sim \exp \left\{ -L \inf_{\rho \in \mathcal{G}} I(\rho(\cdot)) \right\}$$

essendo $I(\rho(\cdot))$ il funzionale di grandi deviazioni che, per ovvie ragioni fisiche, viene identificato con il funzionale entropia.

Una volta noto il funzionale di grandi deviazioni si può rispondere a delle domande fisicamente interessanti. Si può vedere ad esempio se valgono le relazioni di reciprocità di Onsager ed il principio di time reversal di Onsager-Machlup, basati proprio sullo studio delle fluttuazioni di un sistema termodinamico dall'equilibrio.

Un vantaggio che si ha studiando modelli espliciti di particelle interagenti è la possibilità di cercare una generalizzazione delle relazioni di Onsager e di Onsager-Machlup a sistemi in cui non vale l'ipotesi di reversibilità della dinamica. D. Gabrielli, G. Jona Lasinio, C. Landim e M. E. Vares (cf. [12], [13] e [14]) hanno studiato un modello zero range con dinamica non simmetrica (cioè non reversibile) ed hanno mostrato che la reversibilità della dinamica microscopica, cioè la validità della condizione di bilancio dettagliato, non è condizione necessaria per la validità delle relazioni di Onsager ed Onsager-Machlup. Nulla è stato detto fin'ora riguardo la validità di tali relazioni in modelli stocastici forzati fuori dall'equilibrio dal contatto con delle riserve esterne, come quello analizzato in questa tesi.

A) Consideriamo inizialmente la relazione di time reversal di Onsager-Machlup. Supponiamo che il sistema sia disposto all'istante $-\infty$ nello stato stazionario ed imponiamo che all'istante 0 si trovi in una situazione di grandi deviazioni definita dal profilo di densità $\gamma(u)$. Ci chiediamo qual è l'evoluzione più probabile che fa fluttuare il sistema in tale situazione di equilibrio locale, ovvero qual è il punto di minimo del funzionale di grandi deviazioni nell'insieme \mathcal{G}_γ delle funzioni $\rho(\tau, u)$ tali che a $t = -\infty$ descrivono il profilo stazionario e a $t = 0$ verificano $\rho(0, u) = \gamma(u)$. Per il modello zero range di non-equilibrio si trova che tale traiettoria più probabile risulta la soluzione dell'equazione idrodinamica aggiunta invertita temporalmente: $\tilde{\rho}_\gamma^*(-\tau, u)$. Questo risultato generalizza il principio di time reversal di Onsager-Machlup secondo cui, per sistemi reversibili (e quindi quando il processo diretto e aggiunto coincidono), la traiettoria più probabile che fluttua fuori dall'equilibrio nello stato di profilo $\gamma(\cdot)$ si ottiene invertendo temporalmente la traiettoria deterministica che rilassa verso l'equilibrio a partire dall'equilibrio locale di profilo $\gamma(\cdot)$.

B) Per definire i coefficienti di trasporto di Onsager bisogna considerare sistemi con almeno due processi dissipativi. Per questo motivo è necessario estendere lo studio delle grandi deviazioni ad un modello con due tipi di particelle. Anche per il modello a due componenti si trova un comportamento idrodinamico definito dall'equazione:

$$\partial_\tau \rho_a(\tau, u) \left[\sum_{b=1,2} D_{ab}(\vec{\rho}(\tau, u)) \partial_u \rho_b(\tau, u) \right]$$

essendo $\vec{\rho}(\tau, u)$ il profilo di densità dei due tipi di particelle e $D_{ab}(\vec{\rho})$ la matrice di diffusione. Se $I(\vec{\rho}(\cdot, \cdot))$ è il funzionale di grandi deviazioni e $\mathcal{G}_\vec{\gamma}$ è l'insieme delle traiettorie tali che $\vec{\rho}(-\infty, u)$ è il profilo stazionario e $\vec{\rho}(0, u) = \vec{\gamma}(u)$, definiamo il funzionale entropia:

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = \inf_{\mathcal{G}_\vec{\gamma}} I(\vec{\rho}(\cdot, \cdot))$$

Tale funzionale si scrive come integrale di una densità di entropia $s(\vec{\gamma}(u))$ da cui si ottiene la matrice:

$$R_{ab}^{-1}(\vec{\rho}) = \frac{\partial^2}{\partial \rho_a \partial \rho_b} s(\vec{\rho})$$

Ricordando la relazione (10) risulta che i coefficienti di trasporto di Onsager possono essere definiti tramite la relazione:

$$L_{ab}(\vec{\rho}) = \sum_{c=1,2} D_{ac}(\vec{\rho}) R_{cb}(\vec{\rho})$$

e le relazioni di reciprocità di Onsager sono espresse dalla simmetria di tale matrice:

$$L_{ab} = L_{ba}$$

La novità di tale simmetria consiste nel fatto che le relazioni di reciprocità risultano verificate in un sistema di non-equilibrio.

Schema riassuntivo della tesi

Questa tesi è organizzata nel modo seguente.

Nel primo capitolo sono definite le catene di Markov omogenee a tempo continuo su spazio discreto. È definito il semigrupp delle probabilità di transizione, legato al generatore della dinamica dalle equazioni di Kolmogorov. Particolare attenzione è posta sui teoremi che garantiscono l'ergodicità, ovvero l'esistenza ed unicità di una distribuzione stazionaria asintotica. Data una misura stazionaria viene infine definito il processo aggiunto rispetto tale misura, fisicamente legato all'inversione temporale della dinamica microscopica.

Un lettore completamente a digiuno di teoria della probabilità può trovare alcuni elementi fondamentali (necessari per la comprensione della tesi) in appendice A. In appendice B viene invece dimostrato un risultato importante sui processi di Markov non omogenei, che risulterà utile nello studio delle grandi deviazioni dei sistemi di particelle interagenti.

I capitoli 2, 3 e 4 sono dedicati alla presentazione delle principali tecniche utilizzate nello studio di modelli stocastici di particelle interagenti. In particolare nel capitolo 3 vengono analizzate le nozioni di equilibrio locale e di comportamento idrodinamico. Il capitolo 4 riguarda invece lo studio delle grandi deviazioni ed il calcolo del funzionale di grandi deviazioni.

Nei restanti capitoli 5, 6 e 7 è presentato il lavoro da me svolto. Nel capitolo 5 si studiano l'idrodinamica diretta ed aggiunta di un modello di particelle interagenti zero range fuori dall'equilibrio. Si considera inizialmente il modello simmetrico con dinamica a primi vicini e poi si generalizza ad un modello asimmetrico. Nel capitolo 6 si studiano le grandi deviazioni dal limite idrodinamico e si trova l'espressione esplicita del funzionale di grandi deviazioni. Un'applicazione di tale studio consiste nella verifica delle relazioni di simmetria di Onsager e nella generalizzazione della relazione di time reversal di Onsager-Machlup. Nel capitolo 7 infine si calcola l'entropia totale del sistema e si verifica la validità del principio di minima produzione di entropia.

Capitolo 1

Catene di Markov su spazio discreto a tempo continuo

In questo capitolo vengono descritte le catene di Markov a tempo continuo, che costituiscono lo strumento essenziale per lo studio di sistemi di particelle interagenti.

Nel primo paragrafo ricordiamo la definizione di catena di Markov a tempi discreti, soffermandoci sul significato della proprietà di Markov ed enunciando il teorema ergodico per le catene di Markov, che assicura in condizioni generali l'esistenza e unicità dello stato stazionario.

Nel secondo paragrafo passiamo a definire le catene di Markov omogenee a tempo continuo; cerchiamo poi la definizione del generatore della dinamica e verifichiamo le equazioni di Kolmogorov (par. 3). Nel paragrafo 4 facciamo vedere che anche a tempo continuo vale l'esistenza e unicità dello stato stazionario in condizioni abbastanza generali; ci soffermiamo quindi sulla distinzione tra stati stazionari e stati reversibili (che verificano il bilancio dettagliato). Per gli stati stazionari che non verificano il bilancio dettagliato diamo la definizione del processo aggiunto e facciamo vedere che è legato all'operazione di time reversal.

Lo studio dei processi di Markov non omogenei ed il calcolo della derivata di Radon-Nikodim tra un processo omogeneo ed uno non omogeneo verranno effettuati in appendice B per non appesantire la trattazione.

1.1 Definizione di catene di Markov a tempo discreto

Indichiamo con \mathcal{A} un "alfabeto" di N simboli:

$$\mathcal{A} = \{a, b, \dots\}$$

dove $\alpha = a, b, \dots$ sono le lettere dell'alfabeto. Indichiamo con Ω_n la collezione di tutte le parole di n lettere:

$$\Omega_n = \{\omega = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n); \alpha_i \in \mathcal{A}\}$$

Vogliamo definire sullo spazio Ω_n una distribuzione di probabilità ben normalizzata; a tale scopo consideriamo delle funzioni:

$$p_0(\cdot) : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}_+ ; \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} p_0(\alpha) = 1$$

$$p_k(\cdot, \cdot) : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}_+ ; \sum_{\beta \in \mathcal{A}} p_k(\alpha, \beta) = 1, k = 1, \dots, n$$

Dunque ad ogni evento elementare $\omega = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \Omega_n$ associamo la probabilità:

$$P(\omega) = p_0(\alpha_0)p_1(\alpha_0, \alpha_1) \dots p_n(\alpha_{n-1}, \alpha_n)$$

(è facile verificare che tale funzione $P(\cdot)$ è una probabilità ben normalizzata: $\sum_{\omega \in \Omega_n} P(\omega) = 1$). In questo modo la terna:

$$(\Omega_n, \mathcal{F}, P)$$

con \mathcal{F} la σ -algebra dei sottoinsiemi di Ω_n , è uno spazio di probabilità.

Tale spazio di probabilità $(\Omega_n, \mathcal{F}, P)$ si presta ad una duplice interpretazione:

1. Si possono considerare gli eventi $\omega = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ come elementi di base a cui è associata una certa probabilità $P(\omega)$. Ad esempio si possono considerare le α come le lettere di un alfabeto e la $P(\omega)$ come la frequenza con cui la parola ω viene utilizzata.
2. Oppure si può immaginare l'evento ω come risultato di una evoluzione temporale. Possiamo cioè immaginare un sistema che evolve tra le configurazioni $\alpha \in \mathcal{A}$ in modo casuale (ad esempio una particella browniana che si muove in un reticolo); in questo caso interpretiamo $p_k(\alpha, \beta)$ come la probabilità di passare, nel k -simo intervallo di tempo discretizzato, dalla configurazione α a β .

Alla luce di questa seconda interpretazione del modello probabilistico (Ω_n, P) , può essere interessante sapere qual è la configurazione del sistema ad un istante di tempo fissato. Definiamo dunque la successione di variabili casuali:

$$\{X_k : \Omega_n \rightarrow \mathcal{A} ; k = 0, 1, \dots, n\}$$

tale che:

$$X_k(\omega = (\alpha_0, \dots, \alpha_n)) = \alpha_k$$

Da come è definita la probabilità nello spazio Ω_n risulta che la funzione p_0 descrive la distribuzione di probabilità della configurazione del sistema all'istante iniziale:

$$P[X_0 = \alpha] = p_0(\alpha)$$

e le funzioni p_k descrivono le probabilità di transizione del sistema da una configurazione fissata all'istante $k - 1$ ad una nuova configurazione all'istante k :

$$P[X_k = \beta \mid X_{k-1} = \alpha] = p_k(\alpha, \beta)$$

Chiaramente fissare una successione definita di configurazioni del sistema equivale a fissare un evento elementare, quindi:

$$P[X_0 = \alpha_0, X_1 = \alpha_1, \dots, X_n = \alpha_n] = p_0(\alpha_0)p_1(\alpha_0, \alpha_1)\dots p_n(\alpha_{n-1}, \alpha_n)$$

La successione di variabili casuali $\{X_n\}$ è un esempio di *catena di Markov* poiché verifica la proprietà di Markov, espressa dalla relazione:

$$P[X_{k+1} = \alpha_{k+1} \mid X_k = \alpha_k, X_{k-1} = \alpha_{k-1}, \dots, X_0 = \alpha_0] = P[X_{k+1} = \alpha_{k+1} \mid X_k = \alpha_k]$$

Questa proprietà si può esprimere dicendo che le catene di Markov non mantengono la memoria del passato; infatti, se è fissata la configurazione del sistema ad un istante k , allora ciò che succede ad un istante successivo $k + 1$ non dipende da ciò che è successo agli istanti precedenti $0, 1, \dots, k - 1$. Con uno slogan possiamo dire che, se il passato (B) ed il presente (N) sono dati, allora il futuro (F) dipende solo dal presente ed è indipendente dal passato:

$$P[F|NB] = P[F|N]$$

Nel dare una definizione generale di catena di Markov può essere utile considerare la situazione in cui le variabili casuali X_n assumono valori in uno spazio $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}$ generico (ad esempio non numerabile). Tale generalizzazione risulta necessaria ad esempio quando si considera il limite idrodinamico di sistemi di particelle interagenti. In tal caso la proprietà di Markov si esprime tramite le probabilità condizionate da σ -algebre (definite in app. A)

Definizione Sia (Ω, \mathcal{F}, P) uno spazio di probabilità e sia $\{\mathcal{F}_n\}$ una successione di σ -algebre tale che $\mathcal{F}_1 \subset \mathcal{F}_2 \subset \dots \subset \mathcal{F}$. Una successione $\{X_n\}$ di variabili casuali $X_n : \Omega \rightarrow \mathcal{A}$ è una *catena di Markov* rispetto alle σ -algebre \mathcal{F}_n se X_n è \mathcal{F}_n -misurabile per ogni n e vale la proprietà di Markov:

$$P[X_n \in A \mid \mathcal{F}_m] = P[X_n \in A \mid X_m] \quad (1.1)$$

qualunque sia $n \geq m$ e $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$. Quando non viene specificata la successione di σ -algebre $\{\mathcal{F}_n\}$, si intende per \mathcal{F}_n la σ -algebra generata dai cammini fino all'istante n :

$$\mathcal{F}_n = \sigma(\{X_0, X_1, \dots, X_n\}) \equiv \mathcal{F}_n^X$$

Notiamo che qualunque altra scelta deve essere tale che $\mathcal{F}_n^X \subset \mathcal{F}_n$.

Nella situazione in cui le X_n assumono valori in uno spazio numerabile \mathcal{A} , parliamo di *catene di Markov discrete* (ovvero, su spazio discreto). La funzione:

$$p_0(\alpha) = P[X_0 = \alpha] ; \alpha \in \mathcal{A}$$

è una misura di probabilità su \mathcal{A} e viene indicata come *distribuzione (o stato) iniziale*. La successione di funzioni:

$$p_k(\alpha, \beta) = P[X_k = \alpha \mid X_{k-1} = \beta] ; \alpha, \beta \in \mathcal{A}$$

sono, per ogni β fissato, distribuzioni di probabilità su \mathcal{A} note come *probabilità di transizione* al tempo k .

Diremo che una catena di Markov $\{X_n\}$ è *omogenea* se le probabilità $P[X_{n+1} \in A \mid X_n]$ sono indipendenti da n qualunque sia $A \in \mathcal{F}$. Per catene discrete ciò equivale a chiedere che le probabilità di transizione $p_k(\cdot, \cdot)$ siano indipendenti dal tempo:

$$p_k(\alpha, \beta) = p(\alpha, \beta) ; k = 1, 2, \dots$$

Da ora in poi, qualora non sia specificato altrimenti, considereremo sempre catene di Markov discrete omogenee.

La coppia (p_0, p) , dove p_0 è lo stato iniziale e p la matrice delle probabilità di transizione, determina completamente le proprietà probabilistiche della catena di Markov $\{X_n\}$. Infatti ogni probabilità finito dimensionale è espressa in termini di p_0 e p :

$$P[(X_0, \dots, X_n) \in A] = \sum_{(\alpha_0, \dots, \alpha_n) \in \mathcal{A}} \mathbb{1}_A(\alpha_0, \dots, \alpha_n) p_0(\alpha_0) p(\alpha_0, \alpha_1) \dots p(\alpha_{n-1}, \alpha_n)$$

qualunque sia $A \in \mathcal{A}^n$. Nel caso di spazio \mathcal{A} non numerabile basta sostituire alla matrice $p(\alpha, \beta)$ la funzione di transizione $P(\alpha, B) = P[X_{n+1} \in B \mid X_n = \alpha]$;

risulta quindi

$$P[(X_0, \dots, X_n) \in A] = \int_{\mathcal{A}} p_0(d\alpha_0) \int_{\mathcal{A}} P(\alpha_0, d\alpha_1) \dots \int_{\mathcal{A}} P(\alpha_{n-1}, d\alpha_n) \mathbb{1}_A(\alpha_0, \dots, \alpha_n)$$

La matrice delle probabilità di transizione $p(\alpha, \beta)$ è una *matrice stocastica*, cioè con elementi non negativi:

$$p(\alpha, \beta) \geq 0$$

e normalizzata per righe:

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}} p(\alpha, \beta) = 1$$

È facile verificare che una matrice stocastica P verifica le seguenti proprietà:

1. trasforma vettori ad elementi non negativi e in vettori non negativi e vettori ad elementi positivi in vettori ad elementi positivi:

$$\text{se } f_\alpha \geq 0 \forall \alpha \Rightarrow (Pf)_\alpha \geq 0$$

$$\text{se } f_\alpha > 0 \forall \alpha \Rightarrow (Pf)_\alpha > 0$$

2. lascia immutato il vettore identico $\mathbb{1} = (1, 1, \dots, 1)$:

$$(P\mathbb{1}) = \mathbb{1}$$

3. trasforma a sinistra distribuzioni di probabilità in distribuzioni di probabilità:

$$\text{se } \sum_{\alpha} \mu(\alpha) = 1 \Rightarrow \sum_{\alpha} (\mu P)(\alpha) = 1$$

4. la composizione di matrici stocastiche è ancora una matrice stocastica; in particolare, se P_1 e P_2 sono matrici stocastiche e P_2 ha elementi non nulli, allora $P_3 = P_1 P_2$ è una matrice stocastica ed ha elementi non nulli.

È chiaro che se $\{X_n\}$ è una catena di Markov omogenea con probabilità di transizione $p(\alpha, \beta)$, allora la potenza k -sima della matrice stocastica P dà le probabilità di transizione in k passi:

$$(p^k)(\alpha, \beta) = P[X_{n+k} = \beta \mid X_n = \alpha]$$

Una forma equivalente della proprietà di Markov (1.1) è espressa dall'*equazione di Chapman-Kolmogorov*:

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}} P[X_{n_1+n_2} = \gamma \mid X_{n_1} = \beta] P[X_{n_1} = \beta \mid X_0 = \alpha] = P[X_{n_1+n_2} = \alpha \mid X_0 = \gamma] \quad (1.2)$$

che, nel caso delle catene di Markov omogenee, si riduce all'identità matriciale:

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}} (p^{n_1})(\alpha, \beta)(p^{n_2})(\beta, \gamma) = (p^{n_1+n_2})(\alpha, \gamma)$$

Una delle caratteristiche più interessanti delle catene di Markov è l'esistenza di un'unica misura invariante e stabile a seguito di un'ipotesi di non degenerazione sulla dinamica. Su spazio finito vale il seguente:

Teorema 1 (ergodico per le catene di Markov finite). *Sia $P_{\alpha,\beta}$ una matrice stocastica $N \times N$ che verifica l'ipotesi di non degenerazione:*

$$\exists n_0 : (P^{n_0})_{\alpha,\beta} > 0 \quad \forall \alpha, \beta = 1, \dots, N$$

Allora esiste un'unica misura di probabilità $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_N)$ tale che:

1. è definita positiva e ben normalizzata:

$$\pi_\alpha > 0 ; \quad \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} \pi_\alpha = 1$$

2. è limite delle probabilità di transizione per numero di passi infinito:

$$\pi_\alpha = \lim_{n \rightarrow \infty} (P^n)_{\beta,\alpha} \quad \forall \beta = 1, \dots, N$$

3. è una misura invariante:

$$\sum_{\alpha \in \mathcal{A}} \pi_\alpha P_{\alpha,\beta} = \pi_\beta$$

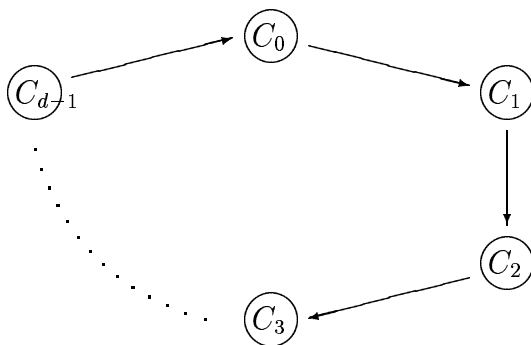
L'ipotesi di non degenerazione ci assicura che con un numero finito di passi n_0 è possibile passare da un qualunque punto ad un qualunque altro dello spazio Ω . Quando si passa a catene di Markov su spazio degli stati numerabile bisogna rafforzare le ipotesi per ottenere l'ergodicità. Diremo che uno stato α è *inessenziale* se esistono uno stato β ed un intero n tali che:

$$(p^n)(\alpha, \beta) > 0 ; \quad (p^k)(\beta, \alpha) = 0 \quad \forall k \in \mathbb{N}$$

Tutti gli altri stati sono detti *essenziali*. Gli stati inessenziali sono definiti in modo tale che con una probabilità finita si può passare in uno stato da cui non è più possibile tornare indietro; sono quindi stati transienti. La prima richiesta è che ci siano solo stati essenziali. Se α e β sono due stati essenziali diremo che sono *comunicanti*, e ciò viene indicato con $\alpha \leftrightarrow \beta$, se è possibile passare da α a β e viceversa con un umero finito di passi:

$$\exists n_1, n_2 : (p^{n_1})(\alpha, \beta) > 0 ; (p^{n_2})(\beta, \alpha) > 0$$

La relazione di comunicabilità è una relazione di equivalenza nello spazio degli stati essenziali, dunque partisce tale spazio in classi di equivalenza dette *classi indecomponibili* di stati comunicanti. La seconda richiesta necessaria per avere ergodicità è che ci sia un'unica classe indecomponibile. Tuttavia la presenza di più classi indecomponibili non dà fastidio poiché possono essere considerate come catene di Markov separate (non c'è comunicabilità tra di esse). Più classi indecomponibili si hanno ad esempio quando ci sono delle costanti del moto; infatti ad ogni scelta delle costanti del moto corrisponde una differente classe indecomponibile e quindi un diverso stato stazionario (concentrato in tale classe). All'interno di una classe indecomponibile si possono inoltre individuare delle *sottoclassi cicliche*. Dato lo stato α definiamo il *periodo* di tale stato come il massimo comune denominatore della collezione di tutti gli interi n tali che $(p^n)(\alpha, \alpha) > 0$. Si può dimostrare che all'interno di una classe indecomponibile tutti gli stati sono caratterizzati dallo stesso periodo d (che è quindi una caratteristica della classe) e, se $d > 1$, si possono individuare nella classe d *sottoclassi cicliche* C_0, C_1, \dots, C_{d-1} tali che in un passo si può passare solo da uno stato di C_k ad uno stato di C_{k+1} con k intero modulo d . Dunque la presenza di un periodo positivo ($d > 1$) introduce una ciclicità nella dinamica del sistema schematizzabile così:



Tale ciclicità impedisce l'esistenza dei limiti $(p^n)(\alpha, \beta)$ per $n \rightarrow \infty$; infatti

se $\alpha \in C_p$ e $\beta \in C_q$ allora $(p^n)(\alpha, \beta)$ può essere positivo solo se $n = q - p \pmod d$. Per avere ergodicità è quindi necessario fare richiesta di *aperiodicità*: $d = 1$. Queste richieste, di assenza di stati inessenziali e di presenza di un'unica classe indecomponibile ed aperiodica, corrispondono all'ipotesi di non degenerazione formulata nel teorema ergodico per catene di Markov su spazio finito. Nella situazione di spazio degli stati numerabile è necessario fare ulteriori richieste che impediscano alla dinamica di allontanarsi all'infinito. Dato lo stato α indichiamo con $f_{\alpha\alpha}^k$ la probabilità che, partendo da α , si torni in α per la prima volta dopo k passi

$$f_{\alpha\alpha}^k = P[X_k = \alpha, X_l \neq \alpha \ 1 \leq l \leq k-1 \mid X_0 = \alpha]$$

La prima richiesta che si fa è che gli stati siano *ricorrenti*:

$$\sum_{k=0}^{\infty} f_{\alpha\alpha}^k = 1$$

che corrisponde a chiedere che, partendo da α , prima o poi ci si torna. Bisogna inoltre chiedere che il tempo medio di ricorrenza sia finito:

$$\sum_{k=0}^{\infty} k f_{\alpha\alpha}^k < \infty$$

Si può dimostrare che vale il seguente

Teorema 2 (ergodico per catene di Markov su spazio discreto). *Sia $\{X_n\}$ una catena di Markov su spazio numerabile \mathcal{A} con matrice delle probabilità di transizione $p(\alpha, \beta)$. Supponiamo che lo spazio degli stati sia formato esclusivamente da una classe indecomponibile ed aperiodica di stati essenziali, comunicanti, ricorrenti e con tempo medio di ricorrenza finito. Allora la catena di Markov è ergodica, cioè valgono le proprietà 1, 2 e 3 del teorema 1.*

1.2 Catene di Markov a tempo continuo

Vogliamo ora generalizzare la definizione di catene di Markov omogenee per tempi continui; in questo caso l'intervallo temporale Δt che intercorre tra due salti $X_n \rightarrow X_{n+1}$ non è più un tempo discretizzato e fissato, ma una variabile casuale con legge di distribuzione che decade esponenzialmente con tasso di decadimento dipendente solo dallo stato precedente al salto.

Al solito indichiamo con $\mathcal{A} = \{\alpha, \beta, \dots\}$ lo spazio numerabile delle configurazioni del sistema. Questa volta come spazio degli eventi elementari prendiamo:

$$\Omega = (\mathcal{A} \times [0, \infty))^{\mathbb{N}};$$

cioè ogni evento elementare è una successione del tipo:

$$\omega = \{(\alpha_1, \tau_1), (\alpha_2, \tau_2), \dots\}$$

in cui è specificata la configurazione α_k dopo k salti, e l'intervallo di tempo τ_k che intercorre tra il k -simo ed il $(k+1)$ -simo salto.

Vogliamo definire in Ω una σ -algebra \mathcal{F} ed una misura di probabilità P in modo che lo spazio

$$(\Omega, \mathcal{F}, P)$$

sia uno spazio di probabilità ben definito. A tale scopo introduciamo le successioni di variabili casuali $\{X_n : \Omega \rightarrow \mathcal{A} ; n = 1, \dots\}$ e $\{\Delta t_n : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_+ ; n = 1, \dots\}$ tali che:

$$X_n(\omega) = \alpha_n \quad \text{e} \quad \Delta t_n(\omega) = \tau_n$$

Come σ -algebra \mathcal{F} prendiamo la σ -algebra da loro generata:

$$\mathcal{F} = \sigma(\{(X_1, \Delta t_1), (X_2, \Delta t_2), \dots\})$$

Per definire la misura di probabilità P richiediamo che $\{X_n\}$ sia una catena di Markov omogenea a tempo discreto con distribuzione iniziale $\mu(\cdot)$ e matrice delle probabilità di transizione $p(\cdot, \cdot)$:

$$P[X_0 = \alpha] = \mu(\alpha)$$

$$P[X_{k+1} = \beta \mid X_k = \alpha] = p(\alpha, \beta)$$

Chiediamo poi che, se sono note le configurazioni $X_n = \alpha_n$ ad ogni salto, allora le variabili Δt_n sono indipendenti e distribuite secondo una legge di decadimento esponenziale con tasso di decadimento definito dalla funzione $\lambda(\cdot) : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}_+$:

$$P[\Delta t_n \in I \mid X_n = \alpha] = \int_I ds \lambda(\alpha) e^{-\lambda(\alpha)s}$$

Un primo risultato interessante (cf. [1, cap1]) è la:

Proposizione 1. *La successione di variabili casuali $\{X_n, T_n = \sum_{k=0}^{n-1} \tau_k\}$ è una catena di Markov nello spazio di probabilità (Ω, \mathcal{F}, P) (è uno spazio non numerabile); le probabilità di transizione sono*

$$\begin{aligned} P[X_{n+1} = \beta, t \leq T_{n+1} \leq t + dt \mid X_n = \alpha, T_n = s] = \\ = p(\alpha, \beta) \lambda(\alpha) e^{-\lambda(\alpha)(t-s)} \mathbb{1}_{\{t \geq s\}} dt \end{aligned} \quad (1.3)$$

Dim. Il fatto che valga la proprietà di Markov è conseguenza del fatto che: $\{X_n\}$ è essa stessa una catena di Markov; inoltre τ_{n+1} , dato X_n , è indipendente da tutte le altre variabili $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$, quindi, se sono fissati X_n e T_n , la variabile $T_{n+1} = T_n + \tau_{n+1}$ non dipende dal cammino fino al passo n . L' espressione per le probabilità di transizione si ricava direttamente dalla definizione:

$$P[X_{n+1} = \beta, t \leq T_{n+1} \leq t + dt \mid X_n = \alpha, T_n = s] =$$

$$= P[X_{n+1} = \beta, t - s \leq \tau_{n+1} \leq t - s + dt \mid X_n = \alpha, T_n = s] =$$

dato X_n , sia X_{n+1} che τ_{n+1} sono indipendenti da T_n

$$= P[X_{n+1} = \beta, t - s \leq \tau_{n+1} \leq t - s + dt \mid X_n = \alpha] =$$

per definizione di probabilità condizionale

$$= P[t - s \leq \tau_{n+1} \leq t - s + dt \mid X_n = \alpha, X_{n+1} = \beta] P[X_{n+1} = \beta \mid X_n = \alpha] =$$

nel primo fattore τ_{n+1} è indipendente da X_{n+1}

$$= P[\tau_{n+1} \in (t - s, t - s + dt) \mid X_n = \alpha] P[X_{n+1} = \beta \mid X_n = \alpha]$$

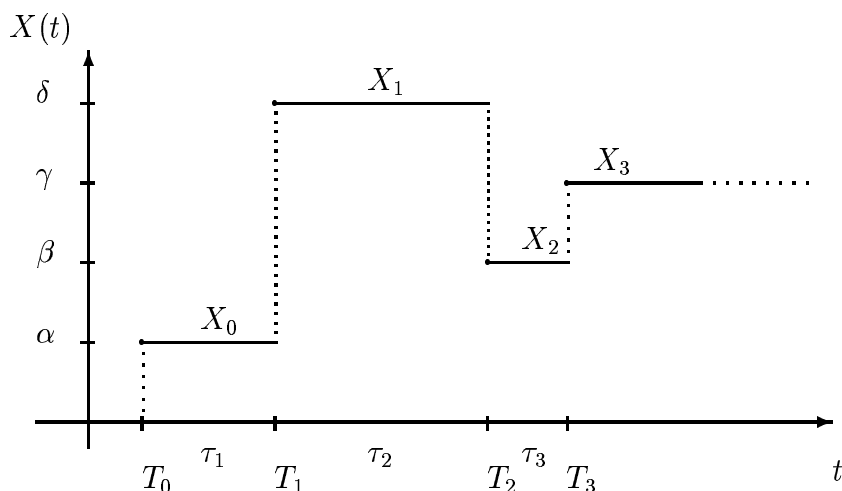
da cui si ottiene la formula (1.3) da dimostrare.

□

Definizione A questo punto possiamo definire la *catena di Markov a tempo continuo* $\{X(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ come il processo stocastico che specifica ad ogni istante di tempo t qual è la configurazione del sistema:

$$X(t, \omega) = X_n(\omega) \quad \text{se} \quad T_{n-1}(\omega) \leq t < T_n(\omega)$$

Questo significa che il processo $X(t)$ visita successivamente i siti occupati dalla catena di Markov discreta $\{X_n\}$, soffermandosi in ciascun sito per un tempo τ_n .



Il processo $\{X(t)\}$ è una catena di Markov omogenea a tempi continui, nel senso che verifica le seguenti proprietà:

1. omogeneità temporale:

$$P[X_{s+t} = \alpha | X_t] = P[X_s = \alpha | X_0] \quad (1.4)$$

2. proprietà di Markov:

$$P[X_{s+t} = \alpha | \sigma(\{X_r ; r \leq t\})] = P[X_{s+t} = \alpha | X_t] \quad (1.5)$$

Tale catena di Markov è definita sullo spazio dei cammini $D([0, \infty) \times \mathcal{A})$, cioè delle funzioni continue a sinistra di variabile reale positiva ed a valori in \mathcal{A} . Non chiediamo la continuità poiché abbiamo a che fare con una dinamica a salti.

1.3 Generatore, equazioni di Kolmogorov

Alla catena di Markov $\{X(t)\}$ definita dalla terna (μ_0, p, λ) si associa in modo unico il semigruppoo $\{P_t(\cdot, \cdot) : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}_+ ; t \in \mathbb{R}_+\}$ delle probabilità di transizione nell'intervallo temporale t :

$$P_t(\alpha, \beta) = P[X_{s+t} = \beta | X_s = \alpha] \quad (1.6)$$

A partire dalla proprietà di Markov si verifica facilmente che vale la proprietà di semigruppoo (o equazione di Chapman-Kolmogorov):

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}} P_t(\alpha, \beta) P_s(\beta, \gamma) = P_{s+t}(\alpha, \gamma)$$

ovvero:

$$P_t \circ P_s = P_{t+s} \quad (1.7)$$

essendo \circ il prodotto di convoluzione tra operatori.

Il generatore della dinamica $L(\cdot, \cdot) : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ è definito da:

$$L(\alpha, \beta) = \lambda(\alpha)p(\alpha, \beta) - \lambda(\alpha)\delta_{\alpha,\beta} \quad (1.8)$$

essendo $\delta_{\alpha,\beta}$ la funzione delta di Kronecker. È facile verificare che il generatore soddisfa le proprietà:

$$\begin{aligned} \sum_{\beta \in \mathcal{A}} L(\alpha, \beta) &= 0 \\ L(\alpha, \beta) &\geq 0 \\ L(\alpha, \alpha) &< 0 \end{aligned} \quad (1.9)$$

In realtà si può far vedere che un qualunque operatore che soddisfa tali proprietà definisce senza ambiguità il corrispondente processo di Markov $\{X(t)\}$.

Il semigruppoo $\{P_t\}$ ed il generatore L possono essere visti sia come operatori *a destra* sullo spazio $\mathcal{C}(\mathcal{A})$ delle funzioni definite in \mathcal{A} :

$$\begin{aligned} (P_t f)(\alpha) &= \sum_{\beta \in \mathcal{A}} P_t(\alpha, \beta) f(\beta) \equiv E[f(X(t)) | X(0) = \alpha] \\ (L f)(\alpha) &= \sum_{\beta \in \mathcal{A}} L(\alpha, \beta) f(\beta) \end{aligned}$$

sia come operatori *a sinistra* sullo spazio $\mathcal{M}_1(\mathcal{A})$ delle misure di probabilità su \mathcal{A} :

$$\begin{aligned} (\mu P_t)(\alpha) &= \sum_{\beta \in \mathcal{A}} \mu(\beta) P_t(\beta, \alpha) \\ (\mu L)(\alpha) &= \sum_{\beta \in \mathcal{A}} \mu(\beta) L(\beta, \alpha) \end{aligned}$$

Notiamo che P_t trasforma lo spazio $\mathcal{M}_1(\mathcal{A})$ in sé: $\sum_{\alpha} (\mu P_t)(\alpha) = 1$. Invece il generatore L trasforma una distribuzione di probabilità normalizzata in una funzione a media nulla: $\sum_{\alpha} (\mu L)(\alpha) = 0$.

Tra il semigruppoo $\{X(t)\}$ ed il generatore L c'è una relazione definita dalla:

Proposizione 2. *valgono le equazioni di Kolmogorov:*

$$(\partial_t P_t)(\alpha, \beta) = (LP_t)(\alpha, \beta) \quad (1.10)$$

$$(\partial_t P_t)(\alpha, \beta) = (P_t L)(\alpha, \beta) \quad (1.11)$$

Ciò vuol dire che il semigruppoo $\{P_t\}$ è espresso dalla relazione:

$$P_t(\alpha, \beta) = (e^{Lt})(\alpha, \beta)$$

(Questa relazione spiega il nome dato all'operatore L, di generatore della dinamica)

Dim. Noi non daremo una dimostrazione rigorosa delle equazioni di Chapman-Kolmogorov (che si può trovare in [1]), ma cerchiamo piuttosto una valida giustificazione. Partiamo da:

$$\frac{d}{dt}P_t(\alpha, \beta) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} [P_{t+\Delta t}(\alpha, \beta) - P_t(\alpha, \beta)] =$$

usando la proprietà di semigruppoo (1.7):

$$\begin{aligned} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\sum_{\gamma \in \mathcal{A}} P_t(\alpha, \gamma) P_{\Delta t}(\gamma, \beta) - P_t(\alpha, \beta) \right] = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \sum_{\gamma \in \mathcal{A}} P_t(\alpha, \gamma) [P_{\Delta t}(\gamma, \beta) - \delta_{\beta, \gamma}] \end{aligned} \quad (1.12)$$

usiamo ora il significato fisico del semigruppoo $\{P_t\}$. $P_{\Delta t}(\gamma, \beta)$ è la probabilità che il sistema, partendo dalla configurazione γ all'istante 0, arrivi nella configurazione β all'istante Δt ; e, poiché l'intervallo Δt è piccolo (al limite tende a zero), possiamo immaginare che il sistema possa fare al più un salto (Si può far vedere infatti che le situazioni con due o più salti risultano trascurabili nel limite). Consideriamo quindi:

- se $\gamma = \beta$, solo la situazione in cui il sistema resta nella configurazione β per tutto l'intervallo Δt ; ciò avviene con probabilità:

$$\delta_{\beta, \gamma} \int_{\Delta t}^{\infty} \lambda(\beta) e^{-\lambda(\beta)s} ds \simeq \delta_{\beta, \gamma} (1 - \lambda(\beta)\Delta t)$$

- se $\gamma \neq \beta$, solo la situazione in cui il sistema salta una sola volta da γ a β ; e ciò avviene con probabilità:

$$p(\gamma, \beta) \int_0^{\Delta t} \lambda(\gamma) e^{-\lambda(\gamma)s} ds \simeq p(\gamma, \beta) \lambda(\gamma) \Delta t$$

In base a queste considerazioni risulta:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Delta t} \sum_{\gamma \in \mathcal{A}} P_t(\alpha, \gamma) [P_{\Delta t}(\gamma, \beta) - \delta_{\gamma, \beta}] \simeq \\
& \simeq \frac{1}{\Delta t} \sum_{\gamma \in \mathcal{A}} P_t(\alpha, \gamma) [\delta_{\gamma, \beta}(1 - \lambda(\beta)\Delta t) + \lambda(\gamma)p(\gamma, \beta)\Delta t - \delta_{\gamma, \beta}] = \\
& = \sum_{\gamma \in \mathcal{A}} P_t(\alpha, \gamma)L(\gamma, \beta) = (P_t L)(\alpha, \beta)
\end{aligned}$$

Sostituendo nella (1.12) otteniamo una delle due equazioni di Kolmogorov. Con un ragionamento analogo si ottiene anche l'altra.

□

1.4 Misure invarianti, processo aggiunto

Per come è definito il semigruppoo $\{P_t\}$ risulta chiaro che, se μ_0 è lo stato iniziale del sistema, cioè la distribuzione di probabilità sullo spazio delle configurazioni \mathcal{A} all'istante $t = 0$, allora lo stato μ_t all'istante t è definito da:

$$\mu_t(\alpha) = \sum_{\beta \in \mathcal{A}} \mu_0(\beta)P_t(\beta, \alpha) = (\mu_0 P_t)(\alpha)$$

Come per le catene di Markov a tempo discreto, possiamo cercare per i processi a tempo continuo gli stati stazionari. Cerchiamo cioè le distribuzioni di probabilità $\pi(\cdot)$ invarianti sotto la dinamica:

$$(\pi P_t)(\alpha) = \pi(\alpha), \forall t > 0$$

È facile capire, a partire dalle equazioni di Kolmogorov (1.10) e (1.11), che ciò è possibile se e solo se è soddisfatta l'equazione di stazionarietà:

$$(\pi L)(\alpha) = 0, \forall \alpha \tag{1.13}$$

Per quanto riguarda l'esistenza e unicità della misura invariante esiste un teorema che ci permette di estendere il teorema ergodico per le catene di Markov discrete a processi a tempo continuo:

Proposizione 3. *La misura $\pi(\cdot)$ è invariante per la catena di Markov a tempo continuo $\{X(t)\}$ se e solo se $\pi^*(\cdot)$ definita da:*

$$\pi^*(\alpha) = \frac{\pi(\alpha)\lambda(\alpha)}{\sum_{\beta} \pi(\beta)\lambda(\beta)}$$

è una misura invariante per la corrispondente catena di Markov a tempo discreto $\{X_n\}$ con matrice delle probabilità di transizione $p(\cdot, \cdot)$.

In formule:

$$(\pi L) = 0 \iff \sum_{\beta} \pi^*(\beta) p(\beta, \alpha) = \pi^*(\alpha)$$

Dim. La verifica di tale proposizione si fa in modo diretto ed è immediata:

$$\begin{aligned} & (\pi L)(\alpha) = 0 ; \forall \alpha \in \mathcal{A} \iff \\ & \iff \sum_{\beta \in \mathcal{A}} \pi(\beta) \lambda(\beta) p(\beta, \alpha) = \pi(\alpha) \lambda(\alpha) ; \forall \alpha \in \mathcal{A} \iff \end{aligned}$$

dividendo entrambi i membri per $\sum_{\gamma} \pi(\gamma) \lambda(\gamma)$

$$\iff \sum_{\beta \in \mathcal{A}} \pi^*(\beta) p(\beta, \alpha) = \pi^*(\alpha)$$

che è proprio la tesi. □

Abbiamo visto nei teoremi 1 e 2 del primo paragrafo quali sono le ipotesi sufficienti affinché la catena di Markov $\{X_n\}$ con matrice delle probabilità di transizione $p(\alpha, \beta)$ sia ergodica, ovvero abbia un unico stato invariante ed asintotico. In virtù di questa proposizione le stesse ipotesi fatte sulla matrice $p(\alpha, \beta)$ garantiscono esistenza ed unicità dello stato stazionario anche per le catene di Markov a tempo continuo $\{X(t)\}$, qualunque siano i tassi di decadimento $\lambda(\alpha)$.

bilancio dettagliato

Dalla equazione di stazionarietà (1.13) e dalla definizione (1.8) del generatore L , risulta che π è uno stato stazionario se verifica:

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}} \{ \pi(\beta) \lambda(\beta) p(\beta, \alpha) - \pi(\alpha) \lambda(\alpha) p(\alpha, \beta) \} = 0$$

Cerchiamo di capire il significato fisico di tale relazione. $\lambda(\alpha) p(\alpha, \beta)$ è il tasso di transizione del sistema in direzione $\alpha \rightarrow \beta$, cioè la frequenza media con cui il sistema, inizialmente in configurazione α , passa nella configurazione β . Poiché $\pi(\alpha)$ è la probabilità con cui il sistema si trova in configurazione α , possiamo interpretare:

$$j_{\pi}(\alpha, \beta) = \pi(\alpha) \lambda(\alpha) p(\alpha, \beta) - \pi(\beta) \lambda(\beta) p(\beta, \alpha)$$

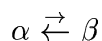
come la *corrente* algebrica media (rispetto allo stato π) del sistema tra le configurazioni $\alpha \rightarrow \beta$.

La condizione di stazionarietà (1.13) assume dunque la forma

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}} J_{\pi}(\alpha, \beta) = 0 ; \forall \alpha \in \mathcal{A}$$

ed affinché sia verificata sono possibili diverse situazioni.

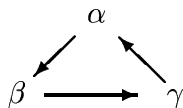
La situazione più semplice è quella in cui per ogni coppia di stati α e β la corrente $J_{\pi}(\alpha, \beta)$ è nulla. In questo caso, se il sistema si trova nello stato π , in media passa da α a β con la stessa frequenza con cui passa da β ad α secondo lo schema:



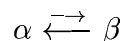
Ciò è possibile se e solo se è verificata la condizione di *bilancio dettagliato*:

$$\pi(\alpha)\lambda(\alpha)p(\alpha, \beta) = \pi(\beta)\lambda(\beta)p(\beta, \alpha) \quad (1.14)$$

Tale terminologia è presa dalla chimica. Immaginiamo infatti un sistema chimico in cui le particelle possono presentarsi in diverse fasi o componenti α, β, \dots . La situazione stazionaria è quella in cui ogni singola fase ha concentrazione fissata nel tempo; tuttavia questo non impedisce che ci sia un flusso continuo di materia da una fase all' altra di tipo circolare



Per equilibrio chimico si intende invece una situazione in cui ogni singola reazione



è bilanciata; si parla perciò di bilancio dettagliato. Ci riferiremo agli stati che soddisfano la condizione di bilancio dettagliato come a stati di *equilibrio dettagliato* (o *microscopico*) oppure come a stati *reversibili*. Infatti la caratteristica fonamentale legata al bilancio dettagliato è quella di reversibilità della dinamica microscopica. Poiché per ogni coppia di stati α e β il flusso medio da α a β è nullo, risulta che la dinamica invertita nel tempo resta inalterata. La formulazione matematica di questa idea si ha con la definizione della dinamica aggiunta. Tutti gli stati che soddisfano la condizione di stazionarietà (1.13) ma non quella di bilancio dettagliato (1.14) saranno indicati come stati *stazionari non reversibili*

L'immagine della reazione chimica è per certi versi fuorviante. Il numero di componenti di un sistema chimico è finito e fissato; invece quando

si studiano sistemi di particelle interagenti si ha a che fare con un numero virtualmente infinito di siti reticolari. Per questo motivo le richieste che si fanno nella definizione di equilibrio sono differenti. Per considerare un gas all'equilibrio non è necessario che per ogni particella che passa da un sito x ad un sito vicino $x + dx$ ce ne sia una che passa nel verso opposto (situazione di bilancio dettagliato); la richiesta che si fa è che in ogni volume infinitesimo rispetto al volume totale, ma abbastanza grande rispetto alla distanza intermolecolare in modo da contenere un numero circa infinito di particelle, il numero totale di particelle resti in media inalterato e non ci sia flusso di particelle in una direzione privilegiata. Dunque tra gli stati stazionari non reversibili dovremo fare un'ulteriore distinzione a seconda se descrivono un sistema di *equilibrio* o *fuori dall'equilibrio*. Tale distinzione risulterà naturale quando daremo una modellizzazione probabilistica di sistemi di particelle interagenti.

generatore aggiunto

Data la misura di probabilità $\pi(\cdot)$ su \mathcal{A} , definiamo lo spazio di Hilbert $L_2(\pi)$ delle funzioni su \mathcal{A} a norma finita, con prodotto scalare:

$$\langle f, g \rangle_\pi = \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} \pi(\alpha) f(\alpha) g(\alpha)$$

Reinterpretando L e P_t come operatori a destra su $L_2(\pi)$, risulta interessante chiedersi come sono fatti gli operatori aggiunti L^* e P_t^* , definiti da:

$$\begin{aligned} \langle f, Lg \rangle_\pi &= \langle g, L^* f \rangle_\pi, \quad \forall f, g \in L_2(\pi) \\ \langle f, P_t g \rangle_\pi &= \langle g, P_t^* f \rangle_\pi, \quad \forall f, g \in L_2(\pi) \end{aligned}$$

La risposta a tale domanda è data dalla seguente:

Proposizione 4. *L'operatore L^* è un generatore (cioè verifica le tre proprietà (1.9)) se e solo se π è uno stato stazionario. In tal caso il semigrupp associato ad L^* è proprio $\{P_t^*\}$: $P_t^* = e^{L^* t}$; ed il processo di Markov aggiunto (di generatore L^*) è caratterizzato da probabilità di transizione:*

$$p^*(\alpha, \beta) = \frac{\lambda(\beta)\pi(\beta)p(\beta, \alpha)}{\lambda(\alpha)\pi(\alpha)}$$

e tassi di decadimento:

$$\lambda^*(\alpha) = \lambda(\alpha)$$

In particolare l'operatore L è autoaggiunto: $L = L^$, se e solo se è verificato il bilancio dettagliato.*

Dim. Consideriamo inizialmente il caso particolare in cui il generatore L è autoaggiunto; vogliamo verificare che ciò è possibile se e solo se è verificato il bilancio dettagliato. Dire che L è autoaggiunto equivale a dire che:

$$\langle f, Lg \rangle_\pi = \langle Lf, g \rangle_\pi, \quad \forall f, g$$

prendendo le due funzioni $f(\gamma) = \delta_{\alpha, \gamma}$ e $g(\gamma) = \delta_{\beta, \gamma}$ si ottiene

$$\pi(\alpha)L(\alpha, \beta) = \pi(\beta)L(\beta, \alpha), \quad \forall \alpha, \beta$$

che è proprio la condizione di bilancio dettagliato. Viceversa, se vale il bilancio dettagliato, fissate $f(\cdot)$ e $g(\cdot)$ risulta

$$\begin{aligned} \langle f, Lg \rangle_\pi &= \sum_{\alpha, \beta} \pi(\alpha)L(\alpha, \beta)f(\alpha)g(\beta) = \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \pi(\beta)L(\beta, \alpha)f(\alpha)g(\beta) = \langle g, Lf \rangle_\pi \end{aligned}$$

Passiamo a dimostrare la prima parte della proposizione. Cerchiamo una relazione che definisce l'operatore aggiunto L^* . Partiamo dalla definizione

$$\langle f, Lg \rangle_\pi = \langle L^*f, g \rangle_\pi, \quad \forall f, g$$

scegliendo f e g come prima si ottiene

$$\pi(\alpha)L^*(\alpha, \beta) = \pi(\beta)L(\beta, \alpha) \quad (1.15)$$

Vediamo in che condizioni L^* è un generatore, cioè verifica le proprietà (1.9). Dalla relazione (1.15) si vede subito che sono soddisfatte sempre le prime due proprietà di generatore:

$$L^*(\alpha, \alpha) < 0; \quad L^*(\alpha, \beta) \geq 0 \text{ se } \beta \neq \alpha$$

Dunque L^* è un generatore se e solo se risulta

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}} \pi(\beta)L(\beta, \alpha) = 0$$

che coincide proprio con l'equazione di stazionarietà per lo stato π .

Il fatto che il semigrupp aggiunto P_t^* coincide con e^{L^*t} si deduce dalla formula di Trotter-Kato:

$$P_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{t}{n}L \right)^n$$

cercando l'operatore aggiunto di ambo i membri.

Ci resta da trovare l'espressione esplicita delle probabilità di transizione p^* e dei tassi di decadimento λ^* del processo aggiunto. La relazione (1.15) si riscrive così:

$$\lambda^*(\alpha)[p^*(\alpha, \beta) - \delta_{\alpha, \beta}] = \frac{\pi(\beta)}{\pi(\alpha)}\lambda(\beta)[p(\beta, \alpha) - \delta_{\alpha, \beta}]$$

Ponendo $\alpha = \beta$ si ottiene

$$\lambda^*(\alpha) = \lambda(\alpha)$$

mentre dividendo ambo i membri per $\lambda(\alpha)$ si ha

$$\pi^*(\alpha, \beta) = \frac{\pi(\beta)\lambda(\beta)p(\beta, \alpha)}{\pi(\alpha)\lambda(\alpha)}$$

Ciò conclude la dimostrazione della proposizione. □

Il significato fisico del processo aggiunto è strettamente legato a quello di inversione temporale. Questo legame è espresso dalla seguente:

Proposizione 5. *Se $\{P_t\}$ è un semigruppoo con misura stazionaria π , e $\{P_t^*\}$ è il semigruppoo aggiunto, allora risulta:*

$$\begin{aligned} E_\pi [f_1(X(t_1)) \dots f_n(X(t_n))] &= \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} \pi(\alpha) f_k(\alpha) E_\alpha [f_{k+1}(X(t_{k+1} - t_k)) \dots \\ &\dots f_n(X(t_n - t_k))] E_\alpha^* [f_{k-1}(X(t_k - t_{k-1})) \dots f_1(X(t_k - t_1))] \end{aligned} \quad (1.16)$$

per ogni scelta delle funzioni $f_1 \dots f_n \in L_2(\mu)$ e dei tempi $t_1 < t_2 < \dots < t_n$; avendo indicato con E_α e E_α^* il valore atteso condizionato da $X(0) = \alpha$ rispettivamente per il processo diretto e per il processo aggiunto.

Dim. Fissiamo n , le funzioni $f_1, f_2, \dots, f_n \in L_2(\pi)$ ed i tempi $t_1 < t_2 < \dots < t_n$. Per definizione di valore atteso:

$$\begin{aligned} E_\pi [f_1(X(t_1)) \dots f_n(X(t_n))] &= \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathcal{A}} f_1(\alpha_1) \dots f_n(\alpha_n) P_\pi [X(t_1) = \alpha_1, \dots, X(t_n) = \alpha_n] \end{aligned} \quad (1.17)$$

P_π è la probabilità nello spazio dei cammini $D(\mathbb{R}_+ \times \mathcal{A})$ con stato iniziale π e dinamica definita dal generatore L . Se per stato iniziale prendiamo la

distribuzione $\mu(\alpha) = \delta_{\alpha, \alpha_0}$, chiamiamo $P_\mu = P_{\alpha_0}$. Con tale notazione il secondo membro della (1.17) si riscrive così:

$$\sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathcal{A}} f_1(\alpha_1) \dots f_n(\alpha_n) \sum_{\alpha_0} \pi(\alpha_0) P_{\alpha_0} [X(t_1) = \alpha_1, \dots, X(t_n) = \alpha_n] =$$

per come è definito il semigruppoo P_t

$$= \sum_{\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathcal{A}} f_1(\alpha_1) \dots f_n(\alpha_n) \pi(\alpha_0) P_{t_1}(\alpha_0, \alpha_1) P_{t_2 - t_1}(\alpha_1, \alpha_2) \dots P_{t_n - t_{n-1}}(\alpha_{n-1}, \alpha_n) \quad (1.18)$$

A questo punto utilizziamo la relazione:

$$\pi(\alpha_0) P_t(\alpha_0, \alpha_1) = \pi(\alpha_1) P_t^*(\alpha_1, \alpha_0)$$

che definisce il semigruppoo aggiunto P_t^* ; iterando k volte tale sostituzione nella relazione (1.18) risulta:

$$\begin{aligned} E_\pi[f_1(X(t_1)) \dots f_n(X(t_n))] &= \sum_{\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n} f_1(\alpha_1) \dots f_n(\alpha_n) p_{t_1}^*(\alpha_1, \alpha_0) P_{t_2 - t_1}^*(\alpha_2, \alpha_1) \dots \\ &\quad \dots P_{t_k - t_{k-1}}^*(\alpha_k, \alpha_{k-1}) \pi(\alpha_k) P_{t_{k+1} - t_k}(\alpha_k, \alpha_{k+1}) \dots P_{t_n - t_{n-1}}(\alpha_{n-1}, \alpha_n) = \\ &= \sum_{\alpha_k} \pi(\alpha_k) f_k(\alpha_k) \left[\sum_{\alpha_{k+1}, \dots, \alpha_n} f_{k+1}(\alpha_{k+1}) \dots f_n(\alpha_n) P_{t_{k+1} - t_k}(\alpha_k, \alpha_{k+1}) \dots P_{t_n - t_{n-1}}(\alpha_{n-1}, \alpha_n) \right] \\ &\quad \left[\sum_{\alpha_0, \dots, \alpha_{k-1}} f_{k-1}(\alpha_{k-1}) \dots f_1(\alpha_1) P_{t_k - t_{k-1}}^*(\alpha_k, \alpha_{k-1}) \dots P_{t_2 - t_1}^*(\alpha_2, \alpha_1) P_{t_1}^*(\alpha_1, \alpha_0) \right] = \\ &= \sum_{\alpha_k} \pi(\alpha_k) f_k(\alpha_k) E_{\alpha_k} [f_{k+1}(X(t_{k+1} - t_k)) \dots f_n(X(t_n - t_k))] \times \\ &\quad \times E_{\alpha_k}^* [f_{k-1}(X(t_k - t_{k-1})) \dots f_1(X(t_k - t_1))] \end{aligned}$$

che è proprio ciò che volevamo dimostrare. □

1.5 Processo di Markov non omogeneo

Fino ad ora abbiamo considerato catene di Markov omogenee. Vogliamo studiare la relazione tra catene di Markov omogenee e catene di Markov rese inomogenee dalla presenza di un campo esterno, poiché risulterà utile nello studio delle grandi deviazioni di sistemi di particelle interagenti.

Consideriamo un processo di Markov $\{X(t)\}$ di generatore della dinamica L :

$$(Lf)(\alpha) = \sum_{\beta} \lambda(\alpha)p(\alpha, \beta)[f(\beta) - f(\alpha)]$$

Indichiamo ora con:

$$F(\cdot, \cdot) : [0, T] \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}_+$$

una funzione regolare e limitata, e consideriamo il processo di Markov non omogeneo $\{X^F(t)\}$ con generatore L^F :

$$(L_t^F f)(\alpha) = \sum_{\beta \in \mathcal{A}} \lambda(\alpha)p(\alpha, \beta)e^{F(t, \beta) - F(t, \alpha)}[f(\beta) - f(\alpha)] \quad (1.19)$$

Nostro scopo è calcolare la derivata di Radom-Nikodim tra la probabilità P che definisce il processo omogeneo e la probabilità P^F che definisce il processo non omogeneo relativa ai cammini fino al tempo t ; il risultato che si ottiene è:

$$\frac{dP^F}{dP}(t) = \exp \left\{ F(t, X(t)) - F(0, X(0)) - \int_0^t ds e^{-F(s, X(s))} (\partial_s + L) e^{F(s, X(s))} \right\} \quad (1.20)$$

La verifica di tale espressione è tutt'altro che banale ed è presentata nei dettagli in AppendiceB.

Capitolo 2

Modelli di particelle interagenti

Il campo dei sistemi di particelle interagenti è nato come una branca della teoria della probabilità alla fine degli anni '60, a partire dai lavori di Spitzer [2] e [3]; da allora questa area è cresciuta rapidamente stabilendo connessioni inaspettate con altri campi.

La motivazione originale per questi studi venne dalla meccanica statistica. L'obiettivo era descrivere ed analizzare l'evoluzione temporale di modelli stocastici le cui misure di equilibrio sono le distribuzioni di Gibbs; si sperava così di arrivare ad una comprensione migliore delle transizioni di fase. In seguito divenne chiaro che modelli con una struttura matematica simile possono essere formulati in altri contesti: reti neurali, studio della crescita dei tumori, etc...

Da un punto di vista matematico i sistemi di particelle interagenti rappresentano una deviazione dalla teoria dei processi di Markov. Un tipico sistema di particelle interagenti consiste in un numero elevato di particelle che, in assenza di interazioni, evolverebbero secondo catene di Markov indipendenti su spazio finito; sovrapposto a ciò c'è un qualche tipo di interazione. Pertanto l'evoluzione di ogni singola particella non è più Markoviana, ma solo il sistema complessivo evolve secondo una dinamica di Markov.

Definiamo ora alcuni sistemi di particelle interagenti, introducendo lo spazio delle configurazioni e l'evoluzione dinamica su di esso; ci soffermeremo anche per ognuno di essi sull'esistenza di misure invarianti e di equilibrio.

2.1 Particelle libere

Un esempio banale di sistema di particelle interagenti è quello di assenza di interazioni in cui le evoluzioni dinamiche delle singole particelle sono random walk indipendenti.

Supponiamo che ogni particella possa trovarsi in qualsiasi sito di un reticolo finito T_N in \mathbb{R}^d . Per semplicità possiamo considerare lo spazio unidimensionale \mathbb{R} ed in esso una collezione di interi $\{0, 1, 2, \dots, N\}$ con condizioni di periodicità al bordo; cioè definiamo il reticolo come il toro unidimensionale di N punti: $T_N = \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$.

Per descrivere l'evoluzione del sistema cominciamo col distinguere tutte le particelle. Supponiamo che il numero di particelle totali all'istante iniziale $t = 0$ sia K e che questo resti inalterato ad ogni istante di tempo (sistema conservativo). Poiché non ci sono interazioni immaginiamo che tutte le particelle evolvono secondo catene di Markov sul toro T_N omogenee, a tempo continuo, invarianti per traslazioni ed indipendenti. Per dare una descrizione matematica, sia $p(\cdot, \cdot) : T_N \times T_N \rightarrow \mathbb{R}$ una matrice di probabilità di transizione sul toro T_N . Fissiamo l'attenzione su una singola particella (i-sima), ed indichiamo con $P_t(x, y)$ la probabilità che la particella si trovi in y all'istante t , sapendo che era partita in x a $t = 0$. Dalla teoria sulle catene di Markov sappiamo che $P_t(\cdot, \cdot)$ è la soluzione (unica) dell'equazione di Kolmogorov:

$$\begin{aligned} \partial_t P_t(x, y) &= \sum_{z \in T_N} p(x, z)[P_t(z, y) - P_t(x, y)] \\ P_0(x, y) &= \delta_{x, y} \end{aligned}$$

Il sistema complessivo sarà descritto da una collezione di K processi di Markov indipendenti ed uguali a quello appena descritto: $\{X_1(t), X_2(t), \dots, X_K(t)\}$

In presenza di interazioni una descrizione di questo tipo non è possibile poiché le particelle non sono indipendenti. E d'altro canto, poiché le particelle sono supposte indistinguibili, noi non siamo interessati tanto all'evoluzione di ogni singola particella, ma solo al variare del numero di particelle per ogni sito (punto di vista passivo). Diciamo cioè che una configurazione del sistema è fissata al tempo t quando conosciamo il numero di particelle $\eta_t(x)$ in ogni sito x del reticolo; secondo la descrizione precedente risulta: $\eta_t(x) = \sum_{i=1}^K \mathbb{1}_{\{X_i(t)=x\}}$. Dunque una configurazione del sistema è del tipo:

$$\eta = \{\eta(x) , x \in T_N\}$$

e lo spazio delle configurazioni sarà: $\mathcal{A} = \mathbb{N}^{T_N}$.

Vogliamo studiare l'evoluzione del processo $\{\eta_t , t \in \mathbb{R}_+\}$, che chiaramente è esso stesso un processo di Markov. Per stati del sistema prendiamo non solo le singole configurazioni ma tutte le possibili distribuzioni di probabilità su \mathcal{A} (in questo caso, fissare una configurazione η vuol dire prendere come stato la distribuzione di probabilità concentrata nel singolo punto η). Dato uno stato $\mu[\cdot]$ indichiamo, se non c'è possibilità di confusione, con $\mu[A]$ la probabilità del generico evento A e con $\mu[f]$ il valore aspettato della generica variabile casuale $f(\cdot)$.

2.2 Processi di interazione a contatto (zero range)

Una generalizzazione immediata si ha introducendo interazioni a contatto tra le particelle; si ottiene così il *processo zero range*.

Vogliamo descrivere un gas di particelle vincolate in una scatola cubica d -dimensionale di lato unitario. Nel modellizzare tale sistema consideriamo il volume discretizzato, con distanza $\frac{1}{N}$ tra siti primi vicini; inoltre per semplificare la descrizione matematica, imponiamo condizioni di periodicità al bordo. Dunque il reticolo su cui descriviamo il moto delle particelle è il toro d -dimensionale di N punti: $T_N^d = \{1, \dots, N\}^d$.

Fissiamo ora le probabilità di transizione sul reticolo. Ragioniamo inizialmente su tutto lo spazio \mathbb{Z}^d ; sia $p(\cdot, \cdot) : \mathbb{Z}^d \times \mathbb{Z}^d \rightarrow [0, 1]$ una probabilità di transizione su \mathbb{Z}^d normalizzata: $\sum_{y \in \mathbb{Z}^d} p(x, y) = 1$, invariante per traslazioni: $p(x+a, y+a) = p(x, y)$, $\forall a \in \mathbb{Z}^d$ ed a range finito: $p(x, y) = 0$ se $|y-x| > R$. Diremo allora che una partticezza salta dal sito x al sito $x+z$ del reticolo T_N^d con probabilità

$$p^N(z) = \sum_{y \in \mathbb{Z}^d} p(x, x+z+Ny)$$

Pur di prendere N sufficientemente grande, grazie alla condizione di range finito, risulta $p^N(z) = p(x, x+z) =: p(z)$ (purché x non sia in prossimità del bordo del reticolo).

Infine sia $g(\cdot) : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}_+$ una funzione monotona crescente: $g(k+1) \geq g(k)$, a variazione limitata: $\sup_{k \in \mathbb{N}} [g(k+1) - g(k)] = C < \infty$, e nulla in zero: $g(0) = 0$. Diciamo che, se ci sono k particelle in x , indipendentemente dal numero di particelle negli altri siti una particelle salta da x in y con tasso: $g(k)p(x, y)$. In questo modo è completamente definita la dinamica markoviana del sistema.

È abbastanza facile capire che per: $g(k) = k$, $\forall k$, il sistema si riduce a quello di particelle non interagenti; invece a seconda se la funzione $g(\cdot)$ cresce con una pendenza maggiore o minore di uno, abbiamo interazione repulsiva ed attrattiva rispettivamente.

In base a queste considerazioni possiamo costruire il generatore della dinamica del processo Ω_N . I soli salti possibili nella dinamica sono tra configurazioni η ed η' che differiscono per lo spostamento di un unica particella da un sito ad un altro. Data la configurazione η definiamo quindi la configurazione $\eta^{x,y}$ ottenuta da η spostando una particella da x in y :

$$\eta^{x,y}(z) = \begin{cases} \eta(x) - 1 & \text{se } z = x \\ \eta(y) + 1 & \text{se } z = y \\ \eta(z) & \text{se } z \neq x, y \end{cases}$$

Il generatore della dinamica risulta definito da:

$$(\Omega_L f)(\eta) = \sum_{x,y \in T_N^d} p(x,y) g(\eta(x)) [f(\eta^{x,y}) - f(\eta)] \quad (2.1)$$

È interessante cercare le misure invarianti del processo; a tale richiesta risponde la seguente:

Proposizione 6. *Definiamo la funzione di partizione:*

$$\mathcal{Z}(\varphi) = \sum_{k \in \mathbb{N}} \frac{\varphi^k}{g(k)!} \quad (2.2)$$

avendo indicato: $g(k)! = \prod_{j=1}^k g(j)$; sia φ^* il raggio di convergenza della serie. Per ogni $\varphi < \varphi^*$ esiste una misura invariante $\bar{\nu}_\varphi$ tale che sotto $\bar{\nu}_\varphi$ le variabili $\{\eta(x), x \in T_N^d\}$ sono indipendenti (è una misura prodotto) e per ogni sito x fissato, la distribuzione di $\eta(x)$ è:

$$\bar{\nu}_\varphi[\eta(x) = k] = \frac{\varphi^k}{g(k)! \mathcal{Z}(\varphi)} \quad (2.3)$$

(per $g(k) = k$ si riduce alla distribuzione di Poisson). Il processo aggiunto Ω_N^* si ottiene semplicemente sostituendo le probabilità di transizione $p(\cdot, \cdot)$ con quelle che si ottengono per parità: $p^*(x, x+z) = p(x, x-z)$. Dunque gli stati $\bar{\nu}_\varphi$ verificano il bilancio dettagliato se e solo se la distribuzione di probabilità di transizione è simmetrica: $p(z) = p(-z)$.

Dim. Da quanto visto nel capitolo 1 sappiamo che uno stato $\nu[\cdot]$ è stazionario se e solo se l'operatore aggiunto Ω_N^* è un generatore (cioè verifica le proprietà (1.9)); inoltre $\nu[\cdot]$ verifica il bilancio dettagliato se e solo se il generatore Ω_N è autoaggiunto. Dunque per verificare la Proposizione 7 basta analizzare l'operatore aggiunto Ω_N^* rispetto allo stato $\bar{\nu}_\varphi$ definito dalla (2.3).

$$\langle h, \Omega_N^* f \rangle_{\bar{\nu}_\varphi} = \langle f, \Omega_N h \rangle_{\bar{\nu}_\varphi}$$

Questo è vero per definizione di operatore aggiunto qualunque siano f e h funzioni cilindriche in \mathcal{A} . Usando la forma esplicita del generatore Ω_N e della misura $\bar{\nu}_\varphi$ si ottiene:

$$\begin{aligned} \langle h, \Omega_N^* f \rangle_{\bar{\nu}_\varphi} &= \sum_{\eta \in \mathcal{A}} \sum_{x,z \in T_N^d} \bar{\nu}_\varphi[\eta] f(\eta) p(z) g(\eta(x)) [h(\eta^{x,x+z}) - h(\eta)] = \\ &= \sum_{\zeta \in \mathcal{A}} \sum_{x,z \in T_N^d} p(z) \bar{\nu}_\varphi[\zeta] g(\zeta(x+z)) h(\zeta) f(\zeta^{x+z,x}) + \end{aligned}$$

$$- \sum_{\zeta \in \mathcal{A}} \sum_{x, z \in T_N^d} p(z) \bar{\nu}_\varphi[\zeta] g(\zeta(x)) h(\zeta) f(\zeta)$$

Abbiamo sostituito nel primo termine $\zeta = \eta^{x, x+z}$ e nel secondo termine $\zeta = \eta$. Ridefiniamo anche i siti reticolari; nel primo termine sostituiamo: $y = x + z$, $w = -z$ e nel secondo termine: $y = x$, $w = -z$. Risulta quindi:

$$\langle h, \Omega_N^* f \rangle_{\bar{\nu}_\varphi} = \sum_{\zeta \in \mathcal{A}} \bar{\nu}_\varphi[\zeta] h(\zeta) \left\{ \sum_{y, w \in T_N^d} p(-w) g(\zeta(y)) [f(\zeta^{y, y+w}) - f(\zeta)] \right\}$$

Possiamo dunque concludere che l'operatore aggiunto Ω_N^* è dato da

$$(\Omega_N^* f)(\eta) = \sum_{x, z \in T_N^d} p(-z) g(\eta(x)) [f(\eta^{x, x+z}) - f(\eta)]$$

cioè è un generatore (dunque $\bar{\nu}_\varphi$ è stazionario) e si ottiene da Ω_N applicando un'operazione di parità alle probabilità di transizione $p(z)$. Ciò conclude la dimostrazione della proposizione. □

L'unica costante del moto è il numero di particelle $N = \sum_{x \in T_N^d} \eta(x)$, che resta inalterato lungo la dinamica stocastica. In conseguenza di ciò esiste una famiglia ad un parametro di misure stazionarie che possono essere parametrizzate con la densità. Infatti ad ogni valore del parametro φ corrisponde un fissato valore di densità $\alpha(\varphi)$, costante su tutto il reticolo:

$$\alpha(\varphi) = \bar{\nu}_\varphi[\eta(x)] \quad \forall x \tag{2.4}$$

Indichiamo con $\varphi(\alpha)$ la funzione inversa che lega la densità α al corrispondente valore del parametro φ . Per parametrizzare le misure stazionarie con la densità basta ridefinire

$$\nu_\alpha[\eta] = \bar{\nu}_{\varphi(\alpha)}[\eta] \tag{2.5}$$

La funzione $\varphi(\cdot)$ risulta così espressa da

$$\varphi(\alpha) = \nu_\alpha[g(\eta(0))] \tag{2.6}$$

Cerchiamo ora di interpretare fisicamente i risultati ottenuti utilizzando il linguaggio della meccanica statistica classica. Il sistema che stiamo descrivendo è un gas con numero fissato N di particelle tenuto in una scatola chiusa di volume fissato (unitario). L'energia del sistema non è una costante

del moto; ciò vuol dire che possiamo considerare il gas a contatto con un bagno termico (di temperatura unitaria). Un sistema di questo tipo è descritto in meccanica statistica con un ensemble canonico. La distribuzione di Gibbs di equilibrio dipende solo dal numero di particelle N (cioè dalla densità α) ed ha la forma:

$$\nu_\alpha[\eta] \sim e^{-H(\eta)}$$

essendo $H(\eta)$ la funzione hamiltoniana che descrive l'energia del sistema nello stato η . Poiché per ipotesi le interazioni sono locali ci aspettiamo che l'energia si possa scomporre come somma di contributi (tutti uguali) dei singoli siti reticolari:

$$H(\eta) = \sum_{x \in T_N^d} H_0(\eta(x))$$

Questo è in accordo con il fatto che gli stati stazionari ν_α sono misure prodotto:

$$\nu_\alpha[\eta] = \prod_{x \in T_N^d} \nu_\alpha[\eta(x)]$$

(è il primo risultato della Proposizione 7). In conseguenza di ciò, all'equilibrio ogni sito reticolare può essere considerato come un sistema statistico indipendente. Poiché il numero di particelle dei singoli siti non è più fissato, ci aspettiamo che sia descritto da una distribuzione di Gibbs di ensemble gran-canonical, parametrizzata dal potenziale chimico μ (ovvero dalla fugacità $\varphi = e^\mu$):

$$\nu[\eta(x) = k] \sim \varphi^k e^{-H_0(k)}$$

Dalla Proposizione 7 abbiamo:

$$\bar{\nu}_\varphi[\eta(x) = k] = \frac{\varphi^k}{g(k)!} \frac{1}{\mathcal{Z}(\varphi)}$$

che ci permette di interpretare φ come fugacità del gas e $\mathcal{Z}(\varphi)$ come funzione di gran-partizione. Nota la funzione di partizione dell'ensemble gran-canonical si ricava tutta la termodinamica. In particolare ci aspettiamo che valgano le seguenti relazioni che legano la densità e le fluttuazioni di densità alla fugacità φ :

$$\begin{aligned} \varphi \partial_\varphi \log \mathcal{Z}(\varphi) &= \alpha(\varphi) = E_{\bar{\nu}_\varphi}[\eta(0)] \\ \varphi \partial_\varphi \varphi \partial_\varphi \log \mathcal{Z}(\varphi) &= \text{VAR}_{\bar{\nu}_\varphi}[\eta(0)] \end{aligned} \quad (2.7)$$

La verifica esplicita di tali relazioni in questo particolare modello è immediata.

Nella Proposizione 7 abbiamo che gli stati stazionari $\bar{\nu}_\varphi$ verificano il bilancio dettagliato se e solo se il modello ha dinamica simmetrica: $p(z) = p(-z)$. Dunque la simmetria delle probabilità di transizione $p(z)$ è associata alla reversibilità della dinamica microscopica del gas. Da un punto di vista macroscopico però ciò che interessa non è tanto la simmetria delle probabilità di transizione, quanto lo spostamento medio definito dalle probabilità di transizione:

$$\bar{z} = \sum_{z \in \mathbb{Z}^d} zp(z)$$

A) Se lo spostamento medio è nullo: $\bar{z} = 0$ (un caso particolare si ha per dinamica simmetrica) il modello descrive un sistema di *equilibrio*. Infatti in un qualunque dominio V_ϵ , infinitesimo dal punto di vista macroscopico ma sufficientemente grande rispetto la distanza intermolecolare, non si osserva (in media) flusso di particelle in nessuna direzione. In questo caso lo stato $\bar{\nu}_\varphi$ è uno stato *stazionario di equilibrio*.

B) Se invece $\bar{z} \neq 0$, c'è un flusso (medio) di particelle in direzione di \bar{z} . Dunque il modello descrive un sistema fuori dall'equilibrio; un esempio classico è un sistema di particelle cariche in un campo elettrico uniforme. In tal caso $\bar{\nu}_\varphi$ è detto stato *stazionario di non-equilibrio*.

A partire dal capitolo 5 studieremo una generalizzazione del modello zero-range, considerando il gas non più isolato, ma a contatto con delle riserve di particelle con un certo gradiente di potenziale chimico. In quel caso avremo che, anche in situazione di dinamica simmetrica, il sistema è forzato fuori dall'equilibrio dal contatto con le riserve di particelle. In particolare la situazione stazionaria è caratterizzata da un flusso continuo di particelle dalla riserva con potenziale chimico maggiore alla riserva con potenziale chimico minore.

2.3 Processi di interazione di sfere dure (esclusione semplice ed esclusione con interazione)

Tra i più semplici e più studiati sistemi di particelle interagenti c'è il *processo di esclusione semplice*. In questo caso immaginiamo che il sistema sia formato da sfere dure, il che dà vita ad una regola di esclusione secondo cui non ci può essere più di una particella in ciascun sito reticolare; inoltre le particelle saltano, quando il salto è permesso, indipendentemente dalle altre secondo una fissata probabilità di transizione invariante per traslazioni.

In questo caso il numero di particelle in ciascun sito può essere 0 o 1, quindi se il reticolo in cui vivono le particelle è T_N^d allora lo spazio di tutte le configurazioni possibili è: $\mathcal{A} = \{0, 1\}^{T_N^d}$. Per definire la dinamica, consideriamo una matrice di probabilità di transizioni elementari $p(\cdot, \cdot)$ invariante per traslazioni. Allora il generatore della dinamica è:

$$(\Omega_N f)(\eta) = \sum_{x, y \in T_N^d} \eta(x)(1 - \eta(y))p(x, y)[f(\eta^{x, y}) - f(\eta)] \quad (2.8)$$

dove il fattore $\eta(x)(1 - \eta(y))$ (nullo se $\eta(x) = 0$ o $\eta(y) = 1$) fissa le regole di esclusione; con $\eta^{x, y}$ indichiamo ancora la configurazione ottenuta da η a seguito del salto di una particella da x in y .

Anche per il processo di esclusione semplice è interessante cercare gli stati stazionari e, poiché il sistema è conservativo (il numero totale di particelle non cambia), ci aspettiamo che ci sia uno stato stazionario per ogni fissata densità $\alpha \in (0, 1)$ di particelle. Vale infatti la seguente:

Proposizione 7. *Gli stati stazionari del processo sono tutte e solo le misure di Bernoulli ν_α di tipo misure prodotto su $\{0, 1\}^{T_N^d}$:*

$$\nu_\alpha[\eta] = \prod_{x \in T_N^d} \nu_\alpha[\eta(x)]$$

con marginali distribuzioni di Bernoulli di parametro α :

$$\nu_\alpha[\eta(x) = 1] = \alpha ; \nu_\alpha[\eta(x) = 0] = 1 - \alpha$$

Come per il processo zero range, il generatore aggiunto Ω_N^* rispetto ogni misura ν_α si ottiene sostituendo le probabilità di transizione con quelle trasformate sotto parità: $p^*(x, x + z) = p(x, x - z)$. Dunque gli stati ν_α verificano il bilancio dettagliato se e solo se la dinamica è simmetrica: $p(z) = p(-z)$.

Specifichiamo meglio la terminologia utilizzata. Il termine esclusione si riferisce alla regola che impedisce i salti in siti già occupati. Inoltre il tasso di transizione con cui le particelle saltano da x in y dipende dalla configurazione η solo attraverso i numeri di occupazione $\eta(x)$ e $\eta(y)$; per questo il processo è detto di esclusione semplice.

In generale possiamo considerare una classe di processi in cui il tasso di transizione con cui le particelle saltano da x in y dipende anche dalla presenza di altre particelle in siti diversi da x ed y (ad esempio nei siti primi vicini) in conseguenza di una qualche interazione tra le particelle; parliamo in questo caso di *processi di esclusione con interazione*.

Lo spazio delle configurazioni è ancora: $\mathcal{A} = \{0, 1\}^{T_N^d}$; tuttavia il tasso di transizione di una particella tra x ed y è specificato da una funzione che dipende sia dai punti x ed y sia da tutta la configurazione di partenza η : $c(x, y ; \eta)$. (Per ovvie ragioni si impone $c(x, y ; \eta) = 0$ se $\eta(x) = \eta(y)$). In questo caso conviene definire con $\eta^{x,y}$ la configurazione che si ottiene da η scambiando i due numeri di occupazione $\eta(x)$ ed $\eta(y)$:

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

cioè descrive il salto di una particella da x ad y se $\eta(x) = 1$ e $\eta(y) = 0$, oppure il salto da y ad x se viceversa $\eta(x) = 0$ ed $\eta(y) = 1$. Con queste definizioni il generatore della dinamica Ω_N risulta:

$$(\Omega_L f)(\eta) = \sum_{x,y \in T_N^d} \frac{1}{2} c(x, y ; \eta) [f(\eta^{x,y}) - f(\eta)] \quad (2.9)$$

(si riduce al processo di esclusione semplice per $c(x, y ; \eta) = p(x, y)\eta(x)(1 - \eta(y)) + p(y, x)\eta(y)(1 - \eta(x))$).

A seconda delle richieste fisiche che si fanno sul modello si possono imporre sui tassi $c(x, y ; \eta)$ alcune ipotesi:

1) Un'ipotesi tecnica che è sempre necessario fare è quella di non degenerazione della dinamica, che può essere espressa ad esempio dalla richiesta:

$$c(x, y ; \eta) \neq 0 \text{ se } |x - y| = 1 \text{ e } \eta(x) \neq \eta(y) \quad (2.10)$$

In questo modo siamo sicuri che si può passare lungo la dinamica tra due qualunque punti dello spazio delle configurazioni (purché con lo stesso numero totale di particelle); il che permette di utilizzare i teoremi di esistenza ed unicità dello stato stazionario.

2) Si può richiedere poi che la dinamica sia a range finito, cioè che non siano permessi salti troppo lunghi:

$$c(x, y ; \eta) = 0 \text{ se } |x - y| \geq R \quad (2.11)$$

E si può richiedere che le interazioni siano a range finito, cioè che sul salto di una particella tra x ed y influiscano solo le particelle abbastanza vicine ad x ed y ; in tal caso si impone che $c(x, y ; \eta)$ dipenda da η solo tramite $\{\eta(z) : |z - x| \leq r, |z - y| \leq r\}$.

3) Un'altra ipotesi ragionevole è quella di invarianza per traslazioni spaziali, che si esprime:

$$c(x, y ; \eta) = c(x + a, y + a ; D_a \eta) \quad (2.12)$$

avendo indicato con D_a l'operatore di traslazione di a nello spazio delle configurazioni: $(D_a\eta)(x) = \eta(x - a)$.

4) Un ipotesi molto forte ed altrettanto interessante fisicamente è espressa dalla relazione:

$$c(x, y ; \eta^{x,y}) = c(x, y ; \eta)e^{\beta[H(\eta^{x,y}) - H(\eta)]} \quad (2.13)$$

essendo $H(\cdot)$ una generica funzione sullo spazio delle configurazioni e $\beta = \text{cost}$. Se è verificata la relazione (2.13) si trova immediatamente uno stato stazionario reversibile $\mu_G[\cdot]$. Infatti la condizione di bilancio dettagliato (1.14) assume la forma:

$$c(x, y ; \eta)\mu_G[\eta^{x,y}] = c(x, y ; \eta^{x,y})\mu_G[\eta]$$

e l'unica soluzione è data da:

$$\mu_G[\eta] = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\eta)} \quad (2.14)$$

che è la distribuzione di Gibbs dell'ensemble canonico se interpretiamo $\frac{1}{\beta}$ come temperatura e $H(\cdot)$ come funzione hamiltoniana.

2.4 Modello di Ising stocastico e modello elettorale

Come accennato nell'introduzione del capitolo i modelli di particelle interagenti non descrivono solo l'evoluzione dinamica delle particelle di un gas, ma, modificando di poco lo spazio delle configurazioni e le regole di interazione, si possono descrivere i sistemi più disparati.

Il *modello di Ising stocastico* è ben noto ai fisici ed è stato introdotto da Glauber (1963) per descrivere sistemi ferromagnetici. Lo spazio delle configurazioni è $\{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$; ogni sito $x \in \mathbb{Z}^d$ rappresenta la posizione di un atomo in un ferromagnete ed il valore $\eta(x) = \pm 1$ rappresenta lo stato di spin dell'atomo stesso. Dunque $\eta \in \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$ definisce la configurazione degli spin del metallo. È ben noto che in un ferromagnete gli stati di minima energia sono quelli in cui gli spin sono concordi; per un diamagnete avviene l'opposto, quindi basta cambiare il segno all'energia per passare dalla situazione ferromagnetica a quella diamagnetica. Per definire la dinamica diciamo allora che uno spin tende a "flippare" (cioè a passare da -1 a 1 o viceversa) qualora gli spin vicini sono di segno opposto o dello stesso segno (a seconda se si vuole

descrivere un ferromagnete o un diamagnete); dunque il tasso di transizione con cui lo spin in x "flippa" da $\eta(x)$ a $-\eta(x)$ viene definito pari a:

$$\exp \left\{ -\beta J \sum_{y:|x-y|=1} \eta(x)\eta(y) \right\} ;$$

$\frac{1}{\beta}$ è la temperatura e J misura la forza di interazione tra spin (è positiva per i ferromagneti e negativa per i diamagneti). Una domanda interessante che si può porre è per quali valori dei parametri (βJ) e d il sistema ha un'unica misura invariante (situazione di ergodicità) o ha più misure invarianti (il che descrive la presenza delle transizioni di fase). Quello che si trova (cf. [4]) è che per $d = 1$ il sistema è sempre ergodico, mentre per $d \geq 2$ esistono delle temperature critiche in cui nascono nuove fasi (cioè nuovi stati stazionari).

Il *modello elettorale* è stato introdotto da Holley e Liggett nel 1975 (cf. [4]). Lo spazio delle configurazioni è $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$ e l'evoluzione temporale è definita dicendo che $\eta(x)$ cambia in $1 - \eta(x)$ con un tasso:

$$\frac{1}{2d} \sum_{y:|y-x|=1} \mathbb{1}_{\{\eta(x) \neq \eta(y)\}}$$

Nell'interpretazione di Holley e Liggett i siti $x \in \mathbb{Z}^d$ rappresentano gli elettori che possono votare per due diverse fazioni politiche: 0 o 1, e nella decisione tendono ad adottare la posizione politica delle persone a loro "vicine" (in realtà questo modello si può prestare a molteplici interpretazioni più o meno fantasiose). In questo sistema ci sono due misure invarianti banali: quella concentrata in $\eta \equiv 0$ (cioè $\eta(x) = 0, \forall x$) e quella concentrata in $\eta \equiv 1$. È interessante capire se possono esserci altri stati stazionari (che descrivono situazioni più realistiche in cui non tutti votano per lo stesso candidato). Si trova che ciò è possibile solo per $d \geq 3$, ed in tal caso esiste una famiglia ad un parametro di stati stazionari μ_ρ , tali che $\mu_\rho[\eta(x) = 1] = \rho$ (cioè ρ rappresenta la percentuale di votanti che appoggiano il candidato 1).

Capitolo 3

Limite idrodinamico

Un sistema di particelle interagenti è in generale un sistema costituito da un gran numero di componenti (dell'ordine del numero di Avogadro) che evolve secondo una dinamica stocastica. Poiché il numero totale di particelle è molto grande noi non siamo realmente interessati a dare una precisa descrizione degli stati del sistema, ma caratterizziamo il gas con un numero finito di grandezze macroscopiche (ad esempio temperatura, densità, etc.). In particolare associamo ad ogni scelta fissata di tali grandezze macroscopiche \vec{p} uno stato di equilibrio $\nu_{\vec{p}}$; tipicamente quindi le grandezze macroscopiche sono legate alle costanti del moto della dinamica (nei modelli che considereremo sono le densità delle varie componenti del sistema). Una volta che sono noti gli stati di equilibrio, si cerca di esaminare l'evoluzione del sistema fuori dall'equilibrio, considerando però solo l'*evoluzione macroscopica*, cioè l'andamento temporale delle grandezze macroscopiche che lo caratterizzano.

L'idea è semplice. Si assume che il gas è confinato in un volume finito V ; per ogni punto $u \in V$ indichiamo con I_u un intorno di u , che è un volume *macroscopico* piccolo (cioè piccolo se comparato al volume V), ma un volume *microscopico* grande (cioè grande rispetto alla distanza intermolecolare), in modo da poter assumere che contiene un numero circa infinito di molecole. A causa delle interazioni possiamo pensare che il sistema si trovi sempre in stati di equilibrio locale, cioè tali che in ogni intorno I_u il sistema è vicino ad uno stato di equilibrio caratterizzato dai parametri $\vec{p}(u)$. Durante l'evoluzione temporale ci aspettiamo che tale descrizione macroscopica $\vec{p}(u)$ del gas evolva in modo dolce; più precisamente ci aspettiamo che ad ogni tempo τ ci sia equilibrio locale caratterizzato dalla funzione $\vec{p}(u, \tau)$, e che tale funzione sia regolare in τ ed u . Chiameremo equazione idrodinamica del sistema l'equazione alle derivate parziali (se esiste) che definisce l'andamento spazio-temporale del profilo di equilibrio locale $\vec{p}(\tau, u)$. Una caratteristica importante del limite idrodinamico è l'esistenza di due scale temporali. In

una scala di tempo *microscopico* (che indicheremo con t) il sistema raggiunge l'equilibrio locale, nel senso che ogni intorno macroscopico piccolo di u è circa all'equilibrio; su una scala di tempo *macroscopico* (che indicheremo con τ) evolve il profilo di equilibrio locale.

In questo capitolo cercheremo di dare un corpo matematico a queste idee: inizialmente (par. 1) diamo le definizioni di equilibrio locale, comportamento idrodinamico ed equazione idrodinamica; vediamo poi (par. 2) come si trova l'equazione idrodinamica per alcuni semplici sistemi (sistemi euleriani e sistemi diffusivi di tipo gradiente) ed infine tratteremo per il processo di esclusione semplice ed il processo zero range i punti fondamentali della dimostrazione dell'esistenza del comportamento idrodinamico, dimostrazione che in genere costituisce la parte più impegnativa nello studio del limite idrodinamico.

3.1 Definizione di equilibrio locale e di limite idrodinamico

Consideriamo un generico sistema di particelle interagenti su un reticolo microscopico d -dimensionale $T_N^d = \{1, 2, \dots, N\}^d$ con condizioni di periodicità al bordo ($N + 1 \equiv 0$); ad esso è associato il reticolo macroscopico $T^d = [0, 1)^d(\text{mod } 1)$. Indichiamo con x, y, \dots gli elementi di T_N^d e con u, v, \dots gli elementi di T^d ; ad ogni sito microscopico x è associato un punto macroscopico u e viceversa tramite le identificazioni:

$$x \in T_N^d \longrightarrow u = \frac{x}{N} \in T^d \qquad u \in T^d \longrightarrow x = [Nu] \in T_N^d$$

(avendo indicato con $[\vec{a}]$ il vettore le cui componenti sono le parti intere delle componenti di \vec{a}). Dunque il fattore di scala $\frac{1}{N}$ ci permette di passare dalla scala spaziale microscopica a quella macroscopica. Fisicamente possiamo immaginare che il gas si trovi nella scatola finita T^d e la distanza intermolecolare è $\frac{1}{N}$; quindi per $N \rightarrow \infty$ il numero di siti molecolari diverge ma la scatola macroscopica T^d resta sempre fissata.

Lo spazio delle configurazioni del sistema è $\mathcal{A}_N = \mathbb{N}^{T_N^d}$ se non ci sono regole di esclusione, oppure $\mathcal{A}_N = A^{T_N^d}$ con $A \subset \mathbb{N}$, dove ad esempio $A = \{0, 1\}$ per il processo di esclusione semplice. Indichiamo con $\mathcal{M}_+(\mathcal{A})$ la collezione delle misure positive su \mathcal{A} , e con $\mathcal{M}_1(\mathcal{A})$ la collezione delle misure di probabilità, cioè degli stati fisici del sistema. Quando faremo il limite idrodinamico ($N \rightarrow \infty$) dovremo immaginare T_N^d immerso in \mathbb{Z}^d e $\mathbb{N}^{T_N^d} = \mathcal{A}_N$ immerso in $\mathcal{A} = \mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d}$ tramite le condizioni di periodicità (cioè la configurazione

$\eta \in \mathbb{N}^{T_N^d}$ va reinterpretata come configurazione in $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d}$ ripetendo periodicamente la configurazione modulo N); in conclusione lo spazio degli stati $\mathcal{M}_1(\mathcal{A}_N)$ va considerato immerso in $\mathcal{M}_1(\mathcal{A})$ come lo spazio delle probabilità su \mathcal{A} concentrate sulle configurazioni di periodo N .

Infine definiamo gli operatori di traslazione spaziale e temporale. Con D_x indichiamo l'operatore di traslazione spaziale x , che agisce sullo spazio delle configurazioni $\mathbb{N}^{T_N^d}$ in modo che: $(D_x\eta)(y) = \eta(y - x)$; possiamo considerare anche l'azione di D_x sullo spazio delle funzioni cilindriche $\mathcal{C}(\mathbb{N}^{T_N^d})$, e sullo spazio delle misure positive $\mathcal{M}_+(\mathbb{N}^{T_N^d})$ tramite le relazioni: $(D_x f)(\eta) = f(D_x\eta) \forall f \in \mathcal{C}(\mathbb{N}^{T_N^d})$ e $D_x\mu[f] = \mu[D_x f] \forall \mu \in \mathcal{M}_+(\mathbb{N}^{T_N^d})$. Analogamente definiamo l'operatore T_t di traslazione temporale t che agisce sullo spazio dei cammini $D(\mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d} \times \mathbb{R}_+)$ in modo che: $(T_t\eta)_s(x) = \eta_{s+t}(x)$; è facile capire che l'azione della traslazione temporale sullo spazio delle misure è definita dal semigruppone delle probabilità di transizione: $(T_t\mu)[f] = (P_t\mu)[f]$.

Una nozione importante per lo studio del limite idrodinamico è quella di *misura empirica*, che definisce una corrispondenza tra lo spazio delle configurazioni \mathcal{A}_N e lo spazio delle misure positive $\mathcal{M}_+(T^d)$ sulla scatola macroscopica T^d . In particolare ad ogni configurazione $\eta \in \mathcal{A}_N$ corrisponde la misura empirica $\pi^N(\eta)$ su T^d definita da:

$$\pi^N(\eta, du) = \frac{1}{N^d} \sum_{x \in T_N^d} \eta(x) \delta_{\frac{x}{N}}(du) \quad (3.1)$$

essendo $\delta_{u_0}(du)$ la delta di Dirac concentrata in $u = u_0$. Il significato è quello di distribuzione di massa, avendo associato ad ogni particella un peso pari a $\frac{1}{N^d}$.

Siamo ora pronti per dare le diverse nozioni di equilibrio locale. Consideriamo sistemi di particelle interagenti per cui esiste una collezione $\{\nu_\alpha\}$ di misure prodotto, invarianti per traslazioni, di equilibrio. Senza perdere di generalità possiamo immaginare che tale famiglia sia parametrizzata dalla densità: $\alpha = \nu_\alpha[\eta(0)]$. Fissiamo poi un profilo densità continuo quasi ovunque: $\rho_0(\cdot) : T^d \rightarrow \mathbb{R}_+$.

Definizione1. Le misure prodotto $\nu_{\rho_0(\cdot)}^N$ su $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d}$ con marginali:

$$\nu_{\rho_0(\cdot)}^N[\eta(x) = k] = \nu_{\rho_0(\frac{x}{N})}^N[\eta(x) = k] \quad (3.2)$$

sono dette *misure prodotto con parametro lentamente variabile* $\rho_0(\cdot)$.

Definizione2. Un *equilibrio locale forte di profilo* $\rho_0(\cdot)$ è una successione $\{\mu^N\}$ di misure di probabilità su $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d}$ tale che:

$$D_{[Nu]}\mu^N \xrightarrow{w} \nu_{\rho_0(u)} \quad \forall u \text{ punto di continuità di } \rho_0 \quad (3.3)$$

avendo indicato con \xrightarrow{w} la convergenza debole nello spazio delle misure.

È facile capire che la successione di misure con parametro lentamente variabile $\nu_{\rho_0(\cdot)}^N$ (def.1) è un caso particolare di equilibrio locale forte (def.2). Il significato fisico di equilibrio locale forte si capisce con il seguente argomento: se si fissa l'attenzione nel punto macroscopico $u \in T^d$, allora per $N \sim \infty$ ed in prossimità di u lo stato del sistema è praticamente uno stato di equilibrio di parametro $\rho_0(u)$. La cosa più naturale da fare sarebbe quindi cercare di dimostrare che, se il sistema parte da un equilibrio locale forte di parametro $\rho_0(\cdot)$, allora evolve secondo stati ancora di equilibrio locale forte; potremmo cioè cercare di verificare la:

Tesi 1. *Ogni equilibrio locale forte $\{\mu^N\}$ di profilo $\rho_0(\cdot)$ è conservato da un'opportuna riscalatura temporale θ_N , cioè esiste una funzione $\rho(\cdot, \cdot) : \mathbb{R}_+ \times T^d \rightarrow \mathbb{R}_+$ dipendente solo dal profilo iniziale $\rho_0(\cdot)$ tale che:*

$$P_{\theta_N \tau} D_{[Nu]} \mu^N \xrightarrow{w} \nu_{\rho(\tau, u)} \quad (3.4)$$

$\forall u$ punto di continuità di $\rho(\cdot, \cdot)$ e τ positivo.

In realtà verificare che per un generico sistema ogni equilibrio locale forte è conservato risulta molto difficile e lo si riesce a fare rigorosamente solo per sistemi non interagenti. Per questo vengono introdotte nozioni di equilibrio locale più deboli.

Definizione3. Un *equilibrio locale debole di profilo $\rho_0(\cdot)$* è una successione di misure di probabilità su $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d}$ tale che:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu^N \left[\left| \frac{1}{N^d} \sum_{x \in T_N^d} G\left(\frac{x}{N}\right) (D_x \psi)(\eta) - \int_{T^d} G(u) \nu_{\rho_0(u)}[\psi] du \right| > \delta \right] = 0 \quad (3.5)$$

per tutte le G funzioni continue su T^d e le ψ funzioni cilindriche e limitate su $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d}$, $\forall \delta$ positivo.

Definizione4. Una successione di misure di probabilità $\{\mu^N\}$ si dice *associata al profilo $\rho_0(\cdot)$* se vale:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu^N \left[\left| \frac{1}{N^d} \sum_{x \in T_N^d} G\left(\frac{x}{N}\right) \eta(x) - \int_{T^d} G(u) \rho_0(u) du \right| > \delta \right] = 0 \quad (3.6)$$

per tutte le G funzioni continue su T^d e δ positive.

Si può verificare che la nozione di equilibrio locale debole (def.3) è più debole di quella di equilibrio locale forte (cioè ogni equilibrio locale forte è

anche debole). Si vede subito poi che la nozione di successione di misure associata ad un profilo $\rho_0(\cdot)$ (def.4) è ancora più debole di quella di uquilibrio locale debole, infatti la relazione (3.6) è un caso particolare della relazione (3.5) per $\psi(\eta) = \eta(0)$. Il fatto che la relazione (3.6) sia legata alla nozione intuitiva di quasi equilibrio si capisce riscrivendola in termini di misura empirica:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu^N \left[\left| \int_{T^d} [\pi^N(\eta; du) - \rho_0(u) du] G(u) \right| > \delta \right] = 0 \quad (3.7)$$

Ciò vuol dire che la successione delle misure empiriche, che è legata alla distribuzione discreta delle masse delle particelle, tende debolmente ed in probabilità ad una misura assolutamente continua rispetto la misura di Lebesgue di densità $\rho_0(\cdot)$, che descrive la densità delle particelle nel limite idrodinamico.

Un'affermazione più debole della Tesi1 e che si riesce a verificare per alcuni semplici sistemi di particelle interagenti (esclusione semplice, zero range, ...) è la:

Tesi 2. *Per ogni successione di misure $\{\mu^N\}$ associata al profilo $\rho_0(\cdot)$ e che verifica un'ipotesi aggiuntiva sulla "vicinanza" ad un equilibrio globale ν_α , esistono una rinormalizzazione dei tempi θ_N ed un profilo spazio-temporale $\rho(\cdot, \cdot)$ tali che la successione $\{P_{\theta_N \tau} \mu^N\}$ è associata al profilo $\rho(\tau, \cdot)$ per ogni τ positivo.*

In tal caso diciamo che il sistema ha *comportamento idrodinamico*.

Se un sistema di particelle interagenti ha comportamento idrodinamico, ad esso è associata un'*equazione idrodinamica*, che è l'equazione alle derivate parziali che definisce l'andamento temporale del profilo $\rho(\cdot, \cdot)$. (in genere si dimostra che il profilo $\rho(\cdot, \cdot)$ è soluzione debole dell'equazione idrodinamica, cf. [1]).

3.2 Equazione idrodinamica

Una volta dimostrato che un sistema ha comportamento idrodinamico, trovare l'espressione dell'equazione idrodinamica è relativamente semplice. In questo paragrafo troveremo l'equazione idrodinamica in due tipi di sistemi: sistemi con drift e sistemi diffusivi di tipo gradiente; per semplicità faremo l'ipotesi (molto forte) che sia verificata la Tesi1 (in modo da poter usare gli equilibri locali forti). Nel paragrafo successivo invece accenneremo quali sono le tecniche e le difficoltà nel verificare la presenza di comportamento idrodinamico.

Consideriamo per semplicità sistemi unidimensionali con dinamica a primi vicini. Fissato un cammino $\{\eta_t ; t \in \mathbb{R}_+\}$ nello spazio $D(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{N}^{T_N})$, definiamo la *corrente* tra x ed y nell'intervallo $[s, t]$: $J(x, y ; [s, t])$, come il numero totale di particelle che in $[s, t]$ passa direttamente da x in y meno il numero di particelle che passa da y in x . Definiamo invece la *densità di corrente* tra x ed y associata alla configurazione η : $j(x, y ; \eta) = k(\eta, \eta^{x,y}) - k(\eta, \eta^{y,x})$, avendo indicato con $k(\eta, \zeta)$ il tasso di transizione dalla configurazione η alla configurazione ζ , e con $\eta^{x,y}$ la configurazione ottenuta da η con un salto di una particella da x in y . Dunque $j(x, y ; \eta)$ è proprio la corrente media istantanea tra i siti x ed y , ed è legata al generatore della dinamica dalla relazione: $\Omega_N \eta(x) = j(x-1, x ; \eta) - j(x, x+1 ; \eta)$

Definizione. Diremo che un sistema di particelle interagenti è di tipo *euleriano* se per tutte le misure di equilibrio ν_α risulta:

$$\nu_\alpha[j(x, x+1 ; \eta)] = j_\alpha \neq 0 \quad (3.8)$$

Il sistema è invece di tipo *diffusivo* se per tutte le misure di equilibrio risulta:

$$\nu_\alpha[j(x, x+1 ; \eta)] = 0 \quad (3.9)$$

Tra i sistemi diffusivi ci sono dei particolari sistemi, detti di tipo *gradiente*, per i quali esiste una funzione cilindrica $h(\cdot)$ tale che:

$$j(x, x+1 ; \eta) = D_{x+1}h(\eta) - D_x h(\eta) \quad (3.10)$$

I sistemi gradiente sono particolarmente semplici e risultano avere un buon comportamento idrodinamico; esempi di sistemi gradiente sono sia il processo di esclusione semplice (con $h(\eta) = \eta(0)$) sia il processo zero range (con $h(\eta) = g(\eta(0))$).

Possiamo a questo punto cercare l'equazione idrodinamica di sistemi euleriani o gradiente. Vale la seguente:

Proposizione 8. *Supponiamo che ogni equilibrio locale forte è conservato (Tesi1), e l'andamento temporale del profilo di equilibrio è descritto dalla funzione $\rho(\cdot, \cdot)$.*

1. *Se il sistema è di tipo euleriano, allora la corretta riscalatura temporale è definita da $\theta_N = N$ (il tempo riscalda linearmente con lo spazio), e l'equazione idrodinamica del sistema è l'equazione di Eulero:*

$$\partial_t \rho(\tau, u) = -\frac{d}{d\rho} j_{\rho(\tau, u)} \partial_u \rho(\tau, u) \quad (3.11)$$

2. Se il sistema è diffusivo di tipo gradiente, allora il tempo va riscritto con $\theta_N = N^2$ (il tempo riscalda quadraticamente rispetto allo spazio) e l'equazione idrodinamica è l'equazione del calore:

$$\partial_t \rho(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u [D(\rho(\tau, u)) \partial_u \rho(\tau, u)] \quad (3.12)$$

essendo $D(\rho)$ il coefficiente di diffusione:

$$D(\rho) = -2 \frac{d}{d\rho} \nu_\rho[h(\eta)]$$

Dim. La dimostrazione di questa proposizione è abbastanza semplice (cf. [5]). Consideriamo un equilibrio locale forte $\{\mu^N\}$; dalla Definizione 2 di equilibrio locale e dall'ipotesi di validità della Tesi 1, sappiamo già che:

$$P_{\theta_N \tau} D_{[Nu]} \mu^N \xrightarrow{w} \nu_{\rho(\tau, u)} \quad (3.13)$$

Per cercare l'equazione differenziale che definisce la funzione $\rho(\tau, u)$, studiamo:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \mu^N [\langle \pi^N(\eta_{\theta_N \tau}), f \rangle]$$

($\langle \pi^N, f \rangle$ è il prodotto scalare: $\int_T \pi^N(\eta, du) f(u)$) per una generica funzione f regolare in $T = [0, 1) \bmod 1$ e nulla al bordo. Il calcolo di questo limite lo facciamo in due modi. Una volta lasciando esplicita la derivata temporale e sfruttando la relazione (3.13); in questo modo si ottiene facilmente:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \mu^N [\langle \pi^N(\eta_{\theta_N \tau}), f \rangle] &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \frac{1}{N} \sum_{x=-N}^N \mu^N[\eta_{\theta_N \tau}(x)] f\left(\frac{x}{N}\right) = \\ &= \int_{-1}^1 du f(u) \partial_\tau \rho(\tau, u) \end{aligned} \quad (3.14)$$

La seconda volta invece svolgiamo la derivata temporale usando l'equazione di Kolmogorov e l'espressione del generatore Ω_N ; consideriamo separatamente le due situazioni considerate nel teorema.

1) Regime euleriano

Qui il tempo riscalda con $\theta_N = N$, cioè $t = N\tau$.

$$\frac{d}{d\tau} \mu^N [\langle \pi^N(\eta_{\theta_N \tau}), f \rangle] = N \frac{d}{dt} \mu^N [\langle \pi^N(\eta_t), f \rangle] =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \sum_{x=-N}^N Nf\left(\frac{x}{N}\right) \frac{d}{dt} \mu^N[\eta_t(x)] = \frac{1}{N} \sum_{x=-N}^N Nf\left(\frac{x}{N}\right) \mu^N[\Omega_N \eta_t(x)] = \\
&= \frac{1}{N} \sum_{x=-N}^N Nf\left(\frac{x}{N}\right) \{ \mu^N[j(x-1, x; \eta_t)] - \mu^N[j(x, x+1; \eta_t)] \} =
\end{aligned}$$

per definizione di regime euleriano e per l'ipotesi (3.13)

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \sum_{x=-N}^N Nf\left(\frac{x}{N}\right) \{ (T_t D_{x-1} \mu^N)[j(0, 1; \eta_0)] - (T_t D_x \mu^N)[j(0, 1; \eta_0)] \} = \\
&\simeq \frac{1}{N} \sum_{x=-N}^N f\left(\frac{x}{N}\right) N[j_{\rho(\tau, \frac{x-1}{N})} - j_{\rho(\tau, \frac{x}{N})}] + O\left(\frac{1}{N}\right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \\
&\xrightarrow{N \rightarrow \infty} - \int_{-1}^1 du f(u) \partial_u j_{\rho(\tau, u)} \tag{3.15}
\end{aligned}$$

Confrontando le due relazioni (3.14) e (3.15) e ricordando che devono essere verificate per ogni funzione $f \in C(T)$, abbiamo l'equazione idrodinamica:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = - \frac{d}{du} j_{\rho(\tau, u)}$$

cioè la prima parte della proposizione.

2) Sistemi diffusivi di tipo gradiente.

In questo caso il tempo riscalda come $\theta_N = N^2$; quindi ripercorrendo i passi di prima si trova:

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{d\tau} \mu^N[\langle \pi^N(\eta_{N^2\tau}), f \rangle] = \\
&= \frac{1}{N} \sum_{x=-N}^N N^2 f\left(\frac{x}{N}\right) \{ \mu^N[j(x-1, x; \eta_t)] - \mu^N[j(x, x+1; \eta_t)] \} =
\end{aligned}$$

cambiando indice di sommatoria

$$= \frac{1}{N} \sum_{y=-N}^N N^2 [f\left(\frac{y+1}{N}\right) - f\left(\frac{y}{N}\right)] \mu^N[j(y, y+1; \eta_t)] =$$

per definizione di sistema gradiente

$$= \frac{1}{N} \sum_{y=-N}^N N^2 [f\left(\frac{y+1}{N}\right) - f\left(\frac{y}{N}\right)] \mu^N[D_{y+1} h(\eta_t) - D_y h(\eta_t)] =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \sum_{x=-N}^N N^2 \left[f\left(\frac{y+1}{N}\right) + f\left(\frac{x+1}{N}\right) - 2f\left(\frac{x}{N}\right) \right] (T_t D_x \mu^N)[h(\eta)] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \\
&\quad \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \int_{-1}^1 du f''(u) \nu_{\rho(\tau, u)}[h(\eta)]
\end{aligned}$$

Integrando questa espressione per parti due volte e confrontando con la relazione (3.14) si ottiene l'equazione idrodinamica:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \partial_u^2 \nu_{\rho(\tau, u)}[h(\eta)]$$

□

3.3 Comportamento idrodinamico

In questo paragrafo presentiamo brevemente la strategia della dimostrazione del comportamento idrodinamico di sistemi semplici come quello gradiente, per il quale si riesce a dimostrare ogni cosa in modo rigoroso; per altri tipi di sistemi non c'è una strategia generale, ma si usano tecniche ad hoc (come il metodo dell'entropia relativa, cf. [1]).

Abbiamo detto che la misura empirica $\pi^N(\eta)$ fissa una corrispondenza tra lo spazio delle configurazioni \mathbb{N}^{T^d} e lo spazio delle misure positive su T^d ; in particolare ne consideriamo l'evoluzione temporale accelerando il tempo con il fattore di scala N^2 : $\pi_\tau^N(\eta_{(\cdot)}) = \pi^N(\eta_{N^2\tau})$.

Sullo spazio dei cammini $D([0, T] \times \mathbb{N}^{T^d})$ è ben definita la distribuzione di probabilità a partire dallo stato iniziale μ^N ed il generatore della dinamica Ω_N ; indichiamo con P^N tale distribuzione di probabilità. Chiaramente tramite la corrispondenza definita dalla misura empirica π^N risulta ben definita anche la distribuzione di probabilità Q^N sullo spazio dei cammini di misure su T^d : $D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$; è cioè definita in modo che: $Q^N[\pi_{(\cdot)}^N \in A] = P^N[\{\eta_{(\cdot)} : \{\pi^N(\eta_{N^2\tau})\} \in A\}]$.

Fissiamo un profilo iniziale $\rho_0(\cdot) : T^d \rightarrow \mathbb{R}$ ed indichiamo con $\{\mu^N\}$ una successione di misure di probabilità associata al profilo $\rho_0(\cdot)$ (cf. la def.4 del par.1); ad ogni misura μ^N presa come stato iniziale corrisponde quindi la distribuzione di probabilità Q^N dei processi $\{\pi_\tau^N\}$. Noi vogliamo dimostrare che il sistema ha comportamento idrodinamico (cf. la Tesi2 del par.2); cioè vogliamo dimostrare che per ogni tempo fissato τ la misura empirica converge in probabilità alla misura assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue di densità $\rho(\tau, u)$ soluzione dell'equazione idrodinamica. A tale scopo si procede in due passi: si dimostra inizialmente che il processo $\{\pi_\tau^N, \tau \in [0, T]\}$ converge in distribuzione al processo deterministico

$\{\rho(\tau, u), \tau \in [0, T]\}$; dopodiché si verifica che la convergenza in distribuzione dei cammini implica la convergenza in probabilità ad istanti fissati.

Concentriamoci sul primo passo, che è concettualmente il più interessante. Si vuole dimostrare che la distribuzione di probabilità Q^N sullo spazio $D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$ converge debolmente per $N \rightarrow \infty$ ad un processo deterministico, cioè ad una distribuzione Q^* concentrata su un unico cammino $\{\rho(\tau, u); \tau \in [0, T]\}$ (Q^* è una distribuzione tipo delta di Dirac).

La verifica dell'esistenza del limite di $\{Q^N\}$ non si fa direttamente, ma si usa un metodo indiretto standard. Si dimostra inizialmente che la successione $\{Q^N\}$ è relativamente compatta tramite il criterio di Prohorov (cf. ad esempio [6]). Quindi si verifica che tutte le sottosuccessioni convergenti convergono allo stesso limite Q^* .

Resta da identificare il punto limite Q^* . Vediamo brevemente come si procede per il processo di esclusione semplice (particolarmente semplice da studiare) e poi quali sono le difficoltà che si presentano per processi gradiente generici (tipo lo zero range); in ogni caso consideriamo sistemi simmetrici con dinamica a primi vicini.

A) esclusione semplice

Il primo passo consiste nel verificare che, per ogni funzione continua $G : T^d \rightarrow \mathbb{R}$, il prodotto scalare $\langle \pi_\tau^N, G \rangle = \frac{1}{N^d} \sum_{x \in T_N^d} G(\frac{x}{N}) \eta_{N^2\tau}(x)$ soddisfa la relazione:

$$\langle \pi_\tau^N, G \rangle = \langle \pi_0^N, G \rangle + \int_0^\tau N^2 ds \Omega_N \langle \pi_s^N, G \rangle + M^{N,G}(\tau) \quad (3.16)$$

dove $M^{N,G}(\tau)$ sono martingale rispetto alla filtrazione naturale: $\sigma_\tau = \sigma(\{\eta_s; s \leq N^2\tau\})$. La verifica di ciò è immediata se si utilizzano i risultati descritti in cap.1 par.5. A questo punto si utilizza l'espressione del generatore della dinamica:

$$\Omega_N \eta(x) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d [\eta(x + e_j) + \eta(x - e_j) - 2\eta(x)] \quad (3.17)$$

Usando questa espressione e sommando due volte per parti nella (3.16) si arriva a:

$$\langle \pi_\tau^N, G \rangle = \langle \pi_0^N, G \rangle + \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \langle \pi_s^N, \Delta_N G \rangle + M^{N,G}(\tau) \quad (3.18)$$

essendo Δ_N il laplaciano discreto definito da:

$$\Delta_N G\left(\frac{x}{N}\right) = N^2 \sum_{j=1}^d \left[G\left(\frac{x + e_j}{N}\right) + G\left(\frac{x - e_j}{N}\right) - 2G\left(\frac{x}{N}\right) \right]$$

Il passo successivo consiste nel dimostrare che la martingala $M_\tau^{N,G}$ si annulla nel limite $N \rightarrow \infty$. Per fare ciò si utilizzano delle stime su $[M_\tau^{N,G}]^2$ che coinvolgono la seconda martingala N^G introdotta nel cap.1 par.5. In questo modo risulta verificato che il punto limite Q^* è concentrato in soluzioni dell'equazione:

$$\langle \pi_\tau, G \rangle - \langle \pi_0, G \rangle = \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \langle \pi_s, \nabla^2 G \rangle \quad (3.19)$$

che è la forma debole dell'equazione del calore:

$$\partial \rho = \frac{1}{2} \nabla^2 \rho$$

Per concludere la dimostrazione del comportamento idrodinamico resta da provare un teorema di unicità sulle soluzioni dell'equazione debole del calore.

B) zero range

Per un sistema gradiente generico nascono delle complicazioni in più. Consideriamo il prototipo più semplice di sistema gradiente, il processo zero range simmetrico con dinamica a primi vicini, con generatore:

$$(\Omega_N f)(\eta) = \frac{1}{2} \sum_{x \in T_N^d} \sum_{|Z|=1} g(\eta(x)) [f(\eta^{x,x+z}) - f(\eta)] \quad (3.20)$$

Anche in questo caso si parte dall'espressione della martingala $M^{N,G}(\tau)$:

$$M^{N,G}(\tau) = \langle \pi_\tau^N, G \rangle - \langle \pi_0^N, G \rangle - \int_0^\tau N^2 ds \Omega_N \langle \pi_s^N, G \rangle$$

tuttavia quando andiamo ad esplicitare la forma del generatore il risultato non è più una semplice espressione funzione della misura empirica, come in (3.18), ma compare la funzione $h(\eta)$ (che in questo caso è $g(\eta(0))$):

$$M^{N,G}(\tau) = \langle \pi_\tau^N, G \rangle - \langle \pi_0^N, G \rangle + \\ - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \frac{1}{N^d} \sum_{x \in T_N^d} G\left(\frac{x}{N}\right) N^2 \sum_{|y-x|=1} [g(\eta_s(y)) - g(\eta_s(x))]$$

che con una doppia somma per parti si riduce a:

$$M^{N,G}(\tau) = \langle \pi_\tau^N, G \rangle - \langle \pi_0^N, G \rangle - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \frac{1}{N^d} \sum_{x \in T_N^d} \Delta_N G\left(\frac{x}{N}\right) g(\eta_s(x)) \quad (3.21)$$

Notiamo che questa somma per parti è stata possibile grazie alla condizione gradiente. Tuttavia ora non c'è più la misura empirica nel termine integrale, ma il campo della funzione locale $g(\eta(0))$. Il problema principale quindi consisterà nel sostituire la funzione $g(\eta(x))$ con una funzione ad hoc del campo di densità $\eta(x)$ in modo da chiudere l'equazione. Ricordiamo che abbiamo parametrizzato le misure invarianti in modo che: $\nu_\alpha[\eta(0)] = \alpha$ e $\nu_\alpha[g(\eta(0))] = \varphi(\alpha)$; è quindi facile intuire che la funzione $\varphi(\cdot)$ gioca un ruolo cruciale. Consideriamo una scatola di lunghezza εN attorno al punto macroscopico $u \in T^d$ (è una scatola grande dal punto di vista microscopico, ma infinitesima dal punto di vista macroscopico). Poiché la variazione del numero di particelle di questa scatola è legato ad effetti di superficie, il sistema raggiunge in tempi microscopici l'equilibrio, prima che il numero di particelle della scatola possa variare in modo significativo. Possiamo quindi pensare di poter sostituire:

$$\frac{1}{(2N\varepsilon + 1)^d} \sum_{|y-x| \leq N\varepsilon} g(\eta_s(y))$$

con il valore aspettato della variabile $g(\eta(0))$ rispetto la misura invariante di densità: $\frac{1}{(2N\varepsilon+1)^d} \sum_{|y-x| \leq N\varepsilon} \eta_s(y)$, cioè con:

$$\varphi \left(\frac{1}{(2N\varepsilon + 1)^d} \sum_{|y-x| \leq N\varepsilon} \eta_s(y) \right)$$

Effettuando tale sostituzione nella relazione (3.21) si chiude l'equazione e si torna ad una situazione simile a quella che avevamo per il processo di esclusione semplice. Dando una forma matematicamente corretta a queste idee si può dimostrare che il sistema ha comportamento idrodinamico, e la distribuzione limite Q^* è concentrata sulla soluzione debole (unica) dell'equazione del calore:

$$\partial_\tau \rho = \frac{1}{2} \nabla^2 \varphi(\rho(\tau, u)) \tag{3.22}$$

Capitolo 4

Studio delle grandi deviazioni

Studiare il limite idrodinamico vuol dire studiare il comportamento medio (più probabile) di un sistema di particelle interagenti. Possiamo però chiedere con che probabilità l'evoluzione del sistema si discosta da quella definita dalla soluzione dell'equazione idrodinamica; di ciò si occupa la teoria delle grandi deviazioni.

Nel primo paragrafo vediamo le idee di base dello studio delle grandi deviazioni nella situazione particolarmente semplice di variabili casuali indipendenti ed identicamente distribuite (cf. [6]). Diamo poi una definizione generale di sistemi che soddisfano un principio di grandi deviazioni, vedendo come questo concetto si applica a sistemi di particelle interagenti (par.2 e 3). Infine vedremo alcune applicazioni dello studio delle grandi deviazioni, come la verifica delle relazioni di simmetria di Onsager e della relazione di Onsager-Machlup.

4.1 Esempio: variabili i.i.d.

Sia $\{X_n\}$ una successione di variabili indipendenti ed identicamente distribuite (i.i.d.) di valore atteso p ; definiamo:

$$\frac{S_n}{n} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k \quad (4.1)$$

Possiamo esaminare $\frac{S_n}{n}$ a diversi ordini di grandezza nel limite $n \rightarrow \infty$.

A) All'ordine zero la legge dei grandi numeri ci assicura che $\frac{S_n}{n}$ dista poco da p , cioè:

$$P \left[\left| \frac{S_n}{n} - p \right| > \varepsilon \right] \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad (4.2)$$

B) Il teorema del limite centrale dice poi che $\frac{S_n - np}{\sqrt{n}}$ per n tendente all'infinito si comporta come una variabile gaussiana normalizzata (cioè c'è convergenza in distribuzione). Questo vuol dire che la deviazione ordinaria di $\frac{S_n}{n}$ da p è dell'ordine di $\frac{1}{\sqrt{n}}$.

C) Possiamo però chiederci con che probabilità $\frac{S_n}{n}$ dista da p per una quantità finita; a tale domanda risponde la teoria delle grandi deviazioni. Definiamo le funzioni:

$$\begin{aligned}\varphi(\lambda) &= E[e^{\lambda X_i}] \\ \psi(\lambda) &= \log \varphi(\lambda)\end{aligned}$$

$\varphi(\lambda)$ è lo stesso qualunque sia i poiché le X_i sono identicamente distribuite. Si può verificare che la $\psi(\lambda)$ verifica le seguenti proprietà:

1. è strettamente convessa (negli intervalli in cui è finita):

$$\psi(\alpha\lambda_1 + (1 - \alpha)\lambda_2) < \alpha\psi(\lambda_1) + (1 - \alpha)\psi(\lambda_2) \quad \forall \alpha \in (0, 1)$$

purché $\psi(\lambda) < \infty$ per $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$

2. vale:

$$\begin{aligned}\psi(0) &= 0 \\ \psi'(0) &= p \\ \psi''(0) &> 0\end{aligned}$$

Definiamo poi la trasformata di Cramer di ψ :

$$H(a) = \sup_{\lambda} [a\lambda - \psi(\lambda)]$$

In conseguenza delle proprietà di $\psi(\cdot)$, la funzione $H(\cdot)$ è convessa:

$$H(\alpha a_1 + (1 - \alpha)a_2) < \alpha H(a_1) + (1 - \alpha)H(a_2) \quad \forall \alpha \in (0, 1)$$

Per $a = p$ vale $H(p) = 0$;

per $a > p$ il punto di massimo di $[a\lambda - \psi(\lambda)]$ è in $\lambda_0 > 0$;

per $a < p$ il punto di massimo di $[a\lambda - \psi(\lambda)]$ è in $\lambda_0 < 0$.

A questo punto possiamo stimare la probabilità di grandi deviazioni:

A) Usando la disuguaglianza di Chebychev e la definizione delle funzioni $\psi(\lambda)$ e $H(a)$ si ottiene:

$$P \left[\frac{S_n}{n} \geq a \right] \leq \inf_{\lambda > 0} E[e^{\lambda(\frac{S_n}{n} - a)}] =$$

$$\begin{aligned}
&= \inf_{\lambda > 0} \exp\{-\lambda a + n\psi(\frac{\lambda}{n})\} = \\
&= \begin{cases} \exp\{-nH(a)\} & \text{per } a > p \\ 1 & \text{per } a < p \end{cases}
\end{aligned}$$

B) analogamente:

$$P\left[\frac{S_n}{n} \leq a\right] \leq \begin{cases} \exp\{-nH(a)\} & \text{per } a < p \\ 1 & \text{per } a > p \end{cases}$$

Unendo questi risultati abbiamo:

$$P\left[\left|\frac{S_n}{n} - p\right| > \varepsilon\right] \leq 2e^{-n \min\{H(p+\varepsilon), H(p-\varepsilon)\}}$$

che si può riscrivere nella forma:

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log P\left[\left|\frac{S_n}{n} - p\right| > \varepsilon\right] \leq -\min\{H(p+\varepsilon), H(p-\varepsilon)\}$$

4.2 Principio di grandi deviazioni e teorema di Laplace-Varadhan

Definizione. Consideriamo una successione di variabili casuali $\{X_n ; n = 1, 2, \dots\}$ definite nello spazio di probabilità (Ω, \mathcal{F}, P) ed a valori nello spazio metrico \mathcal{E} (in genere $\mathcal{E} = \mathbb{R}$). Diremo che $\{X_n\}$ soddisfa un *un principio di grandi deviazioni* con *funzionale* $I(\cdot) : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}_+$ e con *tassi di decadimento* $a_n \uparrow \infty$ se valgono le relazioni:

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{a_n} \log P[X_n \in \mathcal{F}] \leq -\inf_{u \in \mathcal{F}} I(u) ; \forall \mathcal{F} \text{ chiuso in } \mathcal{E} \quad (4.3)$$

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{a_n} \log P[X_n \in \mathcal{G}] \geq -\inf_{u \in \mathcal{G}} I(u) ; \forall \mathcal{G} \text{ aperto in } \mathcal{E} \quad (4.4)$$

Per capire il significato del principio di grandi deviazioni consideriamo un generico insieme $A \subset \mathcal{E}$. Se la chiusura di A contiene un punto di zero della funzione $I(\cdot)$, allora la probabilità $P[X_n \in A]$ resta finita anche per $n \rightarrow \infty$. Se invece $[A]$ non contiene nessun punto di zero di $I(\cdot)$, allora la probabilità che X_n assuma valori in A decade esponenzialmente per $N \rightarrow \infty$:

$$P[X_n \in A] \sim e^{-a_n \inf_{u \in A} I(u)}$$

(con \sim intendiamo dire che se prendiamo il logaritmo e dividiamo per n i due membri coincidono nel limite $n \rightarrow \infty$). Dunque per n tendente all'infinito la

distribuzione di probabilità di X_n tende ad essere concentrata solo sui punti di zero della funzione $I(\cdot)$; inoltre la funzione $I(\cdot)$ ed i tassi di decadimento a_n ci permettono di stimare con che probabilità X_n assume valori diversi dai punti di zero di $I(\cdot)$ (cioè la probabilità di grandi deviazioni).

Se $\{X_n ; n \geq 1\}$ è una successione di variabili casuali che soddisfa il principio di grandi deviazioni con funzionale $I(\cdot)$ e tassi di decadimento a_n allora vale il seguente:

Teorema 3 (di Laplace-Varadhan). *Data una qualunque funzione $F : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$ continua e limitata, risulta:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{a_n} \log E[e^{a_n F(X_n)}] = \sup_{u \in \mathcal{E}} \{F(u) - I(u)\} \quad (4.5)$$

La dimostrazione completa del teorema si può trovare in [1, cap.2]; cerchiamo qui di capire l'idea alla base del teorema stesso. Abbiamo detto che per $n \sim \infty$, la probabilità che X_n sia in un intorno di u è:

$$P[X_n \in O_u] \sim e^{-a_n I(u)}$$

Dunque possiamo schematizzare il valore aspettato in (4.5) così:

$$E[e^{a_n F(X_n)}] \sim \sum_u e^{a_n [F(u) - I(u)]}$$

(chiaramente la somma andrà fatta su un sottoinsieme denso e numerabile di \mathcal{E} , che si suppone separabile). Sia ora u_0 il punto di massimo di $[F(u) - I(u)]$; possiamo riscrivere:

$$E[e^{a_n F(X_n)}] \sim e^{a_n [F(u_0) - I(u_0)]} \left\{ 1 + \sum_{u \neq u_0} e^{-a_n \{ [F(u_0) - I(u_0)] - [F(u) - I(u)] \}} \right\}$$

e nel limite $n \rightarrow \infty$ contribuisce solo il primo termine.

Prima di concludere enunciamo senza dimostrare un lemma tecnico utile nella ricerca del funzionale di grandi deviazioni per sistemi di particelle interagenti.

Proposizione 9 (di minimax). *Sia \mathcal{E} uno spazio metrico completo e separabile e $\{P_n\}$ una successione di misure di probabilità su \mathcal{E} ; sia $\{I_\beta : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R} ; \beta \in \mathcal{M}\}$ una famiglia di funzioni semicontinue dall'alto, cioè tali che:*

$$\mu_n \rightarrow \mu \Rightarrow \limsup_{n \rightarrow \infty} I_\beta(\mu_n) \leq I_\beta(\mu)$$

Supponiamo di aver dimostrato che per ogni insieme aperto $O \subset \mathcal{E}$ vale:

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{a_n} \log P_n[O] \leq \inf_{\beta \in \mathcal{M}} \sup_{\mu \in O} I_\beta(\mu)$$

Allora per ogni insieme compatto K :

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{a_n} \log P_n[K] \leq \sup_{\mu \in K} \inf_{\beta \in \mathcal{M}} I_\beta(\mu)$$

Cioè questa proposizione ci permette di scambiare:

$$\sup_{\mu} \inf_{\beta} \longleftrightarrow \inf_{\beta} \sup_{\mu}$$

che costituisce una delle difficoltà tecniche nello studio delle grandi deviazioni.

4.3 Grandi deviazioni dal limite idrodinamico

Vogliamo verificare la validità del principio di grandi deviazioni per sistemi di particelle interagenti, in modo di poter stimare la probabilità di grandi deviazioni dal limite idrodinamico. Per semplicità consideriamo il processo di esclusione semplice simmetrico e con dinamica a primi vicini, con stato iniziale di equilibrio globale: ν_α .

Nel seguito utilizzeremo la seguente notazione: $\mathcal{M}_+ = \mathcal{M}_+(T^d)$ è lo spazio delle misure definite positive su T^d ; $\mathcal{M}_{+,1}$ è lo spazio delle misure positive con massa totale limitata da uno; $\mathcal{M}_{+,1}^0$ è lo spazio delle misure positive con massa limitata da uno ed assolutamente continue rispetto la misura di Lebesgue. Indichiamo poi con ω il generico elemento di $\mathcal{M}_{+,1}$ e, se è assolutamente continuo rispetto la misura di Lebesgue, indichiamo con θ la sua densità: $\omega(du) = \theta(u)du$. Analogamente indichiamo con $\pi(\cdot)$ il generico cammino in $D([0, T] \times \mathcal{M}_{+,1})$ e, se è assolutamente continuo rispetto la misura di Lebesgue, indichiamo con $\rho(\cdot, \cdot)$ la sua densità: $\pi_\tau(du) = \rho(\tau, u)du$.

Enunciamo subito il teorema che afferma la validità del principio di grandi deviazioni:

Proposizione 10. *Consideriamo il processo di esclusione semplice simmetrico con dinamica a primi vicini di generatore:*

$$(\Omega_N f)(\eta) = \frac{1}{2} \sum_{x \in T_N^d} \sum_{|y|=1} \eta(x)(1 - \eta(y))[f(\eta^{x,y}) - f(\eta)]$$

Indichiamo come al solito con P^N la distribuzione di probabilità sullo spazio dei cammini $D([0, T] \times \mathcal{A}_N)$ definita dallo stato iniziale di equilibrio ν_α e dalla dinamica generata da Ω_N . La misura empirica $\pi^N(\cdot)$ ci permette di passare dallo spazio delle configurazioni allo spazio $\mathcal{M}_+(T^d)$ delle misure positive su T^d ; indichiamo poi con Q^N la distribuzione di probabilità sullo spazio dei cammini $D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$ indotta dalla misura empirica. Allora la successione di distribuzioni di probabilità $\{Q^N\}$ verifica un principio di grandi deviazioni con tassi di decadimento $a_N = N^d$ e con un certo funzionale di grandi deviazioni $I(\cdot)$:

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} \log Q^N[C] \leq - \inf_{\pi(\cdot) \in C} I(\pi(\cdot)) ; \forall C \text{ chiuso} \quad (4.6)$$

$$\liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} \log Q^N[O] \geq - \inf_{\pi(\cdot) \in O} I(\pi(\cdot)) ; \forall O \text{ aperto} \quad (4.7)$$

Ci sono due contributi dello stesso ordine e distinti alla funzione di grandi deviazioni:

- un contributo *statico* $h(\pi_0)$ legato alle grandi deviazioni dello stato iniziale (a $t = 0$). Questa parte è molto facile da studiare perché si riduce a grandi deviazioni di variabili casuali indipendenti ed identicamente distribuite.
- c'è poi un contributo *dinamico* $I_0(\pi(\cdot))$ legato al carattere stocastico dell'evoluzione temporale del sistema. Questa è la parte il cui studio richiede maggiore fatica.

. Possiamo quindi scrivere:

$$I(\pi(\cdot)) = h(\pi_0) + I_0(\pi(\cdot))$$

Vediamo più in dettaglio come sono fatti i due termini.

A) *parte statica.*

Per ogni funzione continua $\gamma(\cdot) : T^d \rightarrow (0, 1)$ definiamo la funzione $h_\gamma : \mathcal{M}_{+,1} \rightarrow \mathbb{R}_+$ tale che:

$$h_\gamma(\omega) = \langle \omega, \log \frac{(1-\alpha)\gamma}{\alpha(1-\gamma)} \rangle + \langle \lambda, \log \frac{1-\gamma}{1-\alpha} \rangle \quad (4.8)$$

avendo indicato con $\langle \omega, f \rangle = \int_{T^d} \omega(du) f(u)$ e con $\lambda(\cdot)$ la misura di Lebesgue su T^d . Il funzionale $h(\cdot)$ risulta essere:

$$h(\omega) = \sup_{\gamma \in \mathcal{C}(T^d)} h_\gamma(\omega) \quad (4.9)$$

È facile verificare che $h_\gamma(\cdot)$ è lineare:

$$h_\gamma(a\omega + b\omega) = ah_\gamma(\omega) + bh_\gamma(\omega) ; \forall a, b \in \mathbb{R} , \forall \omega, \omega \in \mathcal{M}_+$$

e $h(\cdot)$ è convessa:

$$h(\alpha\omega + (1 - \alpha)\omega) \leq \alpha h(\omega) + (1 - \alpha)h(\omega)$$

e semicontinua dal basso:

$$\omega_n \xrightarrow{w} \omega \implies \liminf_{n \rightarrow \infty} h(\omega_n) \geq h(\omega)$$

B) *parte dinamica.*

Per ogni funzione $H(\cdot, \cdot) : [0, T] \times T^d \rightarrow \mathbb{R}$ differenziabile con continuità una volta rispetto al tempo e due volte rispetto allo spazio, definiamo il funzionale $l_H(\cdot) : D([0, T] \times \mathcal{M}_{+,1}) \rightarrow \mathbb{R}$ tale che:

$$l_H(\pi(\cdot)) = \langle \pi_T, H_T \rangle - \langle \pi_0, H_0 \rangle - \int_0^T d\tau \langle \pi_\tau, \partial_\tau H_\tau + \frac{1}{2} \nabla^2 H_\tau \rangle \quad (4.10)$$

ed il funzionale $J_H(\cdot) : D([0, T] \times \mathcal{M}_{+,1}^0) \rightarrow \mathbb{R}$ tale che:

$$J_H(\pi(\cdot)) = l_H(\pi(\cdot)) - \frac{1}{2} \int_0^T d\tau \int_{T^d} du \|(\vec{\nabla} H)(\tau, u)\|^2 F(\rho(\tau, u)) \quad (4.11)$$

con $F(\alpha) = \alpha(1 - \alpha)$. Valgono le seguenti proprietà :

1. $l_H(\pi(\cdot))$ è lineare nel senso che:

$$l_H(\alpha\pi(\cdot) + \beta\mu(\cdot)) = \alpha l_H(\pi(\cdot)) + \beta l_H(\mu(\cdot))$$

2. $J_H(\cdot)$ è convesso:

$$J_H(\alpha\pi(\cdot) + (1 - \alpha)\mu(\cdot)) \leq \alpha J_H(\pi(\cdot)) + (1 - \alpha)J_H(\mu(\cdot))$$

e semicontinuo dal basso:

$$\pi(\cdot)^n \xrightarrow{w} \pi(\cdot) \implies \liminf_{n \rightarrow \infty} J_H(\pi(\cdot)^n) \geq J_H(\pi(\cdot))$$

Estendiamo la definizione di J_H ai cammini $\pi(\cdot)$ non assolutamente continui rispetto la misura di Lebesgue ponendo $J_H(\pi(\cdot)) = \infty$ se $\pi(\cdot) \in D([0, T] \times \mathcal{M}_{+,1}) - D([0, T] \times \mathcal{M}_{+,1}^0)$. Il funzionale $I_0(\cdot)$ di grandi deviazioni risulta essere:

$$I_0(\pi(\cdot)) = \sup_{H \in C^{1,2}([0, T] \times T^d)} J_H(\pi(\cdot)) \quad (4.12)$$

idea della dimostrazione

Vediamo qual è l'idea della dimostrazione del principio di grandi deviazioni senza soffermarci sui dettagli tecnici (una dimostrazione completa si trova in [1]).

1) Una cosa molto utile da fare è cercare una famiglia di martingale positive, a media unitaria e funzioni della misura empirica. Supponiamo infatti che $\{e^{a_N I_\beta(\pi_{(\cdot)}^N)} ; \beta \in \mathcal{B}\}$ sia una famiglia di tale tipo. Sia $K \subset D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$ un compatto. Risulta allora:

$$\begin{aligned} Q^N[\pi_{(\cdot)}^N \in K] &= E_{Q^N}[e^{-a_N I_\beta(\pi_{(\cdot)}^N)} e^{a_N I_\beta(\pi_{(\cdot)}^N)} \mathbb{1}_K(\pi_{(\cdot)}^N)] \leq \\ &\leq e^{-a_N \inf_{\pi \in K} I_\beta(\pi_{(\cdot)})} E_{Q^N}[e^{a_N I_\beta(\pi_{(\cdot)}^N)}] = \end{aligned}$$

poiché per ipotesi $e^{a_N I_\beta(\pi_{(\cdot)}^N)}$ è a media unitaria

$$= e^{-a_N \inf_{\pi \in K} I_\beta(\pi_{(\cdot)})}$$

Dunque risulta:

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{a_N} \log Q^N[\pi_{(\cdot)}^N \in K] \leq - \inf_{\pi_{(\cdot)} \in K} I_\beta(\pi_{(\cdot)})$$

Questo è vero per ogni elemento della famiglia $\{e^{a_N I_\beta(\pi_{(\cdot)}^N)}\}$; quindi:

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{a_N} \log Q^N[K] \leq - \sup_{\beta \in \mathcal{B}} \inf_{\pi \in K} I_\beta(\pi_{(\cdot)})$$

A questo punto bisogna cercare di invertire $\sup_{\beta} \longleftrightarrow \inf_K$, utilizzando lemmi di minimax analoghi a quello visto alla fine del paragrafo precedente. Otteniamo quindi che un buon candidato a funzionale di grandi deviazioni è:

$$\sup_{\beta \in \mathcal{B}} I_\beta(\pi_{(\cdot)})$$

con tassi di decadimento a_N . Chiaramente ciò è vero solo se la famiglia di martingale scelta $\{e^{a_N I_\beta(\pi_{(\cdot)}^N)}\}$ è sufficientemente grande (altrimenti non vale la disuguaglianza opposta per gli insiemi aperti).

2) Dunque la parte cruciale è nella ricerca della famiglia di martingale $\{e^{a_N I_\beta(\pi_{(\cdot)}^N)}\}$. Una tecnica classica per costruire una famiglia abbastanza grande di martingale è basata su un'idea fisica, cioè nello studio del processo perturbato dalla presenza di un campo esterno. Fissiamo una funzione

$H \in C^{1,2}([0, T] \times T^d)$ e consideriamo il nuovo sistema dinamico di generatore $\Omega_{N,\tau}^H$:

$$(\Omega_{N,\tau}^H f)(\eta) = \frac{1}{2} \sum_{|y-x|=1} \eta(x)(1-\eta(y)) e^{H(\tau, \frac{y}{N}) - H(\tau, \frac{x}{N})} [f(\eta^{x,y}) - f(\eta)] \quad (4.13)$$

Questo è un processo di esclusione semplice non omogeneo nel tempo e con tassi di transizione:

$$c(x, x+z; \eta) \simeq \frac{1}{2} \eta(x)(1-\eta(x+z)) \left[1 + \frac{1}{N} \vec{\nabla} H(\tau, \frac{x}{N}) \right]$$

Cioè c'è una correzione di ordine $\frac{1}{N}$ sui tassi di transizione delle particelle (perturbazione) che fa sì che ogni particella tenda a saltare in direzione di $\vec{\nabla} H(\tau, \frac{x}{N})$; dunque le particelle tendono a portarsi verso i punti di massimo del campo H (che va visto come funzione di Liapunov). Indichiamo con P_H^N la probabilità sullo spazio dei cammini: $D([0, T] \times \mathcal{A}_N)$ definita dallo stato iniziale ν_α e dinamica generata da $\Omega_{N,\tau}^H$. È facile vedere che le derivate di Radom-Nikodim: $\frac{dP_H^N}{dP^N}(T)$ ristretta alla σ -algebra generata dai cammini fino all'istante T , sono martingale a media unitaria. Tuttavia se prendiamo solo queste come famiglie di martingale perdiamo il contributo statico delle grandi deviazioni. Dunque consideriamo la probabilità $P_{H,\gamma}^N$ sullo spazio dei cammini $D([0, T] \times \mathcal{A}_N)$ definita dal nuovo stato iniziale di parametro lentamente variabile $\gamma(\cdot)$ (funzione continua su T^d): $\nu_{\gamma(\cdot)}^N$, e dalla dinamica generata da $\Omega_{N,\tau}^H$. Un ottimo candidato come famiglia di martingale a media unitaria, che ci permette di trovare il funzionale di grandi deviazioni, è:

$$\left\{ \frac{dP_{H,\gamma}^N}{dP^N}(T) ; H \in C^{1,2}([0, T] \times T^d), \gamma \in C(T^d) \right\}$$

che si fattorizza in:

$$\frac{dP_{H,\gamma}^N}{dP^N}(T) = \frac{d\nu_{\gamma(\cdot)}^N}{d\nu_\alpha^N} \frac{dP_H^N}{dP^N}(T)$$

3) In base a quanto detto prima il prossimo passo sarà cercare esplicitamente tali martingale, esprimendole come funzioni della misura empirica.

Per la parte statica si fa facilmente, ottenendo proprio:

$$\frac{d\nu_\gamma^N}{d\nu_\alpha^N} = \exp\{-N^d h_\gamma(\pi_0)\}$$

Per la parte dinamica questo passo è più faticoso; da un calcolo diretto effettuato utilizzando i risultati in app.B si ottiene:

$$\frac{dP_H^N}{dP^N}(T) = \exp N^d \{ \langle \pi_T^N, H_T \rangle - \langle \pi_0^N, H_0 \rangle +$$

$$\begin{aligned}
& - \int_0^T ds \langle \pi_s^N, \partial_s H_s + \frac{1}{2} \nabla^2 H_s \rangle + \\
& \left. - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \frac{1}{N^d} \sum_{x \in T^d} \int_0^T ds (\partial_u H)^2(s, \frac{x}{N}) \eta_s(x) (1 - \eta_s(x + e_i)) + O(\frac{1}{N}) \right\}
\end{aligned}$$

Il problema è che tale espressione non è funzione della misura empirica; dobbiamo quindi cercare di riscrivere l'ultimo termine integrale:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \frac{1}{N^d} \sum_{x \in T^d} \int_0^T ds (\partial_u H)^2(s, \frac{x}{N}) \eta_s(x) (1 - \eta_s(x + e_i))$$

come funzione della misura empirica a meno di correzioni *superesponenzialmente piccole* (cioè che non modificano il funzionale di grandi deviazioni). A tale scopo bisogna effettuare una sostituzione analoga a quella utilizzata per verificare il comportamento idrodinamico di sistemi gradiente (cf. cap.3). L'idea è quella di sostituire:

$$\sum_{x \in T^d} \eta_{N^2 s}(x) (1 - \eta_{N^2 s}(x + e_i)) G(\frac{x}{N}) \longrightarrow \sum_{x \in T^d} \eta_{N^2 s}^{\varepsilon N}(x) (1 - \eta_{N^2 s}^{\varepsilon N}(x)) G(\frac{x}{N})$$

avendo indicato con $\eta^{\varepsilon N}$ la densità media su una scatola macroscopica piccola di lato εN :

$$\eta_{N^2 s}^{\varepsilon N}(x) = \frac{1}{(2\varepsilon N + 1)^d} \sum_{|y-x| \leq \varepsilon N} \eta_{N^2 s}(y)$$

Quindi si può intuire che sia lecito approssimare:

$$\eta_{N^2 s}^{\varepsilon N}(x) \sim \rho(s, \frac{x}{N})$$

(densità media in $\frac{x}{N}$ all'istante macroscopico s). Con tali ragionamenti si arriva alla conclusione che:

$$\frac{dP_H^N}{dP^N}(T) = \exp N^d J_H(\pi_{(\cdot)}^N)$$

a meno di correzioni superesponenzialmente piccole.

4) In conclusione un buon candidato a funzionale di grandi deviazioni risulta:

$$I(\pi_{(\cdot)}) = \sup_{\gamma_{(\cdot)} \in C(T^d)} h_\gamma(\pi_0) + \sup_{H \in C^{1,2}([0,T] \times T^d)} J_H(\pi_{(\cdot)})$$

(che è proprio quello che volevamo dimostrare).

5) con queste idee si riesce a verificare la stima dall'alto per le probabilità di grandi deviazioni:

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} \log Q^N[\pi_{(\cdot)} \in C] \leq - \inf_{\pi_{(\cdot)} \in C} I(\pi_{(\cdot)}) ; \forall C \text{ chiuso}$$

Resta da verificare la stima dal basso:

$$\liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} \log Q^N[\pi_{(\cdot)} \in O] \geq - \inf_{\pi_{(\cdot)} \in O} I(\pi_{(\cdot)}) ; \forall O \text{ aperto}$$

Come prima cosa si verifica che il processo di esclusione semplice perturbato ha comportamento idrodinamico; cioè la successione di probabilità Q_H^N sullo spazio dei camini $D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$ converge debolmente ad una probabilità Q_H^* concentrata su un cammino deterministico $\pi^H(\tau, du)$ (soluzione debole dell'equazione idrodinamica). Si fa vedere poi che l'entropia relativa di P_H^N rispetto a P^N , definita da:

$$H(P_H^N | P^N) = E_{P_H^N} \left[\log \frac{dP_H^N}{dP^N} \right]$$

soddisfa:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} H(P_H^N | P^N) = I(\pi^H)$$

A questo punto, dato un generico aperto $O \subset D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$ contenente $\pi^H(\tau, du)$, risulta:

$$\frac{1}{N^d} \log Q^N[O] = \frac{1}{N^d} \log E_{Q_H^N} \left[\frac{dQ^N}{dQ_H^N} \mathbb{1}_{\{\pi_{(\cdot)} \in O\}} \right]$$

se $\pi_{(\cdot)}^H \in O$, il vincolo $\mathbb{1}_{\{\pi_{(\cdot)} \in O\}}$ è ininfluenza poiché Q_H^N è concentrato su π^H per grandi N ; inoltre possiamo sostituire $\frac{dQ^N}{dQ_H^N}(T) \rightarrow \frac{dP^N}{dP_H^N}(T)$ poiché abbiamo espresso la derivata di Radon-Nikodim $\frac{dP_H^N}{dP^N}(T)$ come funzione della misura empirica. Risulta quindi:

$$\frac{1}{N^d} \log Q^N[O] \simeq \frac{1}{N^d} \log E_{P_H^N} \left[\frac{dP^N}{dP_H^N}(T) \right] \geq$$

per la disuguaglianza di Jensen:

$$\geq \frac{1}{N^d} E_{P_H^N} \left[\log \frac{dP^N}{dP_H^N}(T) \right] = - \frac{1}{N^d} H(P_H^N | P^N) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} -I(\pi_{(\cdot)}^H)$$

Dunque abbiamo verificato che:

$$\liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Nd} \log Q^N[\pi(\cdot) \in O] \geq - \inf_{H \in C^{1,2}([0,T] \times T^d) : \pi^H \in O} I(\pi^H(\cdot)) ; \forall O \text{ aperto}$$

Per concludere la dimostrazione del principio di grandi deviazioni resta da verificare che la collezione delle soluzioni dell'equazione idrodinamica dei sistemi perturbati: $\{\pi^H ; H \in C^{1,2}([0,T] \times T^d)\}$ è densa nello spazio dei cammini $D([0,T] \times \mathcal{M}_+)$

4.4 Applicazioni fisiche dello studio delle grandi deviazioni

Una volta effettuato lo studio delle grandi deviazioni di un sistema di particelle interagenti è possibile rispondere a domande fisicamente interessanti. In particolare si possono verificare le relazioni di reciprocità di Onsager e la relazione di time reversal di Onsager-Machlup.

A) Relazioni di reciprocità di Onsager

Per parlare di relazioni di Onsager bisogna considerare modelli con più processi dissipativi. Consideriamo per semplicità un modello con due tipi di particelle. Sia $\vec{\rho}(\tau, u) = (\rho_1(\tau, u), \rho_2(\tau, u))$ il profilo di densità macroscopica dei due tipi di particelle in posizione u all'istante τ . Per un sistema diffusivo ci aspettiamo che l'evoluzione di tale profilo sia descritta da un'equazione idrodinamica di tipo equazione del calore:

$$\partial_\tau \rho_a(\tau, u) = \partial_u \left[\sum_{b=1,2} D_{ab}(\vec{\rho}(\tau, u)) \partial_u \rho_b(\tau, u) \right] \quad (4.14)$$

essendo $D_{ab}(\vec{\rho})$ la matrice di diffusione.

Per come sono state ricavate (in Introduzione) le relazioni di Onsager, appare chiaro che sono strettamente legate allo studio delle fluttuazioni dall'equilibrio. Sia $I(\vec{\rho}(\cdot))$ il funzionale di grandi deviazioni della misura empirica dal limite idrodinamico. In qualche modo

$$\exp\{-NI(\vec{\rho}(\cdot))\}$$

rappresenta la probabilità che l'evoluzione macroscopica del sistema sia descritta dalla traiettoria $\vec{\rho}(\tau, u)$ delle densità. Supponiamo che all'istante $\tau = -\infty$ il sistema sia in equilibrio ed imponiamo che all'istante $\tau = 0$ sia

fluttuato in una situazione di non-equilibrio descritta dal profilo di equilibrio locale $\vec{\gamma}(u)$. La probabilità che avvenga tale fluttuazione è circa:

$$\exp\{-N \inf_{\vec{\rho}(\cdot, \cdot) \in \mathcal{G}_{\vec{\gamma}}} I(\vec{\rho}(\cdot))\}$$

essendo $\mathcal{G}_{\vec{\gamma}}$ l'insieme delle traiettorie che verificano i vincoli: $\vec{\rho}(-\infty, u) = \vec{\rho}_0$; $\vec{\rho}(0, u) = \vec{\gamma}(u)$. Il funzionale:

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = \inf_{\vec{\rho}(\cdot, \cdot) \in \mathcal{G}_{\vec{\gamma}}} I(\vec{\rho}(\cdot))$$

può quindi essere identificato con l'entropia dello stato di profilo $\vec{\gamma}(u)$. È ragionevole supporre che tale funzionale sia integrale di una funzione densità di entropia:

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = \int s(\vec{\gamma}(u)) du$$

il che equivale ad assegnare un'entropia $s(\vec{\gamma}(u)) du$ ad ogni elemento infinitesimo del sistema. La matrice R_{ab} è definita tramite:

$$R_{ab}^{-1}(\vec{\rho}) = \frac{\partial^2}{\partial \rho_a \partial \rho_b} s(\vec{\rho}) \quad (4.15)$$

ed i coefficienti di trasporto di Onsager, in analogia con la relazione (10), possono essere definiti tramite:

$$L_{ab}(\vec{\rho}) = \sum_c D_{ac}(\vec{\rho}) R_{cb}(\vec{\rho}) \quad (4.16)$$

Le relazioni di reciprocità di Onsager sono verificate se la matrice dei coefficienti di trasporto è simmetrica:

$$L_{ab} = L_{ba}$$

D. Gabrielli, G. Jona Lasinio, C. Landim e M. E. Vares hanno mostrato (cf. [12], [13] e [14]) che la reversibilità della dinamica microscopica non è condizione necessaria per la validità delle relazioni di Onsager. In particolare queste sono state verificate per un modello zero range di equilibrio, con due tipi di particelle e con dinamica non simmetrica (quindi non reversibile, cioè con uno stato di equilibrio che non verifica il bilancio dettagliato).

A) *Relazione di time reversal di Onsager-Machlup*

Consideriamo per semplicità un modello stocastico con un unico tipo di particelle interagenti e sia $I(\rho(\cdot, \cdot))$ il funzionale di grandi deviazioni della misura empirica dal limite idrodinamico.

La relazione di Onsager-Machlup si esprime dicendo che il punto di minimo del funzionale $I(\rho(\cdot, \cdot))$ sottoposto ai vincoli:

$$\rho(-\infty, u) = \rho_0$$

$$\rho(0, u) = \gamma(u)$$

cioè la traiettoria più probabile che genera a $t = 0$ la fluttuazione descritta dal profilo $\gamma(u)$, si ottiene sottoponendo a time reversal la soluzione dell'equazione idrodinamica:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \partial_u [D(\rho(\tau, u)) \partial_u \rho(\tau, u)]$$

con condizione iniziale $\rho(0, u) = \gamma(u)$.

Negli stessi scritti [12], [13] e [14] D. Gabrielli, G. Jona Lasinio, C. Landim e M. E. Vares hanno verificato la relazione di time reversal di Onsager-Machlup per una classe di sistemi di particelle interagenti di equilibrio con dinamica non reversibile. Quindi, così come per le relazioni di simmetria di Onsager, anche per il principio di Onsager-Machlup la reversibilità della dinamica microscopica non è una condizione necessaria.

È interessante capire meglio quali sono le condizioni sufficienti a garantire la validità delle relazioni di Onsager e di Onsager-Machlup. In particolare nulla è stato detto riguardo la validità di tali relazioni in modelli stocastici fuori dall'equilibrio. Nei prossimi capitoli si cercherà una generalizzazione in tal senso. Studieremo un modello con interazioni di tipo zero range a contatto con delle riserve di particelle che forzano il sistema fuori dall'equilibrio.

Capitolo 5

Modello zero range fuori dall'equilibrio

Analizziamo un sistema di particelle interagenti di tipo zero range (con interazioni a contatto), tenuto fuori dall'equilibrio da vincoli al bordo, cioè da due riserve di particelle all'estremità del volume che contiene il gas. Questo modello è stato introdotto da A. De Masi e P. Ferrari nel 1984 ([15]) i quali hanno trovato lo stato stazionario di non-equilibrio e ne hanno verificato il comportamento idrodinamico. In questo capitolo vengono generalizzati tali risultati: cercheremo l'espressione del processo aggiunto rispetto lo stato stazionario; quindi troveremo l'equazione idrodinamica sia del processo diretto che del processo aggiunto.

Abbiamo già detto che in un recente scritto di D. Gabrielli, G. Jonas-Lasinio e C. Landim (cf. [14]) si mostra che nel modello zero range di equilibrio (cioè senza vincoli al bordo) con dinamica non simmetrica (e quindi non reversibile) valgono ancora le relazioni di simmetria di Onsager ed il principio di Onsager-Machlup; ciò fa pensare che per molti aspetti l'ipotesi che la dinamica sia simmetrica è ininfluente. Alla fine del capitolo quindi generalizzeremo tutta la trattazione per un modello diffusivo non simmetrico.

È rimandato al capitolo successivo lo studio delle grandi deviazioni di questo modello.

5.1 Definizione del modello

spazio

Definiamo un modello di particelle interagenti su reticolo unidimensionale $\Lambda_L = \{-L, -L+1, \dots, 0, 1, \dots, L-1, L\}$; in ogni punto x del reticolo ci può essere un numero arbitrario di particelle $\eta(x) \in \mathbb{N}$. Quindi lo spazio di tutte

le configurazioni possibili del sistema è: $\mathcal{A}_L = \mathbb{N}^{\Lambda_L}$. Gli elementi di \mathcal{A}_L sono cioè le configurazioni $\eta = (\eta(-L), \dots, \eta(L-1), \eta(L))$ in cui viene specificato il numero di particelle presenti in ciascun sito del reticolo. Definiamo infine lo spazio dei cammini $E = D([0, T] \times \mathcal{A}_L)$ cioè la collezione delle funzioni $\eta_t : [0, T] \rightarrow \mathcal{A}_L$ continue a sinistra (non chiediamo la continuità perché siamo su spazio discreto e definiamo una dinamica a salti).

dinamica

L'evoluzione del modello è definita da una dinamica reversibile all'interno e da un contatto con delle riserve di particelle ai bordi.

All'interno del reticolo le particelle possono saltare solo in un sito vicino, verso destra e verso sinistra, con la stessa probabilità (dinamica simmetrica a primi vicini). Le interazioni tra particelle sono solo locali (interazione zero range); cioè il tasso con cui una particella del sito x salta verso $(x+1)$ o verso $(x-1)$ dipende solo dal numero di particelle $\eta(x)$ presenti nel sito x . Tale tasso di transizione è definito dalla funzione: $g : \mathbb{N} \rightarrow R_+$, e soddisfa per ipotesi le proprietà di:

1. monotonia: $g(k+1) \geq g(k)$; $g(0) = 0$
2. Lipschitzianità: $\sup_k [g(k+1) - g(k)] < \infty$

Il sistema inoltre interagisce con due riserve di particelle, in posizioni $+L$ e $-L$ di potenziali chimici rispettivamente $\lambda_+ = \log p_+$ e $\lambda_- = \log p_-$. Ciò vuol dire che le particelle ai bordi entrano con un tasso $\frac{1}{2}g(\pm L)$ mentre escono con un tasso $\frac{1}{2}g(\eta(\pm L))$

In conclusione il generatore della dinamica Ω_L è definito da:

$$\begin{aligned} (\Omega_L f)(\eta) &= \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta(x)) [f(\eta^{x,x+1}) + f(\eta^{x,x-1}) - 2f(\eta)] + \\ &+ \frac{1}{2} p_+ [f(\eta^{+L}) - f(\eta)] + \frac{1}{2} p_- [f(\eta^{-L}) - f(\eta)] \end{aligned} \quad (5.1)$$

abbiamo utilizzato la seguente notazione:

$\eta^{x,y}$ con $x, y \in \Lambda_L$, è la configurazione che si ottiene partendo da η a seguito del passaggio di una particella da x in y ;

$$\eta^{x,y}(z) = \begin{cases} \eta(x) - 1 & \text{se } z = x \\ \eta(y) + 1 & \text{se } z = y \\ \eta(z) & \text{se } z \neq x, y \end{cases}$$

$\eta^{\pm L, \pm(L+1)}$, è la configurazione che si ottiene a partire da η al seguito dell'uscita di una particella dal reticolo attraverso il bordo $\pm L$;

$$\eta^{\pm L, \pm(L+1)}(z) = \begin{cases} \eta(\pm L) - 1 & \text{se } z = \pm L \\ \eta(z) & \text{se } z \neq \pm L \end{cases}$$

$\eta^{\pm L}$, è la configurazione che si ottiene a partire da η al seguito dell'entrata di una particella nel reticolo attraverso il bordo $\pm L$;

$$\eta^{\pm L}(z) = \begin{cases} \eta(\pm L) + 1 & \text{se } z = \pm L \\ \eta(z) & \text{se } z \neq \pm L \end{cases}$$

Da come è stato definito il modello capiamo che:

1. per qualunque scelta dei potenziali chimici p_+ e p_- il sistema non è conservativo poiché le particelle possono entrare ed uscire dal reticolo (dunque non c'è nessuna grandezza conservata)
2. Per $p_+ = p_-$ il sistema si trova all'equilibrio. Invece per $p_+ \neq p_-$ è mantenuto fuori dall'equilibrio dal gradiente di potenziale chimico delle riserve di particelle.

misure invarianti

Il fatto che non ci sono grandezze conservate implica che c'è un'unica classe indecomponibile di stati comunicanti nello spazio \mathcal{A}_L (cf. capitolo 1). In conseguenza di ciò ci aspettiamo che esista un unico stato stazionario, cioè un'unica misura di probabilità μ_L sullo spazio delle configurazioni che soddisfa la relazione di stazionarietà:

$$(\mu_L \Omega_L)(\eta) = 0$$

Tale misura è una misura prodotto:

$$\mu_L[\eta] = \prod_{x \in \Lambda_L} \mu_L[\eta(x)] \quad (5.2)$$

con marginali:

$$\mu_L[\eta(x) = k] = \frac{p_L(x)^k}{g(k)!} \frac{1}{\mathcal{Z}(p_L(x))}$$

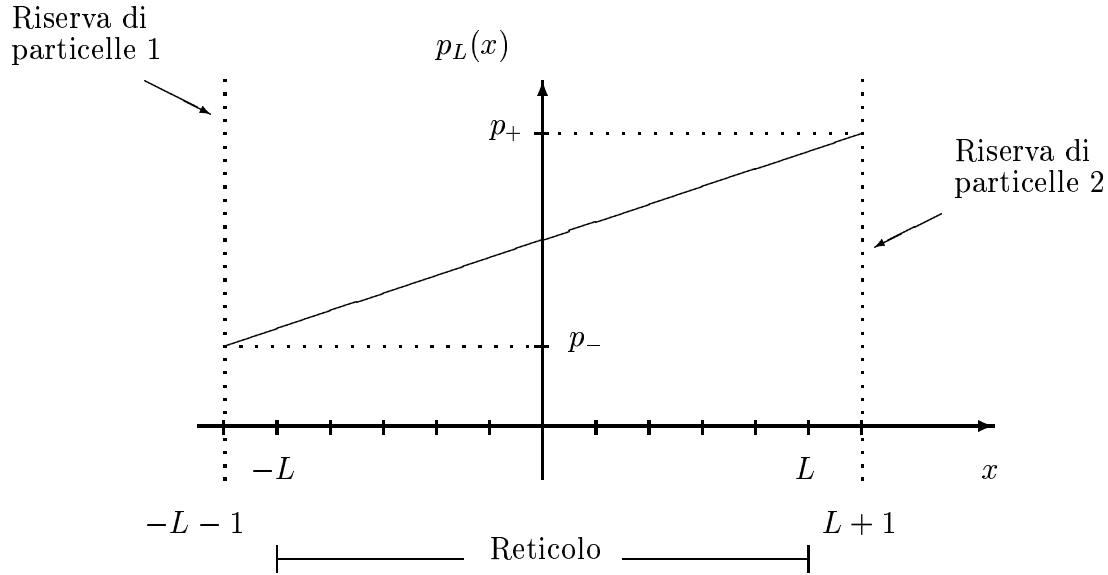
essendo \mathcal{Z} la funzione di partizione (costante di normalizzazione):

$$\mathcal{Z}(p) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \frac{p^k}{g(k)!}$$

$p_L(x)$ è il profilo della fugacità in situazione stazionaria, cioè un profilo lineare tra p_- (in $-L - 1$) e p_+ (in $L + 1$):

$$p_L(x) = \frac{p_+ - p_-}{2(L + 1)}x + \frac{p_+ + p_-}{2}$$

(In qualche modo possiamo immaginare che le riserve di particelle sono situate in posizione $\pm(L + 1)$ ove risulta fissato il valore del potenziale chimico).



La verifica che μ_L è l'unica misura stazionaria del sistema si può trovare in [15].

Indicheremo inoltre con $\{\mu_p, p \in \mathbb{R}^+\}$, la collezione di misure di equilibrio a fugacità fissata del processo zero range di equilibrio (cf. capitolo 2):

$$\begin{aligned} \mu_p(\eta) &= \prod_{x \in \Lambda_L} \mu_p[\eta(x)] \\ \mu_p[\eta(x) = k] &= \frac{p^k}{g(k)!} \frac{1}{\mathcal{Z}(p)} \end{aligned} \quad (5.3)$$

e con $\{\nu_\alpha, \alpha \in \mathbb{R}^+\}$, la collezione di misure di equilibrio a densità fissata:

$$\nu_\alpha[\cdot] = \mu_{\varphi(\alpha)}[\cdot] \quad (5.4)$$

$$\varphi(\alpha) = \nu_\alpha[g(\eta(0))] \quad \text{ovvero} \quad \alpha = \mu_{\varphi(\alpha)}[\eta(0)]$$

5.2 Generatore Aggiunto

Una verifica indiretta del fatto che μ_L è una misura stazionaria si ha cercando l'operatore aggiunto del generatore Ω_L , che indicheremo con Ω_L^* , e verificando che è un generatore (cf. cap.1), cioè soddisfa le relazioni (1.9):

1. $\Omega_L(\eta, \zeta) \geq 0$
2. $\Omega_L(\eta, \eta) < 0$
3. $(\Omega_L \mathbb{1})(\eta) = 0$, essendo $\mathbb{1}(\cdot)$ la funzione unitaria.

L'operatore aggiunto è definito da:

$$\langle h, \Omega_L f \rangle_{\mu_L} = \langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} \quad (5.5)$$

per ogni coppia di funzioni cilindriche $h(\cdot)$ ed $f(\cdot)$ definite in \mathcal{A}_L , essendo $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mu_L}$ il prodotto scalare definito dalla misura stazionaria μ_L .

Con un calcolo diretto a partire dalla definizione si ottiene, per il generatore aggiunto, la seguente espressione:

$$\begin{aligned} (\Omega_L^* f)(\eta) &= \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta(x)) \left\{ \frac{p_L(x+1)}{p_L(x)} [f(\eta^{x,x+1}) - f(\eta)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{p_L(x-1)}{p_L(x)} [f(\eta^{x,x-1}) - f(\eta)] \right\} + \\ &\quad + \frac{1}{2} p_L(L) [f(\eta^{+L}) - f(\eta)] + \frac{1}{2} p_L(-L) [f(\eta^{-L}) - f(\eta)] \end{aligned} \quad (5.6)$$

Appare evidente dalla forma esplicita che Ω_L^* è un generatore; questo ci assicura che μ_L è una misura stazionaria.

Risulta però:

$$\Omega_L^* \neq \Omega_L;$$

questo vuol dire che μ_L non è una misura reversibile, cioè non vale il bilancio dettagliato. In particolare Ω_L^* differisce da Ω_L per i fattori $\frac{p_L(x+1)}{p_L(x)}$ e $\frac{p_L(x-1)}{p_L(x)}$ che rendono la dinamica asimmetrica; questo esprime il fatto che nel processo aggiunto le particelle tendono ad andare in direzione della riserva di particelle con potenziale chimico maggiore (contro il gradiente di potenziale chimico). Solo per $p_+ = p_-$ (cioè all'equilibrio) il generatore viene a coincidere con il generatore diretto e la misura μ_L diventa reversibile.

Calcolo esplicito del generatore aggiunto

Sostituendo nella relazione (5.5) l'espressione esplicita del generatore diretto si ha:

$$\begin{aligned} \langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} = \langle h, \Omega_L f \rangle_{\mu_L} = \sum_{\eta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\eta) h(\eta) \left\{ \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda_L} g(\eta(x)) [f(\eta^{x, x+1}) + \right. \\ \left. + f(\eta^{x, x-1}) - 2f(\eta)] + \frac{1}{2} p_+ [f(\eta^L) - f(\eta)] + \frac{1}{2} p_- [f(\eta^{-L}) - f(\eta)] \right\} \end{aligned}$$

Nell'ultimo membro consideriamo separatamente i vari termini. A seconda dell'argomento della $f(\cdot)$ si effettua il cambio di variabile $\zeta = \eta^{x, x \pm 1}$ o $\zeta = \eta^{\pm L}$ e si somma sulle configurazioni ζ anziché η . Si ottiene in questo modo:

$$\begin{aligned} \langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} = \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{L-1} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta^{x+1, x}) h(\zeta^{x+1, x}) g(\zeta^{x+1, x}(x)) f(\zeta) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta^L) h(\zeta^{x+1, x}) g(\zeta^L(L)) f(\zeta) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{x=-L+1}^L \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta^{x-1, x}) h(\zeta^{x-1, x}) g(\zeta^{x-1, x}(x)) f(\zeta) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta^{-L}) h(\zeta^{-L}) g(\zeta^{-L}(-L)) f(\zeta) + \\ - \frac{2}{2} \sum_{x=-L}^L \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) h(\zeta) g(\zeta(x)) f(\zeta) + \\ + \frac{1}{2} p_+ \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta^{L, L+1}) h(\zeta^{L, L+1}) f(\zeta) - \frac{1}{2} p_+ \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) h(\zeta) f(\zeta) + \\ + \frac{1}{2} p_- \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta^{-L, -(L+1)}) h(\zeta^{-L, -(L+1)}) f(\zeta) - \frac{1}{2} p_- \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) h(\zeta) f(\zeta) \end{aligned} \quad (5.7)$$

A partire dalla definizione della misura stazionaria μ_L è facile verificare le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned}\mu_L(\zeta^{x+1,x}) &= \mu_L(\zeta) \frac{g(\zeta(x+1))}{g(\zeta(x))+1} \frac{p_L(x)}{p_L(x+1)} \text{ se } x \leq L-1 \\ \mu_L(\zeta^{x-1,x}) &= \mu_L(\zeta) \frac{g(\zeta(x-1))}{g(\zeta(x))+1} \frac{p_L(x)}{p_L(x-1)} \text{ se } x \geq -L+1 \\ \mu_L(\zeta^L) &= \mu_L(\zeta) \frac{p_L(L)}{g(\zeta(L))+1} \\ \mu_L(\zeta^{-L}) &= \mu_L(\zeta) \frac{p_L(-L)}{g(\zeta(-L))+1} \\ \mu_L(\zeta^{L,L+1}) &= \mu_L(\zeta) \frac{g(\zeta(L))}{p_L(L)} \\ \mu_L(\zeta^{-L,-(L+1)}) &= \mu_L(\zeta) \frac{g(\zeta(-L))}{p_L(-L)}\end{aligned}$$

Osserviamo inoltre che:

$$\begin{aligned}\zeta^{x+1,x}(x) &= \zeta(x) + 1 \text{ se } x \neq L \\ \zeta^{x-1,x}(x) &= \zeta(x) + 1 \text{ se } x \neq -L \\ \zeta^L(L) &= \zeta(L) + 1 \\ \zeta^{-L}(-L) &= \zeta(-L) + 1\end{aligned}$$

Utilizzando tali identità la relazione (5.7) assume la forma:

$$\begin{aligned}\langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} &= \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{L-1} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) g(\zeta(x+1)) \frac{p_L(x)}{p_L(x+1)} f(\zeta) h(\zeta^{x+1,x}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{x=-L+1}^L \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) g(\zeta(x-1)) \frac{p_L(x)}{p_L(x-1)} f(\zeta) h(\zeta^{x-1,x}) + \\ &- \frac{2}{2} \sum_{x=-L}^L \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) g(\zeta(x)) f(\zeta) h(\zeta) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) g(\zeta(L)) \frac{p_+}{p_L(L)} f(\zeta) h(\zeta^{L,L+1}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) g(\zeta(-L)) \frac{p_-}{p_L(-L)} f(\zeta) h(\zeta^{-L,-(L+1)}) +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\frac{1}{2} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) p_L(L) f(\zeta) h(\zeta^L) + \frac{1}{2} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) p_L(-L) f(\zeta) h(\zeta^{-L}) + \\
& -\frac{1}{2} p_+ \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) f(\zeta) h(\zeta) - \frac{1}{2} p_- \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) f(\zeta) h(\zeta) \quad (5.8)
\end{aligned}$$

Nei primi due termini effettuiamo i cambi di variabile $y = x + 1$ e $y = x - 1$ rispettivamente. Ci accorgiamo inoltre che i termini mancanti nelle prime due sommatorie sono proprio il IV e V termine, in quanto $p_L(L + 1) = p_+$ e $p_L(-(L + 1)) = p_-$. La relazione (5.8) si riscrive dunque così:

$$\begin{aligned}
\langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} &= \frac{1}{2} \sum_{y=-L}^L \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) g(\zeta(y)) \frac{p_L(y+1)}{p_L(y)} f(\zeta) h(\zeta^{y,y+1}) + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{y=-L}^L \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) g(\zeta(y)) \frac{p_L(y-1)}{p_L(y)} f(\zeta) h(\zeta^{y,y-1}) + \\
& - \frac{2}{2} \sum_{y=-L}^L \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) g(\zeta(y)) f(\zeta) h(\zeta) + \\
& + \frac{1}{2} p_L(L) \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) f(\zeta) h(\zeta^L) + \frac{1}{2} p_L(-L) \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) f(\zeta) h(\zeta^{-L}) + \\
& - \frac{p_+ + p_-}{2} \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) f(\zeta) h(\zeta)
\end{aligned}$$

Sfruttiamo ora la linearità del profilo stazionario $p_L(\cdot)$ sostituendo:

$$\begin{aligned}
2 &= \frac{p_L(y-1) + p_L(y+1)}{p_L(y)} \quad \text{nel III termine} \\
p_+ + p_- &= p_L(L) + p_L(-L) \quad \text{nell'ultimo termine}
\end{aligned}$$

Con qualche manipolazione algebrica si arriva a:

$$\begin{aligned}
\langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} &= \sum_{\zeta \in \mathcal{A}_L} \mu_L(\zeta) f(\zeta) \left\{ \frac{1}{2} \sum_{y=-L}^L g(\zeta(y)) \left[\frac{p_L(y+1)}{p_L(y)} (h(\zeta^{y,y+1}) - h(\zeta)) + \right. \right. \\
& + \left. \frac{p_L(y-1)}{p_L(y)} (h(\zeta^{y,y-1}) - h(\zeta)) \right] + \frac{1}{2} p_L(L) (h(\zeta^L) - h(\zeta)) + \\
& \left. + \frac{1}{2} p_L(-L) (h(\zeta^{-L}) - h(\zeta)) \right\}
\end{aligned}$$

da cui si ottiene l'espressione (5.6) del generatore aggiunto.

5.3 Equazione Idrodinamica

Cerchiamo ora l'equazione idrodinamica del processo diretto e del processo aggiunto; per fare ciò supponiamo che il modello abbia un comportamento idrodinamico e ci limitiamo a cercare l'equazione idrodinamica seguendo le tecniche standard discusse nel capitolo 3. Studiamo sia il processo diretto, cioè generato da Ω_L , sia il processo aggiunto, cioè generato da Ω_L^* .

A) processo diretto

La prima cosa che bisogna fare per trovare l'equazione idrodinamica di un sistema diffusivo di particelle interagenti è vedere se è di tipo gradiente; ovvero se la densità di corrente tra due siti vicini può essere scritta nella forma (3.10):

$$j(x, x+1; \eta) = D_{x+1}h(\eta) - D_x h(\eta)$$

essendo $h(\eta)$ una funzione cilindrica nello spazio delle configurazioni e D_x l'operatore di traslazione spaziale. In tal caso la proposizione 8 del capitolo 3 ci assicura che l'equazione idrodinamica è l'equazione del calore:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u [D(\rho(\tau, u)) \partial_u \rho(\tau, u)] \quad (5.9)$$

con coefficiente di diffusione:

$$D(\rho) = -2 \frac{d}{d\rho} \nu_\rho [h(\eta)] \quad (5.10)$$

A partire dalla definizione di densità di corrente, espressa dalla relazione:

$$\Omega_L \eta(x) = j_\eta(x-1, x) - j_\eta(x, x+1) \quad (5.11)$$

si ottiene per il processo diretto:

$$j_\eta(x, x \pm 1) = \frac{1}{2} [g(\eta(x)) - g(\eta(x \pm 1))] \quad -L < x < L \quad (5.12)$$

e tale relazione si estende anche ai siti reticolari $x = \pm L$ pur di identificare:

$$g(\eta(L+1)) =: p_+ \quad g(\eta(-L-1)) =: p_- \quad (5.13)$$

(Ricordiamo che il reticolo è definito tra $-L$ e $+L$, quindi $\eta(\pm(L+1))$ non sono proprio definiti). La relazione (5.12) garantisce che il processo diretto è un sistema gradiente con funzione $h(\eta)$:

$$h(\eta) = -\frac{1}{2} g(\eta(0)) \quad (5.14)$$

dunque ci aspettiamo che l'equazione idrodinamica sia proprio l'equazione del calore (5.9) con coefficiente di diffusione definito dalle relazioni (5.10) e (5.14):

$$D(\rho) = -2 \frac{d}{d\rho} \nu_\rho \left[-\frac{1}{2} g(\eta(0)) \right] = \frac{d}{d\rho} \varphi(\rho)$$

Le identificazioni (5.13) sono indice della necessità di imporre dei vincoli sul valore del potenziale chimico al bordo del reticolo:

$$\varphi(\rho(\tau, \pm 1)) = p_\pm \quad (5.15)$$

Possiamo quindi concludere che l'evoluzione macroscopica del sistema è definita dall'equazione parabolica (5.9) supportata dai vincoli al bordo (5.15).

B) processo aggiunto

Per quanto riguarda il processo aggiunto si trova la seguente espressione per la densità di corrente (che indichiamo con j^* per distinguerla da quella del processo diretto):

$$j_\eta^*(x, x \pm 1) = \frac{1}{2} \left[g(\eta(x)) \frac{p_L(x \pm 1)}{p_L(x)} - g(\eta(x \pm 1)) \frac{p_L(x)}{p_L(x \pm 1)} \right] \quad -L < x < L \quad (5.16)$$

anche tale espressione si estende ai siti di bordo $x = \pm L$ pur di identificare:

$$g(\eta(\pm(L+1))) =: p_\pm$$

Anche in questo caso dunque ci aspettiamo che l'equazione idrodinamica, qualunque essa sia, debba essere supportata dai vincoli al bordo sulla fugacità:

$$\varphi(\rho(\tau, \pm 1)) = p_\pm$$

Tuttavia dalla relazione (5.16) risulta chiaramente che la corrente $j_\eta^*(x, x+1)$ non può essere espressa nella forma (3.10) a causa dei fattori $\frac{p_L(x \pm 1)}{p_L(x)}$, funzioni della posizione x . Dunque il sistema non è di tipo gradiente e per trovare l'equazione idrodinamica aggiunta non esiste un metodo generale (noto solo per sistemi gradiente). Il processo aggiunto però è un caso particolarmente semplice di sistema non gradiente e l'equazione idrodinamica si riesce a trovare con un procedimento analogo a quello utilizzato nel caso di sistemi gradiente (cf. capitolo 3).

Vediamo ora i passaggi fondamentali per ricavare l'equazione idrodinamica aggiunta rimandando alla fine del paragrafo i calcoli espliciti.

Sia $\{\mu^L, L \in \mathbb{N}\}$ una successione di misure di probabilità sullo spazio delle configurazioni \mathcal{A}_L di tipo equilibrio locale forte con profilo $\rho_0(\cdot) \in C^2([-1, 1])$, cioè tale che:

$$D_{Lu}\mu^L \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \nu_{\rho_0(u)}$$

D_x è l'operatore di traslazione spaziale. Abbiamo indicato con $\xrightarrow{L \rightarrow \infty}$ la convergenza debole nello spazio delle misure di probabilità. Supponiamo per ipotesi che il profilo $\rho_0(u)$ soddisfi le condizioni al contorno:

$$\varphi(\rho_0(\pm 1)) = p_{\pm}$$

L'ipotesi da cui partiamo è che il sistema abbia un comportamento idrodinamico ed ogni equilibrio locale forte sia conservato nel tempo (supponiamo cioè sia verificata la tesi 1 del capitolo 3). Non daremo una verifica di tale affermazione la quale presenta una notevole difficoltà tecnica (l'idea è stata discussa nel capitolo 3). Una formulazione matematica di questa ipotesi è la relazione di LED (local equilibrium distribution, nella terminologia di [5]):

$$D_{Lu}T_{L^2\tau}\mu^L \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \nu_{\rho(\tau, u)} \quad (5.17)$$

essendo $\rho(\cdot, \cdot) \in C^{1,2}([0, T] \times [-1, 1])$ una funzione regolare nello spazio-tempo che soddisfa la condizione iniziale

$$\rho(0, u) = \rho_0(u)$$

e i vincoli al bordo

$$\varphi(\rho(\tau, u)) = p_{\pm}$$

mentre T_t è l'operatore di traslazione temporale. Fisicamente $\rho(\tau, u)$ descrive l'evoluzione temporale del sistema macroscopico a partire dalla situazione di equilibrio locale descritta dal profilo $\rho_0(u)$. Nostro scopo è trovare l'equazione differenziale che definisce tale evoluzione. Il significato fisico di p_{\pm} è quello di fugacità delle riserve di particelle, che possono essere localizzate nei siti reticolari $\pm(L+1)$. È dunque ragionevole fare le seguenti ulteriori ipotesi sul LED $\{\mu^L\}$:

$$\begin{aligned} \mu^L[g(\eta_{L^2\tau}(\pm L))] &\xrightarrow{L \rightarrow \infty} p_{\pm} \\ L\{p_{\pm} - \mu^L[g(\eta_{L^2\tau}(\pm L))]\} &\xrightarrow{L \rightarrow \infty} \pm \partial_u \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) \end{aligned} \quad (5.18)$$

La prima relazione è equivalente ai vincoli di bordo sulla fugacità $\varphi(\rho(\tau, \pm 1))$ ed esprime la continuità della fugacità agli estremi del reticolo. La seconda

relazione in qualche senso è un'ipotesi di continuità della derivata prima della fugacità al bordo.

Indichiamo con $\pi_\tau^L(du)$ la misura empirica sull'intervallo $[-1, 1]$ che si ottiene assegnando peso $\frac{1}{L}$ ad ogni particella e riscaldando spazio e tempo opportunamente:

$$\pi_\tau^L(du) = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^{+L} \eta_{L^2\tau}(x) \delta_{\frac{x}{L}}(du)$$

(con δ indichiamo la funzione delta di Dirac in $[-1, 1]$). Per come è definita, la misura empirica rappresenta la versione discreta della densità macroscopica del sistema; ci aspettiamo cioè che nel limite idrodinamico $L \rightarrow \infty$ sia:

$$\pi_\tau^L(du) \sim \rho(\tau, u) du$$

Il problema è definire il significato del simbolo \sim (deve essere inteso come una convergenza in probabilità).

La tecnica utilizzata per trovare l'equazione idrodinamica consiste nel calcolare:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] \quad (5.19)$$

data una generica funzione f regolare nell'intervallo $[-1, 1]$: $f(\cdot) \in C^\infty([-1, 1])$. Usando la proprietà di LED senza effettuare esplicitamente la derivata temporale si trova che il limite (5.19) coincide con:

$$\int_{-1}^1 du f(u) \partial_\tau \rho(\tau, u) \quad (5.20)$$

Se invece si ripete il calcolo effettuando la derivata temporale tramite le equazioni di Kolmogorov si trova per il limite (5.19) la seguente espressione:

$$\int_{-1}^1 du f(u) \left[\frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \alpha \partial_u \left(\frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \right) \right] \quad (5.21)$$

Unendo i due risultati (5.20) e (5.21) e sfruttando il fatto che la funzione $f(u)$ è scelta arbitrariamente, si ha che l'equazione idrodinamica aggiunta deve essere:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \alpha \partial_u \left[\frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \right] \quad (5.22)$$

osservazioni

Prima di verificare alcuni passaggi lasciati in sospeso nella ricerca delle equazioni idrodinamiche diretta ed aggiunta, facciamo alcune considerazioni sui risultati ottenuti.

Abbiamo trovato che il processo diretto ha un comportamento idrodinamico descritto dall'equazione:

$$\begin{aligned}\partial_\tau \rho(\tau, u) &= \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) \\ \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) &= p_\pm\end{aligned}$$

con situazione stazionaria definita dal profilo lineare della fugacità:

$$\varphi(\rho(u)) = p(u) = \alpha u + \beta$$

L'equazione idrodinamica è la stessa ottenuta per il processo di equilibrio (cioè senza costrizioni ai bordi). Il motivo di ciò si può spiegare nel seguente modo.

A) Il processo di equilibrio è un tipico sistema diffusivo, in cui il tempo riscalda quadraticamente rispetto lo spazio, e fisicamente ci aspettiamo che evolva secondo un'equazione parabolica.

B) Quando si introducono delle sorgenti ai bordi si rompe la situazione di equilibrio e si impone un flusso continuo di particelle in direzione fissata (dalla riserva di particelle con potenziale chimico maggiore a quella con potenziale chimico minore). Per questo il sistema perde l'invarianza per traslazioni caratteristica delle situazioni di equilibrio; ad esempio la fugacità in situazione stazionaria ha un profilo lineare tra i due valori vincolati al bordo. Tuttavia il gradiente di potenziale chimico tra i bordi ($\lambda_+ - \lambda_-$) è fissato ed indipendente dalla dimensione del reticolo (cioè dal numero di particelle). Quindi nel limite $L \rightarrow \infty$ il gradiente di potenziale chimico tra due siti microscopici vicini diventa infinitesimo di ordine $\sim \frac{1}{L}$; per questo il sistema è ancora di tipo diffusivo: l'equazione idrodinamica è la stessa che si aveva all'equilibrio e l'unico effetto della presenza delle riserve di particelle è fissare il potenziale chimico ai bordi tramite le relazioni (5.15).

C) Completamente diversa è la situazione con drift, in cui il campo che genera la corrente tra due siti vicini resta costante anche per $L \rightarrow \infty$. Ciò si può ottenere in due modi: o si prendono le riserve di particelle con gradiente di potenziale chimico che diverge linearmente con L , oppure si introduce un campo di forze esterno costante \vec{F} che spinge le particelle in direzione fissata

(un modello di questo tipo descrive ad esempio gli elettroni in un conduttore immerso in un campo elettrico costante). In tal caso il sistema non è più diffusivo e l'equazione idrodinamica è di tipo equazione di Eulero.

Per il processo aggiunto abbiamo trovato l'equazione idrodinamica:

$$\begin{aligned}\partial_\tau \rho(\tau, u) &= \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \alpha \partial_u \left[\frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \right] \\ \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) &= p_\pm\end{aligned}$$

Che è un'equazione analoga a quella del processo diretto, con situazione stazionaria di profilo lineare della fugacità:

$$\varphi(\rho(u)) = p(u) = \alpha u + \beta$$

ma con un termine in più nella derivata spaziale del primo ordine, quale immediata conseguenza della non reversibilità microscopica della dinamica (overo dei rapporti $\frac{p_L(x\pm 1)}{p_L(x)}$ che compaiono nell'espressione del generatore). Sappiamo che il processo aggiunto descrive il sistema sottoposto a time reversal; ci aspettiamo quindi un sistema in cui le particelle fluiscono contro il gradiente del potenziale chimico. Affinché ciò sia possibile è necessario che ci sia una "forza" che spinge le particelle in direzione del potenziale chimico crescente; tale forza è descritta nell'espressione del generatore proprio dai fattori $\frac{p_L(x\pm 1)}{p_L(x)}$ e dà vita nell'equazione idrodinamica al termine lineare nella derivata spaziale.

verifica di alcune relazioni

Per concludere deriviamo esplicitamente le relazioni lasciate in sospeso nel corso della trattazione precedente.

1. relazioni (5.12) e (5.16)

Le espressioni (5.12) e (5.16) della densità di corrente diretta e aggiunta si ottengono direttamente dalla definizione (5.11). Per il processo diretto risulta:

$$\begin{aligned}\Omega_L \eta(x) &= \frac{1}{2} \sum_{z=-L}^{+L} g(\eta(z)) [\eta^{z, z+1}(x) + \eta^{z, z-1}(x) - 2\eta(x)] + \\ &+ \frac{1}{2} p_+ [\eta^{+L}(x) - \eta(x)] + \frac{1}{2} p_- [\eta^{-L}(x) - \eta(x)]\end{aligned}$$

Per come sono definite le configurazioni $\eta^{x,y}$ ed $\eta^{\pm L}$ si ottiene:

$$\Omega_L \eta(x) = \begin{cases} = \frac{1}{2}[g(\eta(x-1)) - g(\eta(x))] - \frac{1}{2}[g(\eta(x)) - g(\eta(x+1))] & \text{se } -L < x < L \\ = \frac{1}{2}[g(\eta(L-1)) - g(\eta(L))] - \frac{1}{2}[g(\eta(L)) - p_+] & \text{se } x = L \\ = \frac{1}{2}[p_- - g(\eta(-L))] - \frac{1}{2}[g(\eta(-L)) - g(\eta(-L+1))] & \text{se } x = -L \end{cases}$$

Questa relazione è equivalente all'espressione (5.12) per la densità di corrente $j_\eta(x, x \pm 1)$. Analogamente per il processo aggiunto abbiamo:

$$\begin{aligned} \Omega_L^* \eta(x) &= \frac{1}{2} \sum_{z=-L}^{+L} g(\eta(z)) \left\{ \frac{p_L(z+1)}{p_L(z)} [\eta^{z,z+1}(x) - \eta(x)] + \frac{p_L(z-1)}{p_L(z)} [\eta^{z,z-1}(x) + \right. \\ &\quad \left. - \eta(x)] \right\} + \frac{1}{2} p_L(L) [\eta^{+L}(x) - \eta(x)] + \frac{1}{2} p_L(-L) [\eta^{-L}(x) - \eta(x)] = \end{aligned}$$

se $-L < x < L$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left[g(\eta(x-1)) \frac{p_L(x)}{p_L(x-1)} - g(\eta(x)) \frac{p_L(x-1)}{p_L(x)} \right] + \\ &\quad - \frac{1}{2} \left[g(\eta(x)) \frac{p_L(x+1)}{p_L(x)} - g(\eta(x+1)) \frac{p_L(x)}{p_L(x+1)} \right] \end{aligned}$$

se $x = L$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left[g(\eta(L-1)) \frac{p_L(L)}{p_L(L-1)} - g(\eta(L)) \frac{p_L(L-1)}{p_L(L)} \right] + \\ &\quad - \frac{1}{2} \left[g(\eta(L)) \frac{p_L(L)}{p_L(L)} - p_+ \frac{p_L(L)}{p_L(L+1)} \right] \end{aligned}$$

se $x = -L$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left[p_- \frac{p_L(-L)}{p_L(-L-1)} - g(\eta(-L)) \frac{p_L(-L-1)}{p_L(L)} \right] + \\ &\quad - \frac{1}{2} \left[g(\eta(-L)) \frac{p_L(-L+1)}{p_L(-L)} - g(\eta(-L+1)) \frac{p_L(-L)}{p_L(-L+1)} \right] \end{aligned}$$

da cui ricaviamo l'espressione (5.16) per la densità di corrente aggiunta $j_\eta^*(x, x \pm 1)$.

1. *relazioni* (5.20) e (5.21)

La relazione (5.20) si ricava semplicemente usando la definizione di misura empirica e la relazione di LED (5.17):

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^{+L} f\left(\frac{x}{L}\right) \partial_\tau (T_{L^2\tau} D_{L\frac{x}{L}} \mu^L) [\eta_0(0)] \xrightarrow{L \rightarrow \infty}$$

$$\xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int_{-1}^1 du f(u) \partial_\tau \nu_{\rho(\tau, u)}[\eta(0)] = \int_{-1}^1 du f(u) \partial_\tau \rho(\tau, u)$$

La verifica della relazione (5.21) è leggermente più articolata. Sfruttando il fatto che il tempo macroscopico riscalda con L^2 si ha:

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^{+L} f\left(\frac{x}{L}\right) L^2 \frac{d}{dt} \mu^L[\eta_t(x)] \quad (5.23)$$

La derivata temporale a secondo membro può essere calcolata utilizzando le equazioni di Kolmogorov:

$$\frac{d}{dt} \mu^L[\eta_t(x)] = \mu^L[\Omega_L^* \eta_t(x)]$$

e, per come è definita la densità di corrente j_η^* , risulta:

$$\Omega_L^* \eta_t(x) = j_\eta^*(x-1, x) - j_\eta^*(x, x+1)$$

Alla luce di tali risultati la relazione (5.23) si riscrive così:

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^{+L} f\left(\frac{x}{L}\right) L^2 \mu^L[j_\eta^*(x-1, x) - j_\eta^*(x, x+1)] =$$

riscalando la posizione reticolare del primo termine

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^{+L-1} L \left[f\left(\frac{x+1}{L}\right) - f\left(\frac{x}{L}\right) \right] L \mu^L[j_\eta^*(x, x+1)] + \\ &+ f(-1) L \mu^L[j_\eta^*(-L-1, -L)] - f(1) L \mu^L[j_\eta^*(L, L+1)] \end{aligned} \quad (5.24)$$

Dobbiamo quindi studiare $\mu^L[j_\eta^*(x, x+1)]$ fino all'ordine $\frac{1}{L}$ (consideriamo anche i casi $x = -L-1$ e $x = L$ identificando $p_+ \leftrightarrow g(\eta(L+1))$ e $p_- \leftrightarrow g(\eta(-L-1))$). Dall'espressione della corrente (5.16) abbiamo:

$$\mu^L[j_\eta^*(x, x+1)] = \frac{1}{2} \mu^L \left[g(\eta(x)) \frac{p_L(x+1)}{p_L(x)} - g(\eta(x+1)) \frac{p_L(x)}{p_L(x+1)} \right]$$

Ricordiamo che il profilo di fugacità stazionario è espresso da:

$$p_L(x) = \alpha \frac{x}{L+1} + \beta$$

con $\alpha = \frac{p_+ - p_-}{2}$ e $\beta = \frac{p_+ + p_-}{2}$. Risulta quindi:

$$\mu^L[j_\eta^*(x, x+1)] = \frac{1}{2}\mu^L[g(\eta(x)) - g(\eta(x+1))] + \frac{1}{2}\frac{\alpha}{p_L(x)}\mu^L[g(\eta(x)) + g(\eta(x+1))] \frac{1}{L} + O\left(\frac{1}{L^2}\right)$$

Sostituendo questa approssimazione nella relazione (5.24) abbiamo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] &= \frac{1}{2L} \sum_{x=-L}^{L-1} (f'(\frac{x}{L}) + O(\frac{1}{L}))L\mu^L[g(\eta_t(x)) - g(\eta_t(x+1))] + \\ &+ \frac{\alpha}{2L} \sum_{x=-L}^{L-1} (f'(\frac{x}{L}) + O(\frac{1}{L}))\frac{1}{p_L(x)}\mu^L[g(\eta_t(x)) + g(\eta_t(x+1))] + O(\frac{1}{L}) + \\ &+ \frac{1}{2}f(-1)L\mu^L[p_- - g(\eta(-L))] + \frac{\alpha}{2p_L(-L)}f(-1)\mu^L[g(\eta_t(-L)) + p_-] + \\ &- \frac{1}{2}f(1)L\mu^L[g(\eta_t(L)) - p_+] - \frac{\alpha}{2p_L(L)}f(1)\mu^L[g(\eta_t(L)) + p_+] = \\ &= \frac{1}{2L} \sum_{x=-L+1}^{L-1} L(f'(\frac{x}{L}) - f'(\frac{x-1}{L}))(D_{L\frac{x}{L}}T_{L^2\tau}\mu^L)[g(\eta_0(0))] + \\ &+ \frac{1}{2}f'(-1)(D_{L\frac{-L}{L}}T_{L^2\tau}\mu^L)[g(\eta_0(0))] - \frac{1}{2}f'(1)(D_{L\frac{L}{L}}T_{L^2\tau}\mu^L)[g(\eta_0(0))] + \\ &\quad + \frac{\alpha}{2L} \sum_{x=-L}^{L-1} f'(\frac{x}{L})\frac{1}{p(\frac{x}{L})}2(D_{L\frac{x}{L}}T_{L^2\tau}\mu^L)[g(\eta_0(0))] + \\ &+ \frac{1}{2}f(-1)L\mu^L[p_- - g(\eta(-L))] + \frac{\alpha}{2p(\frac{L}{L})}f(-1)(\mu^L[g(\eta_t(-L))] + p_-) + \\ &- \frac{1}{2}f(1)L\mu^L[g(\eta_t(L)) - p_+] - \frac{\alpha}{2p(\frac{L}{L})}f(1)(\mu^L[g(\eta_t(L))] + p_+) + O(\frac{1}{L}) \end{aligned}$$

(abbiamo indicato con $p(\cdot)$ il profilo macroscopico della fugacità in situazione stazionaria: $p(u) = \alpha u + \beta$). A questo punto sfruttiamo l'ipotesi fatte sul LED $\{\mu^L\}$ (5.17) e (5.18) ed effettuiamo il limite per $L \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] &\xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 du f''(u)\varphi(\rho(\tau, u)) + \\ &+ \alpha \int_{-1}^1 du f'(u)\frac{1}{p(u)}\varphi(\rho(\tau, u)) + \frac{1}{2}f'(-1)p_- - \frac{1}{2}f'(1)p_+ + \\ &- \frac{1}{2}f(-1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, -1)) + \frac{1}{2}f(1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, 1)) + \alpha f(-1) - \alpha f(1) \end{aligned}$$

Integrando per parti ogni volta che c'è una derivata della funzione f , i termini di bordo si cancellano esattamente con gli ultimi sei termini e resta:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] = \int_{-1}^1 du f(u) \left[\frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \alpha \partial_u \left(\frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \right) \right]$$

che è proprio la relazione (5.21) che volevamo dimostrare.

5.4 Modello asimmetrico

Come detto nell'introduzione del capitolo, cerchiamo una generalizzazione del modello zero range di non-equilibrio considerando un modello con dinamica asimmetrica. Tale generalizzazione non è immediata come nella situazione di equilibrio (cf. ad esempio [14]) in quanto la presenza delle riserve di particelle non permette di avere condizioni di periodicità al bordo e rompe l'invarianza per traslazioni del sistema.

definizione della dinamica

Le prime difficoltà nascono dalla definizione stessa del modello asimmetrico. Il problema deriva dal fatto che, se le particelle possono fare salti di lunghezza maggiore di 1, allora non è ben definito dove finiscono le particelle che, in prossimità del bordo $\pm L$, saltano oltre le riserve di particelle (situate in $\pm(L+1)$).

Noi faremo la seguente scelta sulla dinamica: all'interno del reticolo ogni particella può saltare di una quantità $y \in \Lambda_r = \{-r, \dots, r\}$; la distribuzione delle probabilità di transizione è indicata con $p(y)$. Sulle probabilità $p(y)$ faremo le seguenti ipotesi.

1. non degenerazione: $p(0) = 0$
2. normalizzazione: $\sum_{y \in \Lambda_r} p(y) = 1$
3. assenza di drift: $\sum_{y \in \Lambda_r} y p(y) = 0$
4. varianza finita: $\sum_{y \in \Lambda_r} y^2 p(y) = \sigma^2 < \infty$

Se dopo il salto la particella non è più nel reticolo (cioè $|x+y| > L$), diremo che è entrata in una riserva di particelle. Quindi, se x è in prossimità di un bordo (ad ex. $+L$), la probabilità di saltare nel punto $x+y$ interno al reticolo è $p(y)$ e la probabilità di saltare nella riserva di particelle è: $\sum_{y: x+y > L} p(y)$.

Resta da definire i tassi di transizione con cui le particelle entrano nel reticolo a partire dalle riserve di particelle. Anche in questo caso generalizziamo la dinamica a primi vicini dicendo che una particella può entrare in un generico sito x in prossimità dei bordi. Per semplicità supponiamo che la collezione dei siti raggiungibili direttamente dalle riserve di particelle siano:

$\Lambda_L^+ = \{L - r, \dots, L\}$ e $\Lambda_L^- = \{-L, \dots, -L + r\}$ (cioè gli stessi siti da cui è possibile raggiungere le riserve di particelle con un unico salto). Indichiamo con $\tilde{p}(x)$ il tasso di transizione con cui una particella entra direttamente nel sito $x \in \Lambda_L^\pm$.

Date queste premesse, il generatore della dinamica risulta definito da:

$$\begin{aligned} (\Omega_L f)(\eta) &= \sum_{x \in \Lambda_L} \sum_{y \in \Lambda_r} g(\eta(x)) p(y) [f(\eta^{x, x+y}) - f(\eta)] + \\ &+ \sum_{x \in \Lambda_L^\pm} \tilde{p}(x) [f(\eta^x) - f(\eta)] \end{aligned} \quad (5.25)$$

Viene utilizzata la convenzione che, se $(x+y)$ non appartiene al reticolo, allora la configurazione $\eta^{x, x+y}$ è ottenuta a partire da η eliminando una particella di x :

$$\eta^{x, x+y}(z) = \begin{cases} \eta(x) - 1 & \text{se } z = x \\ \eta(z) & \text{altrimenti} \end{cases}$$

in altri termini $\eta^{x, x+y} = \eta^{x, L+1}$ qualora $x + y > L$. Con η^x indichiamo invece la configurazione ottenuta da η a seguito della creazione di una particella in x (in prossimità di un bordo):

$$\eta^x(z) = \begin{cases} \eta(x) + 1 & \text{se } z = x \\ \eta(z) & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Nell'espressione (5.25) restano arbitrari i tassi $\tilde{p}(x)$ con cui le particelle entrano a partire dalle riserve. Tale ambiguità verrà eliminata in seguito (facendo opportune ipotesi fisiche).

stato stazionario

Un possibile modo di procedere consiste nel fissare lo stato stazionario uguale a quello che si aveva per dinamica simmetrica

$$\mu_L[\eta] = \prod_{x=-L}^L \left[\frac{\varphi_L(x)^{\eta(x)}}{g(\eta(x))!} \frac{1}{\mathcal{Z}(\varphi_L(x))} \right] \quad (5.26)$$

essendo $\varphi_L(\cdot)$ un profilo lineare:

$$\varphi_L(x) = \frac{\varphi_+ - \varphi_-}{2(L+1)} x + \frac{\varphi_+ + \varphi_-}{2}$$

Tale scelta non è irragionevole in quanto anche nel modello zero range di equilibrio (senza vincoli al bordo) le misure di equilibrio sono indipendenti

dalla distribuzione di probabilità $p(\cdot)$ e dalla simmetria o asimmetria della dinamica. Nel seguito quindi imponremo che lo stato stazionario sia μ_L e vedremo in che modo tale ipotesi influisce sulla definizione del generatore. Indichiamo con $\varphi(\cdot) : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ il profilo lineare macroscopico:

$$\varphi(u) = \alpha u + \beta$$

avendo indicato: $\alpha = \frac{\varphi_+ - \varphi_-}{2}$, $\beta = \frac{\varphi_+ + \varphi_-}{2}$.

Dire che μ_L è uno stato stazionario equivale a chiedere:

$$(\mu_L \Omega_L)(\eta) = 0 ; \forall \eta \quad (5.27)$$

Il risultato interessante è che tale relazione di stazionarietà (5.27) è verificata se e solo se i tassi di transizione ai bordi $\tilde{p}(x)$ sono definiti dalla seguente relazione:

$$\tilde{p}(x) = \sum_{\substack{y : \\ x+y \in \Lambda_L}} p(-y) \varphi_L(x+y) \quad (5.28)$$

Dim. Se $k(\eta, \zeta)$ è il tasso di transizione dalla configurazione η alla configurazione ζ , la relazione di stazionarietà (5.27) assume la forma:

$$\sum_{\zeta} \{ \mu_L[\zeta] k(\zeta, \eta) - \mu_L[\eta] k(\eta, \zeta) \} = 0 \quad (5.29)$$

Le uniche configurazioni raggiungibili a partire da η sono:

$\eta^{x, x+y}$ con $x \in \Lambda_L$, $y \in \Lambda_r$; il passaggio avviene con tasso di transizione $g(\eta(x))p(y)$

$\eta^{x, \pm(L+1)}$, $x \in \Lambda_L^\pm$ con tasso di transizione $g(\eta(x)) \sum_{y: |x+y| > L} p(y)$

η^x , $x \in \Lambda_L^\pm$ con tasso di transizione $\tilde{p}(x)$

Di contro le uniche configurazioni da cui si può raggiungere η con un salto della dinamica sono:

$\zeta = \eta^{x, x+y}$, $x \in \Lambda_L$, $y \in \Lambda_r$ tali che $x+y \in \Lambda_L$; ciò equivale a dire $\eta = \zeta^{x+y, x}$ quindi il passaggio da ζ ad η avviene con tasso di transizione $g(\eta^{x, x+y}(x+y))p(-y)$

$\zeta = \eta^{x, \pm(L+1)}$, $x \in \Lambda_L^\pm$; invertendo tale relazione risulta $\eta = \zeta^x$ ed tasso di transizione è $\tilde{p}(x)$

$\zeta = \eta^x$, $x \in \Lambda_L^\pm$; in questo caso risulta $\eta = \zeta^{x, \pm(L+1)}$ ed il tasso di transizione da ζ a η è $g(\eta^x(x)) \sum_{y: |x+y| > L} p(y)$

In conclusione la condizione di stazionarietà (5.29) si riscrive così:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{x, y : \\ x+y \in \Lambda_L}} \mu_L[\eta^{x, x+y}] g(\eta(x+y) + 1) p(-y) + \\
& + \sum_{x \in \Lambda_L^+} \mu_L[\eta^{x, L+1}] \tilde{p}(x) + \sum_{x \in \Lambda_L^-} \mu_L[\eta^{x, -L-1}] \tilde{p}(x) + \\
+ & \sum_{\substack{x, y : \\ x+y > L}} \mu_L[\eta^x] g(\eta(x) + 1) p(y) + \sum_{\substack{x, y : \\ x+y < -L}} \mu_L[\eta^x] g(\eta(x) + 1) p(y) + \\
& - \sum_{x, y} \mu_L[\eta] g(\eta(x)) p(y) - \sum_{x \in \Lambda_L^+ \cup \Lambda_L^-} \mu_L[\eta] \tilde{p}(x) = 0 \quad (5.30)
\end{aligned}$$

Quando non è specificato altro supporremo sempre x elemento del reticolo Λ_L , mentre y elemento di Λ_r . Utilizzando l'espressione esplicita (5.26) dello stato stazionario μ_L possiamo sostituire:

$$\begin{aligned}
\mu_L[\eta^{x, z}] &= \mu_L[\eta] \frac{\varphi_L(z)}{g(\eta(z) + 1)} \frac{g(\eta(x))}{\varphi_L(x)} \quad \text{se } x, z \in \Lambda_L \\
\mu_L[\eta^{x, \pm(L+1)}] &= \mu_L[\eta] \frac{g(\eta(x))}{\varphi_L(x)} \\
\mu_L[\eta^x] &= \mu_L[\eta] \frac{\varphi_L(x)}{g(\eta(x) + 1)}
\end{aligned}$$

Sfruttando tali identità la relazione (5.30) assume la forma:

$$\begin{aligned}
& \sum_x g(\eta(x)) \left\{ \sum_{\substack{y : \\ x+y \in \Lambda_L}} \frac{\varphi_L(x+y)}{\varphi_L(x)} p(-y) + \frac{\tilde{p}(x)}{\varphi_L(x)} - \sum_y p(y) \right\} + \\
& + \sum_{x \in \Lambda_L^+} \left\{ \varphi_L(x) \sum_{\substack{y : \\ x+y > L}} p(y) - \tilde{p}(x) \right\} +
\end{aligned}$$

$$+ \sum_{x \in \Lambda_L^-} \left\{ \varphi_L(x) \sum_{\substack{y: \\ x+y < -L}} p(y) - \tilde{p}(x) \right\} = 0$$

e questo deve essere vero per ogni configurazione η . Quindi ciò è possibile se e solo se valgono separatamente le relazioni:

$$\sum_{\substack{y: \\ x+y \in \Lambda_L}} p(-y)\varphi_L(x+y) + \tilde{p}(x) - \varphi_L(x) \sum_y p(y) = 0 \quad (5.31)$$

$$\sum_x \tilde{p}(x) = \sum_{\substack{x, y: \\ x+y \notin \Lambda_L}} \varphi_L(x)p(y) \quad (5.32)$$

Dalla prima relazione (5.31) otteniamo la forma esplicita dei tassi di transizione $\tilde{p}(x)$:

$$\tilde{p}(x) = \sum_{\substack{y: \\ x+y \notin \Lambda_L}} p(-y)\varphi_L(x+y) + \sum_y [p(y)\varphi_L(x) - p(-y)\varphi_L(x+y)]$$

Sfruttando la linearità del profilo $\varphi_L(x)$ e le proprietà della distribuzione $p(y)$ è facile verificare che l'ultimo termine è nullo; quindi otteniamo:

$$\tilde{p}(x) = \sum_{\substack{y: \\ x+y \in \Lambda_L}} p(-y)\varphi_L(x+y)$$

che è proprio la relazione (5.28) che volevamo dimostrare. Resta da verificare che con tale scelta dei tassi $\tilde{p}(x)$ la seconda relazione (5.32) è immediatamente verificata. Per dimostrarlo basta utilizzare le seguenti identità (di facile verifica):

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{x: \\ x+y > L}} 1 = y; & \quad \sum_{\substack{x: \\ x+y < -L}} 1 = -y & (5.33) \\ \sum_{\substack{x: \\ x+y > L}} (L-x) = \frac{1}{2}y(y-1); & \quad \sum_{\substack{x: \\ x+y < -L}} (L+x) = \frac{1}{2}y(y+1) \end{aligned}$$

e la linearità del profilo $\varphi_L(\cdot)$. Risulta infatti:

$$\begin{aligned}
& \sum_x \tilde{p}(x) - \sum_{\substack{x, y : \\ x+y \notin \Lambda_L}} \varphi_L(x)p(y) = \\
= & \sum_{\substack{x, y : \\ x+y \notin \Lambda_L}} [p(-y)\varphi_L(x+y) - \varphi_L(x)p(y)] = \beta \sum_y [p(-y) - p(y)] \sum_{\substack{x : \\ x+y \notin \Lambda_L}} 1 + \\
& -\alpha \frac{1}{L+1} \sum_{y>0} [p(-y) - p(y)] \sum_{\substack{x : \\ x+y > L}} (L-x) + \\
& +\alpha \frac{1}{L+1} \sum_{y<0} [p(-y) - p(y)] \sum_{\substack{x : \\ x+y < -L}} (L+x) + \\
& -\alpha \frac{1}{L+1} \sum_{y>0} [p(-y) - p(y)] \sum_{\substack{x : \\ x+y > L}} 1 + \alpha \frac{1}{L+1} \sum_{y<0} [p(-y) - p(y)] \sum_{\substack{x : \\ x+y < -L}} 1 + \\
& +\alpha \frac{1}{L+1} \sum_y yp(-y) \sum_{\substack{x : \\ x+y \notin \Lambda_L}} 1 = \\
= & \beta \sum_y |y|[p(-y) - p(y)] + \frac{\alpha}{L+1} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{y>0} y(y-1)[p(-y) - p(y)] + \right. \\
& \left. +\frac{1}{2} \sum_{y<0} y(y+1)[p(-y) - p(y)] + \sum_y y|y|p(-y) \right\} + \\
& +\frac{\alpha}{L+1} \left\{ \sum_{y>0} y[p(-y) - p(y)] - \sum_{y<0} y[p(-y) - p(y)] \right\} = 0
\end{aligned}$$

Il primo termine è banalmente nullo. Per dimostrare che gli altri due termini sono nulli basta tener conto dell'ipotesi che la distribuzione $p(y)$ è a media nulla. Risulta così verificata la relazione (5.32).

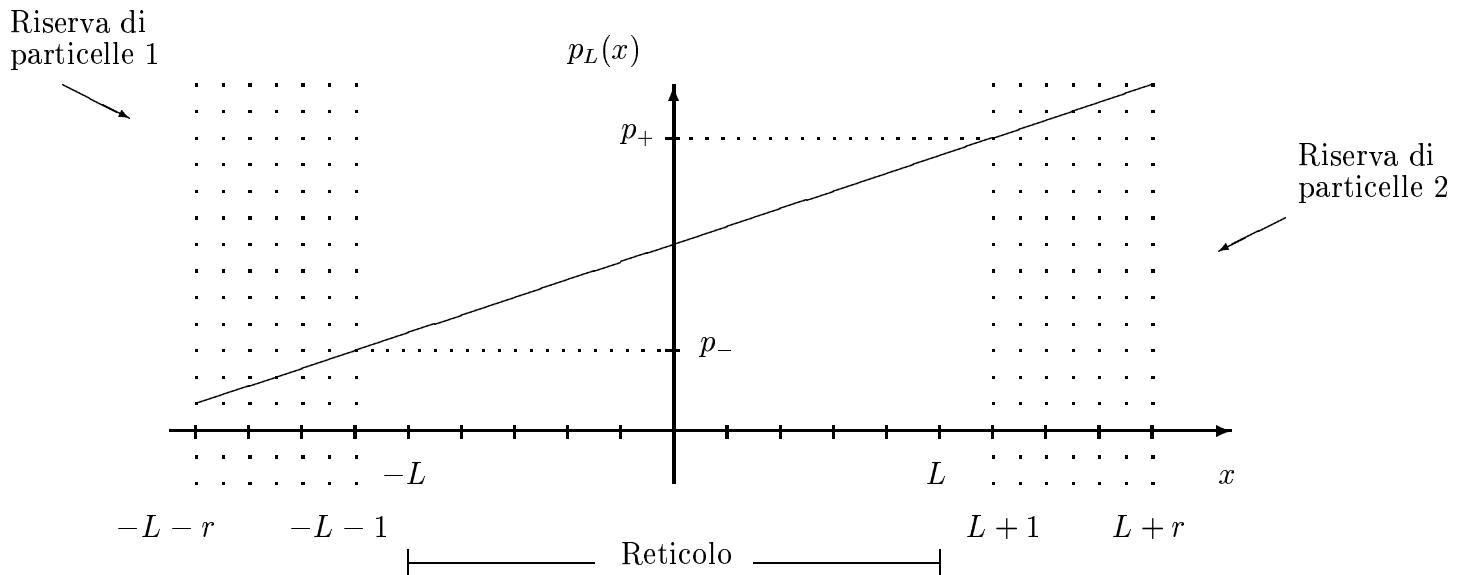
□

osservazioni

Concludiamo quindi che affinché lo stato stazionario sia definito da un profilo di fugacità lineare è necessario fissare i tassi di transizione $\tilde{p}(x)$ con cui le particelle entrano a partire dalle riserve ai bordi del reticolo tramite la relazione (5.28). Con tale scelta il generatore della dinamica assume la nuova forma:

$$\begin{aligned}
 (\Omega_L f)(\eta) = & \sum_{x,y} g(\eta(x))p(y) [f(\eta^{x,x+y}) - f(\eta)] + \\
 & + \sum_{\substack{x,y : \\ x+y \notin \Lambda_L}} \varphi_L(x+y)p(-y) [f(\eta^x) - f(\eta)] \quad (5.34)
 \end{aligned}$$

Il risultato ottenuto ha una chiara interpretazione fisica. Scrivere il generatore nella forma (5.34) equivale ad assegnare una certa profondità spaziale alle riserve di particelle, che non sono più localizzate in $\pm(L+1)$, ma si estendono tra $\pm(L+1)$ e $\pm(L+r)$; inoltre la fugacità della riserva di particelle non è più fissata pari a φ_{\pm} , ma nella zona di transizione tra $\pm(L+1)$ e $\pm(L+r)$ la fugacità ha andamento lineare che prosegue il profilo di fugacità del reticolo in situazione stazionaria.



Con questa interpretazione una particella in un sito x in prossimità del bordo del reticolo può saltare in un punto generico $(x + y) > L$ o $< -L$ della riserva di particelle, purché $|y| < r$, e ciò avviene con probabilità $p(y)$. Quindi il tasso di transizione con cui la particella esce dal reticolo è proprio $g(\eta(x)) \sum_{y: |x+y|>L} p(y)$. Analogamente una particella nel sito z della riserva di particelle (esterno al reticolo) può saltare in un qualunque sito $x = (z - y)$ interno al reticolo con tasso di transizione $\varphi_L(z)p(-y)$ poiché la fugacità di ogni sito della riserva di particelle è fissata pari a $\varphi_L(z)$. Quindi in $x \in \Lambda_L^\pm$ possono entrare particelle da ogni punto della riserva ed il tasso di transizione complessivo risulta proprio $\sum_{y: x+y \notin \Lambda_L} \varphi_L(x + y)p(-y) \equiv \tilde{p}(x)$.

Le scelte effettuate sulla dinamica del modello asimmetrico sono in parte arbitrarie. Potremmo considerare ad esempio una dinamica differente con una zona centrale del reticolo $\Lambda_L^0 = \{-L + r, \dots, L - r\}$ in cui le particelle fanno salti y di lunghezza arbitraria inferiore ad r e con probabilità $p(y)$; e due zone di bordo $\Lambda_L^+ = \{-L, \dots, -L + r\}$ e $\Lambda_L^- = \{L - r, \dots, L\}$ in cui la dinamica delle particelle è simmetrica ed a primi vicini. In questo modo il sistema non risente più della struttura spaziale del reticolo. Lo studio di un modello di questo tipo presenta però delle complicazioni.

A) Una caratteristica essenziale del modello con generatore (5.34) è che, se è consentito un salto dal sito x al sito z (interno o esterno del reticolo), allora è consentito anche il salto opposto da z ad x , anche se chiaramente con probabilità differente. Questo porta ad una certa specularità tra il processo diretto ed il processo aggiunto (legato all'inversione temporale della dinamica microscopica) ed è alla base del fatto che la misura stazionaria è una misura prodotto.

B) Nel nuovo modello, con dinamica differente a seconda della zona di reticolo, si perde tale specularità; ad esempio il salto tra $L - r$ ed L è permesso ma non è permesso il salto opposto. In conseguenza di ciò la misura stazionaria non ha una forma semplice come in (5.26) e nascono ragionevoli dubbi sul fatto che sia una misura prodotto; quindi lo studio analitico del sistema risulta più complesso. In ogni caso ci possiamo aspettare che il comportamento idrodinamico risulti indipendente da come è definita la dinamica nella zona di bordo del reticolo.

processo aggiunto

Abbiamo verificato che il processo asimmetrico di generatore (5.34) ha stato stazionario $\mu_L[\cdot]$. Possiamo chiederci come è fatto il generatore aggiunto Ω_L^* rispetto tale stato, definito da:

$$\langle h, \Omega_L f \rangle_{\mu_L} = \langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L}$$

per ogni coppia di funzioni cilindriche h, f sullo spazio delle configurazioni. Vogliamo verificare che il generatore aggiunto Ω_L^* risulta espresso dalla seguente relazione:

$$\begin{aligned}
(\Omega_L^* f)(\eta) &= \sum_{x,y} p(-y) \frac{\varphi_L(x+y)}{\varphi_L(x)} g(\eta(x)) [f(\eta^{x,x+y}) - f(\eta)] + \\
&+ \sum_{\substack{x,y \\ x+y \notin \Lambda_L}} p(y) \varphi_L(x) [f(\eta^x) - f(\eta)] \quad (5.35)
\end{aligned}$$

Tale espressione generalizza quella del generatore aggiunto del modello con dinamica simmetrica (5.6).

Dim. Il calcolo del generatore aggiunto Ω_L^* ricalca quello effettuato nel modello simmetrico. Utilizzando l'espressione (5.34) del generatore Ω_L , abbiamo:

$$\begin{aligned}
\langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} &= \sum_{\substack{x,y \\ x+y \in \Lambda_L}} p(y) \sum_{\eta} g(\eta(x)) \mu_L[\eta] h(\eta) f(\eta^{x,x+y}) + \\
&+ \sum_{\substack{x,y \\ x+y \notin \Lambda_L}} p(y) \sum_{\eta} g(\eta(x)) \mu_L[\eta] h(\eta) f(\eta^{x,x+y}) + \\
&+ \sum_{\substack{x,y \\ x+y \notin \Lambda_L}} \varphi_L(x+y) p(-y) \sum_{\eta} \mu_L[\eta] h(\eta) f(\eta^x) + \\
&\quad - \sum_{x,y} p(y) \sum_{\eta} g(\eta(x)) \mu_L[\eta] h(\eta) f(\eta) + \\
&- \sum_{\substack{x,y \\ x+y \notin \Lambda_L}} \varphi_L(x+y) p(-y) \sum_{\eta} \mu_L[\eta] h(\eta) f(\eta) \quad (5.36)
\end{aligned}$$

Facciamo dei cambi di variabile $\eta \rightarrow \zeta$ in modo che in ogni termine compaia $f(\zeta)$. Nel primo termine prendiamo: $\zeta = \eta^{x,x+y} \Leftrightarrow \eta = \zeta^{x+y,x}$; nel secondo termine: $\zeta = \eta^{x,x+y} \Leftrightarrow \eta = \zeta^x$; infine nel terzo termine definiamo: $\zeta = \eta^x \Leftrightarrow \eta = \zeta^{x,x+y}$. Utilizzando l'espressione esplicita della misura stazionaria μ_L , la

relazione (5.36) si riscrive così:

$$\begin{aligned}
\langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} = & \sum_{\zeta} \mu_L[\zeta] f(\zeta) \left\{ \sum_{\substack{x, y \\ x+y \in \Lambda_L}} p(y) g(\zeta(x+y)) \frac{\varphi_L(x)}{\varphi_L(x+y)} h(\zeta^{x+y, x}) + \right. \\
& + \sum_{\substack{x, y \\ x+y \notin \Lambda_L}} p(y) \varphi_L(x) h(\zeta^x) + \sum_{\substack{x, y \\ x+y \notin \Lambda_L}} p(-y) \frac{\varphi_L(x+y)}{\varphi_L(x)} g(\zeta(x)) h(\eta^{x, x+y}) + \\
& \left. - \sum_{x, y} p(y) g(\zeta(x)) h(\zeta) - \sum_{\substack{x, y \\ x+y \notin \Lambda_L}} \varphi_L(x+y) p(-y) h(\zeta) \right\}
\end{aligned}$$

L'espressione tra parentesi graffe definisce l'azione del generatore aggiunto sulla funzione $h(\zeta)$. Facendo un cambio di variabile nel primo termine: $x+y \rightarrow x$, $-y \rightarrow y$ si ottiene:

$$\begin{aligned}
(\Omega_L^* f)(\eta) = & \sum_{x, y} p(-y) g(\eta(x)) \frac{\varphi_L(x+y)}{\varphi_L(x)} f(\eta^{x, x+y}) + \\
& + \sum_{\substack{x, y \\ x+y \notin \Lambda_L}} p(y) \varphi_L(x) f(\eta^x) + \\
& - \sum_{x, y} p(y) g(\eta(x)) f(\eta) - \sum_{\substack{x, y \\ x+y \notin \Lambda_L}} \varphi_L(x+y) p(-y) f(\eta)
\end{aligned}$$

Per arrivare all'espressione (5.35) basta utilizzare la relazione (5.32), legata alle proprietà della distribuzione $p(y)$ ed alla linearità del profilo $\varphi_L(x)$.

□

5.5 Equazione idrodinamica del modello asimmetrico

Per concludere l'analisi del modello asimmetrico ne studiamo il comportamento idrodinamico, focalizzando l'attenzione sulla ricerca dell'equazione idrodinamica diretta ed aggiunta.

Studiamo innanzitutto la corrente di particelle in x , ovvero l'azione del generatore sulla funzione cilindrica $\eta(x)$. Con un calcolo diretto si arriva, per il processo diretto, a:

$$\Omega_L \eta(x) = \sum_{\substack{y: \\ x+y \in \Lambda_L}} g(\eta(x+y))p(-y) + \sum_{\substack{y: \\ x+y \notin \Lambda_L}} \varphi_L(x+y)p(-y) - g(\eta(x))$$

Prendendo per convenzione $g(\eta(z)) = \varphi_L(z)$ qualora z è un sito esterno al reticolo Λ_L , risulta:

$$\Omega_L \eta(x) = \sum_y g(\eta(x+y))p(-y) - g(\eta(x)) \quad (5.37)$$

Analogamente per il processo aggiunto si ottiene:

$$\Omega_L^* \eta(x) = \sum_y p(y) \frac{\varphi_L(x)}{\varphi_L(x+y)} g(\eta(x+y)) - \sum_y p(-y) \frac{\varphi_L(x+y)}{\varphi_L(x)} g(\eta(x)) \quad (5.38)$$

In entrambe le relazioni (5.37) e (5.38) il primo termine a secondo membro descrive la corrente di particelle verso x , il secondo termine la corrente di particelle che escono da x .

Per trovare l'equazione idrodinamica ipotizziamo, come per il modello simmetrico, che il sistema abbia un buon comportamento idrodinamico, cioè che ogni equilibrio locale forte $\{\mu^L\}$ associato ad un profilo $\rho_0(\cdot)$, cioè tale che

$$D_{Lu} \mu^L \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \nu_{\rho_0(u)},$$

resti di equilibrio locale (forte) per ogni istante macroscopico successivo τ :

$$T_{L^2 \tau} D_{Lu} \mu^L \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \nu_{\rho(\tau, u)} \quad (5.39)$$

Per come è stata definita nel cap.5, l'equazione idrodinamica descrive l'andamento temporale del profilo di equilibrio locale $\rho(\tau, u)$. La presenza delle riserve di particelle impone degli ulteriori vincoli sulla definizione dell'equilibrio

locale $\{\mu^L\}$; innanzitutto deve essere fissata la fugacità ai bordi:

$$\mu^L[g(\eta_{L^2\tau}(\pm L))] \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) \equiv \varphi_{\pm} \quad (5.40)$$

imponiamo inoltre una condizione di regolarità in prossimità del bordo:

$$L\mu^L[\varphi_{\pm} - g(\eta_{L^2\tau}(\pm L))] \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \pm \partial_u \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) \quad (5.41)$$

Queste sono le stesse ipotesi che abbiamo fatto nello studio dell'idrodinamica del modello con dinamica a primi vicini; vedremo che per dinamica asimmetrica bisognerà fare un'ulteriore ipotesi sul valore della derivata prima della fugacità al bordo:

$$\partial_u \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) = \alpha \quad (5.42)$$

A partire da tale ipotesi è possibile trovare le equazioni idrodinamiche diretta ed aggiunta. Per il processo diretto risulta:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \sigma^2 \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) \quad (5.43)$$

L'idrodinamica aggiunta è invece descritta da:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \sigma^2 \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \alpha \sigma^2 \partial_u \left[\frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{\varphi(u)} \right] \quad (5.44)$$

Entrambe queste equazioni vanno considerate insieme ai vincoli:

$$\begin{aligned} \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) &= \varphi_{\pm} \\ \partial_u \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) &= \alpha \end{aligned}$$

osservazioni

1. Notiamo che, così come per il modello simmetrico, anche in questo caso l'equazione idrodinamica diretta è la stessa che si ha per il sistema di equilibrio (cf. [14]), mentre l'equazione idrodinamica aggiunta differisce da quella diretta per un termine di primo ordine nella derivata spaziale della fugacità.

2. Le uniche differenze tra le equazioni (5.43) e (5.44) e le corrispondenti equazioni trovate per il modello con dinamica a primi vicini consistono nel fattore σ^2 , cioè la varianza della distribuzione di probabilità $p(y)$, ed il vincolo sulla derivata prima della fugacità ai bordi. Entrambe queste differenze sono diretta conseguenza del fatto che nella dinamica sono consentiti salti tra siti

non primi vicini. L'asimmetria della distribuzione $p(y)$ non influisce in nulla nel comportamento macroscopico del sistema.

3. È necessario fare alcune considerazioni sul vincolo (5.42) imposto sulla derivata prima della fugacità ai bordi.

Dalla dimostrazione seguente appare chiara la necessità “matematica” di tale vincolo sull'equazione idrodinamica ed è evidenziato come ciò è conseguenza della profondità spaziale delle riserve di particelle. Infatti per dinamica a primi vicini le riserve di particelle possono essere considerate puntiformi e l'unica cosa che conta è la loro fugacità, che vincola la fugacità del sistema ai bordi. Al contrario quando la dinamica non è a primi vicini in qualche modo le particelle sentono la struttura spaziale delle riserve di particelle (almeno nella zona tra $\pm(L+1)$ e $\pm(L+r)$ immediatamente a contatto con il reticolo). Nelle riserve di particelle il profilo di fugacità ha pendenza fissata e pari ad α . In conseguenza di ciò il sistema risulta vincolato ai bordi nel valore non solo della fugacità ma anche nella sua derivata prima.

D'altro canto “fisicamente” non c'è nessun motivo di aspettarsi una differenza nel comportamento macroscopico a seconda se la dinamica è a primi vicini oppure no. Infatti qualunque sia il valore finito della portata r dei salti, è comunque infinitesimo rispetto alla scala macroscopica L e non è ragionevole che per $r = 1$ o $r > 1$ ci sia differente limite idrodinamico. A conferma di ciò, nel modello zero range di equilibrio (cf. [14]) non c'è nessuna distinzione al livello macroscopico tra il modello con dinamica a primi vicini e quello con dinamica a range finito (purché a media nulla, cioè sistema diffusivo).

Siamo dunque portati a pensare che il vincolo (5.42) debba essere ininfluenza. La spiegazione va ricercata nelle soluzioni dell'equazione idrodinamica. Con opportune ipotesi sulla funzione $\varphi(\cdot)$ si dimostra (cf. [1] e [16]) che esiste ed è unica la soluzione (in senso debole) dell'equazione del calore:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \sigma^2 \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) \quad \tau \in [0, \infty) ; u \in [-1, 1] \quad (5.45)$$

qualora siano dati il profilo iniziale:

$$\rho(0, u) = \rho_0(u) \quad (5.46)$$

e le condizioni a contorno:

$$\rho(\tau, \pm 1) = \rho_\pm = \varphi^{-1}(\varphi_\pm) \quad (5.47)$$

Dunque sono possibili due sole situazioni: o la soluzione (unica) dell'equazione idrodinamica soddisfa automaticamente il vincolo sulla derivata della fugacità al bordo:

$$\partial_u \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) = \alpha \quad (5.48)$$

oppure non lo soddisfa. Il secondo caso però esclude che il modello asimmetrico possa avere comportamento idrodinamico; questo è infatti possibile se e solo se tale vincolo (5.48) è verificato. È dunque plausibile aspettarsi che il vincolo (5.48) sia automaticamente soddisfatto ad ogni istante $\tau > 0$ dalla soluzione unica dell'equazione (5.45) con vincoli (5.46) e (5.47).

Per dimostrare in modo formale questa affermazione bisognerebbe seguire il seguente schema.

a) In primo luogo è necessario verificare l'esistenza di comportamento idrodinamico del modello zero range fuori dall'equilibrio. Una verifica analoga per modelli con interazioni di tipo esclusione semplice o generalizzata si trova in [16], [17] e [18].

b) Dire che il sistema ha comportamento idrodinamico equivale a dire che, dato un generico profilo iniziale di densità $\rho_0(u)$, allora è ben definito il profilo di densità $\rho(\tau, u)$ ad ogni istante di tempo macroscopico. Il secondo passo consiste nel far vedere che, se c'è comportamento idrodinamico, allora l'evoluzione spazio temporale della densità soddisfa l'equazione idrodinamica (5.45) e ad ogni istante $\tau > 0$ verifica i vincoli (5.47) e (5.48).

c) Questo ci assicura che la condizione:

$$\partial_u \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) = \alpha = \frac{1}{2}(\varphi_+ - \varphi_-)$$

è automaticamente soddisfatta dalla soluzione (unica) del problema:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \sigma^2 \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) \quad \tau \in [0, \infty) ; u \in [-1, 1]$$

$$\rho(0, u) = \rho_0(u)$$

$$\rho(\tau, \pm 1) = \rho_\pm = \varphi^{-1}(\varphi_\pm)$$

Dunque il fatto che la dinamica non è a primi vicini non porta nessuna modifica sostanziale nel comportamento macroscopico del sistema.

La dimostrazione che segue dà una versione semplificata del passo b); supporremo infatti non solo che ci sia comportamento idrodinamico, ma che ogni profilo idrodinamico forte sia conservato (secondo le definizioni date nel capitolo 3).

dimostrazione

Diamo una dimostrazione esplicita delle equazioni idrodinamiche (5.43) e (5.44) a partire dalle ipotesi (5.39), (5.40), (5.41) e (5.42) fatte sul LED μ^L .

Indichiamo al solito con π_τ^L la misura empirica all'istante macroscopico τ ; cioè la misura sull'intervallo macroscopico $[-1, 1]$ ottenuta assegnando massa $\frac{1}{L}$ ad ogni particella:

$$\langle \pi_\tau^L, f \rangle = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^L \eta_{L^2\tau}(x) f\left(\frac{x}{L}\right)$$

Sia $f(\cdot)$ una generica funzione regolare nell'intervallo $[-1, 1]$. Cerchiamo il valore di:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] \quad (5.49)$$

Lasciando esplicita la derivata temporale si può ripetere quanto visto per il modello simmetrico ottenendo:

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] \simeq \int_{-1}^1 du f(u) \partial_\tau \rho(\tau, u) \quad (5.50)$$

a meno di correzioni che scompaiono nel limite $L \rightarrow \infty$. Lo stesso limite (5.49) si può calcolare riscaldando il tempo: $\frac{d}{d\tau} \rightarrow L^2 \frac{d}{dt}$ e calcolando la derivata temporale tramite le equazioni di Kolmogorov. In questo caso bisogna studiare separatamente il processo diretto ed il processo aggiunto.

A) *processo diretto*

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^L L^2 f\left(\frac{x}{L}\right) \mu_L[\Omega_L \eta_{L^2\tau}(x)]$$

Utilizziamo l'espressione della corrente, definita dalla relazione (5.37). Si giunge in questo modo a:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] &= \frac{1}{L} \sum_{\substack{x, y : \\ x+y \in \Lambda_L}} L^2 f\left(\frac{x}{L}\right) p(-y) \mu^L[g(\eta_{L^2\tau}(x+y))] + \\ &+ \frac{1}{L} \sum_{\substack{x, y : \\ x+y \notin \Lambda_L}} L^2 f\left(\frac{x}{L}\right) p(-y) \varphi_L(x+y) - \frac{1}{L} \sum_x L^2 f\left(\frac{x}{L}\right) \mu^L[g(\eta_{L^2\tau}(x))] \end{aligned}$$

Nel primo termine a secondo membro ridefiniamo $x+y \rightarrow x$, $-y \rightarrow y$ ed aggiungiamo e sottraiamo i termini con $x+y \notin \Lambda_L$; il risultato è:

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] = \frac{1}{L} \sum_{x,y} L^2 \left[f\left(\frac{x+y}{L}\right) - f\left(\frac{x}{L}\right) \right] p(y) \mu^L[g(\eta_{L^2\tau}(x))] +$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\substack{x, y : \\ x + y \notin \Lambda_L}} Lf\left(\frac{x}{L}\right)p(-y)\varphi_L(x + y) + \\
& - \sum_{\substack{x, y : \\ x + y \notin \Lambda_L}} Lf\left(\frac{x + y}{L}\right)p(y)\mu^L[g(\eta_{L^2\tau}(x))]
\end{aligned}$$

Sfruttiamo l'ipotesi di regolarità della funzione f sviluppando $f\left(\frac{x+y}{L}\right)$ a secondo ordine in prossimità di $\frac{x}{L}$. Il risultato è:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\tau}\mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] &= \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^L \mu_L[g(\eta_t(x))] \left\{ Lf'\left(\frac{x}{L}\right) \sum_y yp(y) + \frac{1}{2}f''\left(\frac{x}{L}\right) \sum_y y^2p(y) \right\} + \\
& + \sum_{\substack{x, y : \\ x + y \notin \Lambda_L}} Lf\left(\frac{x}{L}\right)p(-y)\varphi_L(x + y) + \\
& - \sum_{\substack{x, y : \\ x + y \notin \Lambda_L}} Lf\left(\frac{x + y}{L}\right)p(y)\mu^L[g(\eta_t(x))] + O\left(\frac{1}{L}\right)
\end{aligned}$$

Per ipotesi la distribuzione $p(y)$ ha media nulla e varianza σ^2 . Nel primo termine riscriviamo la somma su x come integrale $\frac{1}{L} \sum_x \sim \int_{-1}^1 du$ ed approssimiamo $\mu^L[g(\eta_t(x))] \simeq \varphi(\rho(\tau, \frac{x}{L}))$. Con una doppia integrazione per parti si arriva a

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\tau}\mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] &= \int_{-1}^1 du f(u) \sigma^2 \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) + \frac{1}{2} \sigma^2 f'(1) \varphi(\rho(\tau, 1)) + \\
& - \frac{1}{2} \sigma^2 f'(-1) \varphi(\rho(\tau, -1)) - \frac{1}{2} \sigma^2 f(1) \partial_u \varphi(\rho(\tau, 1)) + \frac{1}{2} \sigma^2 f(-1) \partial_u \varphi(\rho(\tau, -1)) + \\
& + \sum_{\substack{x, y : \\ x + y \notin \Lambda_L}} L \left\{ f\left(\frac{x}{L}\right)p(-y)\varphi_L(x + y) - f\left(\frac{x + y}{L}\right)p(y)\mu^L[g(\eta_t(x))] \right\} + O\left(\frac{1}{L}\right)
\end{aligned}$$

Confrontando questo risultato con la relazione (5.50), possiamo concludere che l'equazione idrodinamica del sistema è proprio:

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \sigma^2 \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u))$$

(che è la stessa del sistema di equilibrio, cf. [14]) purché tutti i termini di bordo si annullano a vicenda. Vediamo in quale caso tale condizione è verificata, cioè risulta:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{x, y : \\ x+y \notin \Lambda_L}} L \left\{ f\left(\frac{x}{L}\right)p(-y)\varphi_L(x+y) - f\left(\frac{x+y}{L}\right)p(y)\mu^L[g(\eta_t(x))] \right\} + \\
& \quad + \frac{1}{2}\sigma^2 f'(1)\varphi(\rho(\tau, 1)) - \frac{1}{2}\sigma^2 f'(-1)\varphi(\rho(\tau, -1)) + \\
& \quad - \frac{1}{2}\sigma^2 f(1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, 1)) + \frac{1}{2}\sigma^2 f(-1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, -1)) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 0 \quad (5.51)
\end{aligned}$$

Analizziamo il primo termine e consideriamo la somma estesa solo ai siti del bordo destro. Sfruttando la regolarità di $f(\cdot)$, la linearità del profilo $\varphi_L(\cdot)$, e l'ipotesi (5.41) di regolarità del LED μ^L in prossimità del bordo, si verifica che:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{x, y : \\ x+y > L}} L \left\{ f\left(\frac{x}{L}\right)p(-y)\varphi_L(x+y) - f\left(\frac{x+y}{L}\right)p(y)\mu^L[g(\eta_t(x))] \right\} = \\
& = \sum_{\substack{x, y : \\ x+y > L}} L \left\{ \left(f(1) + \frac{x-L}{L}f'(1) \right) \left(\varphi_+ + \frac{x+y-L}{L}\alpha \right) p(-y) + \right. \\
& \quad \left. - \left(f(1) + \frac{x+y-L}{L}f'(1) \right) \left(\varphi_+ + \frac{x-L}{L}\partial_u\varphi(\rho(\tau, 1)) \right) p(y) \right\} =
\end{aligned}$$

utilizzando le relazioni (5.33)

$$\begin{aligned}
& = -Lf(1)\varphi_+ \sum_y yp(y) + f'(1)\varphi_+ \left[-\frac{1}{2} \sum_y yp(y) - \frac{1}{2} \sum_y y^2p(y) \right] + \\
& \quad + f(1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, 1)) \left[-\frac{1}{2} \sum_{y=0}^r yp(y) + \frac{1}{2} \sum_{y=0}^r y^2p(y) \right] + \\
& \quad + f(1)\alpha \left[-\frac{1}{2} \sum_{y=-r}^0 yp(y) + \frac{1}{2} \sum_{y=-r}^0 y^2p(y) \right] =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2}\sigma^2 f'(1)\varphi_+ + f(1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, 1)) \left[-\frac{1}{2}\sum_{y=0}^r yp(y) + \frac{1}{2}\sum_{y=0}^r y^2p(y) \right] + \\
&\quad + f(1)\alpha \left[-\frac{1}{2}\sum_{y=-r}^0 yp(y) + \frac{1}{2}\sum_{y=-r}^0 y^2p(y) \right] \tag{5.52}
\end{aligned}$$

Ripetendo lo stesso calcolo per la parte di sommatoria riguardante i siti del bordo sinistro si ottiene un risultato analogo:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{x, y : \\ x+y < L}} L \left\{ f\left(\frac{x}{L}\right)p(-y)\varphi_L(x+y) - f\left(\frac{x+y}{L}\right)p(y)\mu^L[g(\eta_t(x))] \right\} = \\
&= \frac{1}{2}\sigma^2 f'(-1)\varphi_- - f(-1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, -1)) \left[\frac{1}{2}\sum_{y=-r}^0 yp(y) + \frac{1}{2}\sum_{y=-r}^0 y^2p(y) \right] + \\
&\quad - f(-1)\alpha \left[\frac{1}{2}\sum_{y=0}^r yp(y) + \frac{1}{2}\sum_{y=0}^r y^2p(y) \right] \tag{5.53}
\end{aligned}$$

Sostituendo queste relazioni (5.52) e (5.53) il primo membro della (5.51) si riscrive così:

$$\begin{aligned}
&f(1)\alpha \left\{ \sum_{y=0}^r yp(y) + \sum_{y=-r}^0 y^2p(y) \right\} - f(-1)\alpha \left\{ \sum_{y=0}^r yp(y) + \sum_{y=0}^r y^2p(y) \right\} + \\
&\quad - f(1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, 1)) \left\{ \sum_{y=0}^r yp(y) + \sum_{y=-r}^0 y^2p(y) \right\} + \\
&\quad + f(-1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, -1)) \left\{ \sum_{y=0}^r yp(y) + \sum_{y=0}^r y^2p(y) \right\}
\end{aligned}$$

e questa espressione è identicamente nulla se e solo se è verificato il vincolo (5.42) sulla derivata della fugacità. Con ciò risulta dimostrata la relazione (5.43)

B) *processo aggiunto*

Cerchiamo ora l'equazione idrodinamica del processo aggiunto di generatore Ω_L^* . In questo caso, usando la relazione (5.38), abbiamo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] &= \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^L L^2 f\left(\frac{x}{L}\right) \mu^L \left[\sum_y p(y) \frac{\varphi_L(x)}{\varphi_L(x+y)} g(\eta_t(x+y)) + \right. \\ &\quad \left. - \sum_y p(-y) \frac{\varphi_L(x+y)}{\varphi_L(x)} g(\eta_t(x)) \right] \end{aligned}$$

Con passaggi analoghi a quelli visti nello studio dell'idrodinamica diretta, si arriva a:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_\tau^L, f \rangle] &= \int_{-1}^1 du f(u) \left\{ \frac{1}{2} \sigma^2 \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \alpha \sigma^2 \partial_u \left[\frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{\varphi(u)} \right] \right\} + \\ &\quad + \frac{1}{2} f'(1) \varphi_+ \sigma^2 - \frac{1}{2} f'(-1) \varphi_- \sigma^2 - \frac{1}{2} f(1) \partial_u \varphi(\rho(\tau, 1)) \sigma^2 + \\ &\quad + \frac{1}{2} f(-1) \partial_u \varphi(\rho(\tau, -1)) \sigma^2 + f(1) \alpha \sigma^2 - f(-1) \alpha \sigma^2 + \\ &\quad - \sum_{\substack{x, y: \\ x+y \notin \Lambda_L}} f'\left(\frac{x}{L}\right) \mu^L[g(\eta_t(x))] \frac{\varphi_L(x+y)}{\varphi_L(x)} y p(-y) + \\ &\quad + \sum_{\substack{x, y: \\ x+y \notin \Lambda_L}} f\left(\frac{x}{L}\right) L \left\{ p(y) \varphi_L(x) - p(-y) \frac{\varphi_L(x+y)}{\varphi_L(x)} \mu^L[g(\eta_t(x))] \right\} \end{aligned}$$

Analogamente a prima tutti i termini di bordo si cancellano a vicenda con la solita ipotesi (5.42). Questo ci permette di concludere che l'equazione idrodinamica aggiunta deve essere la (5.44).

Capitolo 6

Studio delle Grandi Deviazioni

Nel capitolo precedente abbiamo analizzato il comportamento idrodinamico del modello zero range di non-equilibrio; abbiamo visto che nel limite idrodinamico l'evoluzione macroscopica del sistema è deterministica, descritta dalle soluzioni dell'equazione idrodinamica. In questo capitolo studiamo le grandi deviazioni del sistema; calcoliamo cioè con che probabilità il sistema si allontana dal comportamento idrodinamico.

Cercheremo di verificare che la successione delle misure empiriche $\pi_{(\cdot)}^N$, viste come variabili casuali a valori nello spazio $D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$, soddisfano un principio di grandi deviazioni definito dalle relazioni (cf. (4.3) e (4.4)):

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} \log Q^N[C] \leq - \inf_{\pi_{(\cdot)} \in C} I(\pi_{(\cdot)}) \quad \forall C \text{ chiuso} \quad (6.1)$$

$$\liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} \log Q^N[O] \geq - \inf_{\pi_{(\cdot)} \in O} I(\pi_{(\cdot)}) \quad \forall O \text{ aperto} \quad (6.2)$$

essendo Q^N la distribuzione di probabilità della misura empirica (indotta dalla probabilità P^N sullo spazio dei cammini $D([0, T] \times \mathcal{A}_N)$). Il funzionale $I(\pi_{(\cdot)})$ misura con che probabilità l'andamento temporale della misura empirica $\pi_{(\cdot)}^N$ per $N \rightarrow \infty$ coincide con un cammino dato:

$$Q^N[\pi_{(\cdot)}^N \equiv \pi_{(\cdot)}^*] \sim e^{-N^d I(\pi_{(\cdot)}^*)}$$

Abbiamo già visto nel capitolo 4 qual è la tecnica utilizzata nel verificare il principio di grandi deviazioni. In realtà nel corso di questo capitolo tralascieremo tutti i dettagli tecnici necessari per verificare rigorosamente le relazioni (4.3) e (4.4) e ci concentreremo nella ricerca dell'espressione esplicita del funzionale di grandi deviazioni $I(\pi_{(\cdot)}^N)$. Lo schema che seguiremo è il seguente.

1. Il primo passo consiste nell'introdurre un modello non omogeneo debolmente perturbato dalla presenza di un campo esterno $H(\cdot, \cdot) \in C^{1,2}([0, T] \times [0, 1])$. Secondo quanto visto nel cap.4 il generatore di tale modello deve essere del tipo:

$$(\Omega_{L,\tau}^H f)(\eta) = \sum_{x,y} k(\eta, \eta^{x,y}) e^{H(\tau, \frac{y}{N}) - H(\tau, \frac{x}{N})} [f(\eta^{x,y}) - f(\eta)]$$

avendo indicato con $k(\eta, \zeta)$ il tasso di transizione dalla configurazione η a ζ nel modello imperturbato; tuttavia nella situazione di non equilibrio non basterà sommare su x ed y all'interno del reticolo, in quanto il campo esterno H deve perturbare anche l'interazione tra i bordi del reticolo e le riserve di particelle. Nel secondo paragrafo analizzeremo il comportamento idrodinamico di tale modello, trovandone l'equazione idrodinamica (che deve ridursi all'equazione (5.43) per $H = 0$).

2. A questo punto dovremo calcolare le derivate di Radom-Nikodim $\frac{d\nu_{\gamma(\cdot)}^N}{d\nu_{\alpha}^N}$ e $\frac{dP_H^N}{dP^N}(\tau)$ cercando di eprimerle come funzione della misura empirica nella forma:

$$\begin{aligned} \frac{d\nu_{\gamma(\cdot)}^N}{d\nu_{\alpha}^N} &\simeq e^{-N^d h_{\gamma(\cdot)}(\pi_0^N)} \\ \frac{dP_H^N}{dP^N}(\tau) &\simeq e^{-N^d J_H(\pi_{(\cdot)}^N)} \end{aligned}$$

a meno di correzioni trascurabili rispetto a $h_{\gamma(\cdot)}$ e J_H nel limite $N \rightarrow \infty$ (cioè superesponenzialmente piccole). Per effettuare questo calcolo utilizzeremo i risultati presentati in appendice B e poi dovremo supporre validi alcuni lemmi di sostituzione analoghi a quelli dimostrati in [1, cap 10].

3. Ricordando quanto detto nel capitolo 4, è possibile dimostrare che il funzionale di grandi deviazioni è proprio:

$$I(\pi_{(\cdot)}) = h(\pi_0) + I_0(\pi_{(\cdot)})$$

avendo indicato:

$$\begin{aligned} h(\pi_0) &= \sup_{\gamma(\cdot) \in C([0,1])} h_{\gamma(\cdot)}(\pi_0) \\ I_0(\pi_{(\cdot)}) &= \sup_{H(\cdot, \cdot) \in C^{1,2}([0,T] \times [0,1])} J_H(\pi_{(\cdot)}) \end{aligned}$$

Nel paragrafo 4 studieremo la traiettoria più probabile di grandi deviazioni.

A) Se il sistema è disposto all'istante iniziale con un profilo di densità $\gamma(\cdot)$, allora rilassa in tempi infiniti verso lo stato stazionario di profilo di fugacità lineare e tale rilassamento segue un'evoluzione deterministica definita dalla soluzione dell'equazione idrodinamica:

$$\begin{aligned}\partial_\tau \rho(\tau, u) &= \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) \\ \rho(\tau, u) &= \gamma(u)\end{aligned}$$

Sia $\rho_\gamma(\tau, u)$ la soluzione di questa equazione.

B) Supponiamo ora che il sistema sia disposto all'istante $-\infty$ nello stato stazionario ed imponiamo che all'istante zero si trovi in una situazione di grandi deviazioni definita dal profilo di densità $\gamma(\cdot)$. Ci chiediamo qual è l'evoluzione più probabile che farà fluttuare il sistema in tale situazione di equilibrio locale. Chiaramente tale traiettoria è il punto di minimo $\pi_{(\cdot)}^*$ del funzionale di grandi deviazioni $I(\pi_{(\cdot)})$ nell'insieme di tutti i cammini $\pi_{(\cdot)}$ tali che all'istante 0 hanno profilo di equilibrio locale $\gamma(\cdot)$, cioè tali che: $\pi_0(du) = \gamma(u)du$.

Per sistemi con dinamica microscopica reversibile il principio di Onsager-Machlup (cf. Introduzione) stabilisce che la traiettoria più probabile di grandi deviazioni è data dall'inversione temporale della soluzione dell'equazione idrodinamica che descrive il rilassamento all'equilibrio partendo dalla situazione di profilo $\gamma(\cdot)$. In formule:

$$\pi^*(\tau, du) = \rho_\gamma(-\tau, u)du$$

Nel nostro modello di non-equilibrio troveremo una generalizzazione di tale principio; la traiettoria più probabile di grandi deviazioni risulta la soluzione dell'equazione idrodinamica aggiunta invertita temporalmente. Il che è fisicamente legato al fatto che il processo aggiunto descrive proprio l'inversione temporale del processo diretto (è espresso dalla relazione (1.16) vista nel capitolo 1). Chiaramente nel caso di dinamica reversibile (cioè di validità del bilancio dettagliato) tale risultato si riduce al principio di Onsager-Machlup poiché il processo aggiunto coincide con quello diretto. Inoltre per modelli di equilibrio ma con dinamica diffusiva non simmetrica (e quindi non reversibile), come quelli studiati da D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio e C. Landim in [14], il processo aggiunto è distinto da quello diretto (si ottiene scambiando $p(x)$ con $p(-x)$), ma le due equazioni idrodinamiche coincidono poiché dipendono solo dalla varianza: $\sigma^2 = \sum_x x^2 p(x)$. Quindi anche in tali situazioni la generalizzazione trovata si riduce al principio di Onsager-Machlup (come è stato verificato dagli stessi autori).

Alla fine del capitolo estenderemo tutto lo studio di grandi deviazioni ad un modello zero range di non-equilibrio con due componenti. In questo modo potremo verificare le relazioni di simmetria di Onsager.

1. Il comportamento idrodinamico del modello a due componenti è definito dall'equazione:

$$\partial_\tau \rho_a(\tau, u) = \partial_u \left[\sum_{b=1,2} D_{ab}(\vec{\rho}(\tau, u)) \partial_u \rho_b(\tau, u) \right]$$

essendo $\vec{\rho}(\tau, u)$ il profilo di densità dei due tipi di particelle. Il primo passo per calcolare i coefficienti di trasporto di Onsager consiste nel trovare esplicitamente la matrice di diffusione $D_{ab}(\vec{\rho})$.

2. Bisogna poi calcolare il funzionale entropia:

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = \inf_{\mathcal{G}_{\vec{\gamma}}} I(\vec{\rho}(\cdot, \cdot))$$

essendo $I(\vec{\rho}(\cdot, \cdot))$ il funzionale di grandi deviazioni della misura empirica e $\mathcal{G}_{\vec{\gamma}}$ l'insieme delle traiettorie che soddisfano i vincoli:

$$\begin{aligned} \vec{\rho}(-\infty, u) &: \text{profilo stazionario} \\ \vec{\rho}(0, u) &= \vec{\gamma}(u) \end{aligned}$$

Una volta nota la densità di entropia $s(\vec{\gamma}(u))$, definita da:

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = \int_{-1}^1 s(\vec{\gamma}(u)) du$$

potremo calcolare la matrice:

$$R_{ab}^{-1}(\vec{\rho}) = \frac{\partial^2}{\partial \rho_a \partial \rho_b} s(\vec{\rho})$$

Le relazioni di reciprocità di Onsager (studiate in Introduzione) si esprimono dicendo che la matrice dei coefficienti di trasporto:

$$L_{ab}(\vec{\rho}) = \sum_c D_{ac}(\vec{\rho}) R_{cb}(\vec{\rho})$$

è simmetrica.

Questi sono risultati nuovi, poichè fino ad ora non erano mai state estese le relazioni di simmetria di Onsager e la relazione di time reversal di Onsager-Machlup a modelli di non-equilibrio.

6.1 Definizione del processo con campo esterno

A partire dall'espressione dei generatori del processo diretto Ω_L e del processo aggiunto Ω_L^* dobbiamo definire un nuovo processo con campo esterno H . Vogliamo cioè definire un generatore $\Omega_{L,\tau}^H$ che descrive la dinamica del sistema in presenza di un campo esterno $H(\cdot, \cdot) \in \mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times [-1 - \frac{1}{L}, 1 + \frac{1}{L}])$ che spinge le particelle in direzione dei valori crescenti di H (cioè in direzione del gradiente di H , definito a meno di una costante). Definiamo dunque:

$$\begin{aligned}
 (\Omega_{L,\tau}^H f)(\eta) &= \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta(x)) \left\{ e^{H(\tau, \frac{x+1}{L}) - H(\tau, \frac{x}{L})} [f(\eta^{x,x+1}) - f(\eta)] + \right. \\
 &+ e^{H(\tau, \frac{x-1}{L}) - H(\tau, \frac{x}{L})} [f(\eta^{x,x-1}) - f(\eta)] \left. \right\} + \\
 &+ \frac{1}{2} p_+ e^{H(\tau, 1) - H(\tau, 1 + \frac{1}{L})} [f(\eta^{+L}) - f(\eta)] + \\
 &+ \frac{1}{2} p_- e^{H(\tau, -1) - H(\tau, -1 - \frac{1}{L})} [f(\eta^{-L}) - f(\eta)] \tag{6.3}
 \end{aligned}$$

Si vede facilmente che il sistema con campo esterno si riduce al sistema diretto per $H = 0$ ed al sistema aggiunto per $H(\tau, u) = \log p(u) + (\text{cost})$.

Indichiamo con $k(\eta, \zeta)$ il tasso di transizione dalla configurazione η alla configurazione ζ secondo la dinamica del processo diretto e con $\lambda(\eta) = \sum_{\zeta} k(\eta, \zeta)$. Dunque il generatore diretto ha la forma:

$$(\Omega_L f)(\eta) = \sum_{\zeta} k(\eta, \zeta) [f(\zeta) - f(\eta)]$$

Nostro scopo sarà calcolare la derivata di Radom-Nikodim $\frac{dP_L^H}{dP_L}(\tau)$ che si ottiene in maniera semplice solo se (cf. [1, App1,7]) il generatore con campo esterno ha la forma:

$$(\Omega_{L,\tau}^H f)(\eta) = \sum_{\zeta} k(\eta, \zeta) e^{F(\tau, \zeta) - F(\tau, \eta)} [f(\zeta) - f(\eta)]$$

per qualche funzione $F(\cdot, \cdot)$ (dipendente dal campo H). Ciò è possibile se e solo se la funzione F soddisfa

$$F(\tau, \eta^{x,y}) - F(\tau, \eta) = H(\tau, \frac{y}{L}) - H(\tau, \frac{x}{L})$$

ogni volta che una particella salta da x in y (compresa la situazione in cui la particella esce dal reticolo: $y = \pm(L+1)$, o entra nel reticolo dai bordi: $x = \pm(L+1)$)

1. Nella situazione di equilibrio ($p_+ = p_- = 0$ e con condizioni periodiche ai bordi) basta prendere la funzione F (cf. [1]) così:

$$F(\tau, \eta) = \sum_{x=-L}^L \eta(x) H(\tau, \frac{x}{L})$$

2. Fuori dall'equilibrio ($p_+ \neq p_-$) questa scelta non va bene, altrimenti nei salti di particelle ai bordi (verso dentro e verso fuori il reticolo) la differenza $F(\tau, \zeta) - F(\tau, \eta)$ risulta un valore assoluto del campo H (mentre noi sappiamo che contano solo i gradienti del campo H). Il problema in questo caso è fare in modo che il gradiente del campo H agisca anche sulle particelle che saltano attraverso i bordi del reticolo. Per fare ciò dovremo prendere:

$$F(\tau, \eta) = \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta(x) H(\tau, \frac{x}{L})$$

avendo definito sia il campo $H(\tau, \frac{x}{L})$ sia il numero di particelle $\eta(\cdot)$ in corrispondenza delle riserve di particelle in $\pm(L+1)$. In particolare con $\eta(\pm(L+1))$ indichiamo il numero di particelle nel sito $\pm(L+1)$, definito a meno di una costante (assume valori interi relativi), tramite le relazioni:

$$\begin{aligned} \eta^{L,L+1}(L+1) &= \eta(L+1) + 1 & \eta^{-L,-L-1}(-L-1) &= \eta(-L-1) + 1 \\ \eta^L(L+1) &= \eta(L+1) - 1 & \eta^{-L}(-L-1) &= \eta(-L-1) - 1 \\ \eta^{x,x\pm 1}(L+1) &= \eta(L+1) \text{ se } x \neq L & \eta^{x,x\pm 1}(-L-1) &= \eta(-L-1) \text{ se } x \neq -L \end{aligned}$$

6.2 Equazione idrodinamica

Bisogna capire come si modifica l'equazione idrodinamica del sistema in presenza del campo esterno H . A tale scopo seguiamo lo stesso procedimento utilizzato per trovare l'equazione idrodinamica del processo aggiunto.

Cerchiamo innanzitutto l'espressione della corrente di particelle in direzione $x \rightarrow x \pm 1$, ovvero l'azione del generatore $\Omega_{L,\tau}^H$ sulla funzione $\eta(x)$. Da un calcolo diretto effettuato a partire dall'espressione (6.3) del generatore $\Omega_{L,\tau}^H$, si ottiene:

$$\begin{aligned} \Omega_{L,\tau}^H &= \frac{1}{2}[g(\eta(x-1)) + g(\eta(x+1)) - 2g(\eta(x))] \left(1 + \frac{1}{2L^2}[\partial_u H(\tau, \frac{x}{L})]^2\right) + \\ &+ \frac{1}{2}[g(\eta(x-1)) + g(\eta(x+1))] \partial_u H(\tau, \frac{x}{L}) \frac{1}{L} + \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{4}[g(\eta(x-1)) + g(\eta(x+1)) + 2g(\eta(x))]\partial_u^2 H(\tau, \frac{x}{L})\frac{1}{L^2} + O(\frac{1}{L^3}) \quad (6.4)$$

Questa espressione è valida per $-L < x < L$. Nei siti di bordo $x = \pm L$ va modificata identificando: $g(\eta(\pm(L+1))) =: p_{\pm}$. Questo equivale a dire che la fugacità delle riserve di particelle è fissata pari a p_{\pm} . Rimandiamo alla fine del paragrafo la verifica esplicita della relazione (6.4).

A questo punto possiamo cercare l'equazione idrodinamica. Supponiamo che $\{\mu^L, L \in \mathbb{N}\}$ sia un LED soddisfacente alle ipotesi (5.17) e (5.18) e cerchiamo $\frac{d}{d\tau}\mu^L[< \pi_{\tau}^L, f >]$ nel limite $L \rightarrow \infty$. Se si lascia esplicitata la derivata temporale si ottiene al solito:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau}\mu^L[< \pi_{\tau}^L, f >] = \int_{-1}^1 du f(u) \partial_{\tau} \rho(\tau, u) \quad (6.5)$$

Se invece si effettua la derivata temporale usando le equazioni di Kolmogorov con generatore $\Omega_{L,\tau}^H$ e l'espressione (6.4) della corrente, si ottiene:

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau}\mu^L[< \pi_{\tau}^L, f >] = \int_{-1}^1 du f(u) \{ \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) + \\ - \partial_u H(\tau, u) \partial_u \varphi(\rho(\tau, u)) - \varphi(\rho(\tau, u)) \partial_u^2 H(\tau, u) \} \end{aligned} \quad (6.6)$$

Confrontando le relazioni (6.5) e (6.6) possiamo concludere che l'equazione idrodinamica del sistema è:

$$\partial_{\tau} \rho(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \partial_u [\varphi(\rho(\tau, u)) \partial_u H(\tau, u)] \quad (6.7)$$

con vincoli ai bordi

$$\varphi(\rho(\tau, \pm 1)) = p_{\pm}$$

osservazioni

1. Come ci aspettiamo tale equazione si riduce per $H = 0$ all'equazione del processo diretto (5.43) e per $H = \log p(u)$ all'equazione del processo aggiunto (5.44).
2. Notiamo inoltre che la (6.7) è la stessa equazione che descrive l'idrodinamica del modello di equilibrio con campo esterno (cf. [14]). Ciò vuol dire che l'unico effetto della presenza delle riserve di particelle ai bordi è quello di fissare le condizioni a contorno.

verifica delle relazioni (6.4) e (6.6)

A partire dalla definizione (6.3) del generatore con campo esterno $\Omega_{L,\tau}^H$, risulta:

$$\begin{aligned}\Omega_{L,\tau}^H \eta(x) &= \frac{1}{2} \sum_{y=-L}^L g(\eta(y)) \left\{ e^{H(\tau, \frac{y+1}{L}) - H(\tau, \frac{y}{L})} [\eta^{y,y+1}(x) - \eta(x)] + \right. \\ &\quad \left. + e^{H(\tau, \frac{y-1}{L}) - H(\tau, \frac{y}{L})} [\eta^{y,y-1}(x) - \eta(x)] \right\} + \\ &\quad + \frac{1}{2} p_+ e^{H(\tau, 1) - H(\tau, 1 + \frac{1}{L})} + \frac{1}{2} p_- e^{H(\tau, -1) - H(\tau, -1 - \frac{1}{L})}\end{aligned}$$

Per $-L < x < L$ tale espressione è equivalente a:

$$\begin{aligned}\Omega_{L,\tau}^H \eta(x) &= \frac{1}{2} g(\eta(x-1)) e^{H(\tau, \frac{x}{L}) - H(\tau, \frac{x-1}{L})} + \frac{1}{2} g(\eta(x+1)) e^{H(\tau, \frac{x}{L}) - H(\tau, \frac{x+1}{L})} + \\ &\quad - \frac{1}{2} g(\eta(x)) \left[e^{H(\tau, \frac{x+1}{L}) - H(\tau, \frac{x}{L})} + e^{H(\tau, \frac{x-1}{L}) - H(\tau, \frac{x}{L})} \right]\end{aligned}$$

e questo risultato si estende ad $x = \pm L$ identificando: $g(\eta(x \pm 1))$ con p_{\pm} . Per ottenere la relazione (6.4) basta sviluppare gli esponenziali all'ordine $(\frac{1}{L})^2$ sfruttando la regolarità del campo H :

$$\exp\left\{H\left(\tau, \frac{x}{L}\right) - H\left(\tau, \frac{x+\Delta}{L}\right)\right\} \simeq 1 - \frac{\Delta}{L} \partial_u H\left(\tau, \frac{x}{L}\right) - \frac{\Delta^2}{2L^2} \partial_u^2 H\left(\tau, \frac{x}{L}\right) + \frac{\Delta^2}{2L^2} [\partial_u H\left(\tau, \frac{x}{L}\right)]^2$$

(nel nostro caso $\Delta = \pm 1$).

Passiamo ora a verificare la relazione (6.6). Per come è definita la misura empirica π_{τ}^L ed utilizzando l'equazione di Kolmogorov si ha:

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_{\tau}^L, f \rangle] = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^L f\left(\frac{x}{L}\right) L^2 \mu^L[\Omega_{L,\tau}^H \eta_{L^2\tau}(x)]$$

Riscriviamo il secondo membro utilizzando l'espressione (6.4) di $\Omega_{L,\tau}^H \eta(x)$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\tau} \mu^L[\langle \pi_{\tau}^L, f \rangle] &= \frac{L}{2} f(1) \mu^L \left[-2g(\eta_{L^2\tau}(L)) \left(1 + \frac{1}{2L^2} (\partial_u H)^2(\tau, 1) \right) + \right. \\ &\quad \left. + (g(\eta_{L^2\tau}(L-1)) + p_+ - \frac{1}{L} (g(\eta_{L^2\tau}(L-1)) - p_+) \partial_u H(\tau, 1) + \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2L^2} (g(\eta_{L^2\tau}(L-1)) + p_+ + 2g(\eta_{L^2\tau}(L))) \partial_u^2 H(\tau, 1) \right] +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{L}{2} f(-1) \mu^L \left[-2g(\eta_{L^2\tau}(-L)) \left(1 + \frac{1}{2L^2} (\partial_u H)^2(\tau, -1) \right) + (g(\eta_{L^2\tau}(-L+1)) + p_- + \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{L} (-g(\eta_{L^2\tau}(-L+1)) - p_-) \partial_u H(\tau, -1) + \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{2L^2} (g(\eta_{L^2\tau}(-L+1)) + p_- + 2g(\eta_{L^2\tau}(-L))) \partial_u^2 H(\tau, -1) \right] + \\
& + \frac{1}{L} \sum_{x=-L+1}^{L-1} \frac{L^2}{2} f\left(\frac{x}{L}\right) \mu^L \left[-2g(\eta_{L^2\tau}(x)) \left(1 + \frac{1}{2L^2} (\partial_u H)^2\left(\tau, \frac{x}{L}\right) \right) + \right. \\
& \quad \left. + (g(\eta_{L^2\tau}(x-1)) + g(\eta_{L^2\tau}(x+1))) + \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{L} (g(\eta_{L^2\tau}(x-1)) - g(\eta_{L^2\tau}(x+1))) \partial_u H\left(\tau, \frac{x}{L}\right) + \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{2L^2} (g(\eta_{L^2\tau}(x-1)) + g(\eta_{L^2\tau}(x+1)) + 2g(\eta_{L^2\tau}(x))) \partial_u^2 H\left(\tau, \frac{x}{L}\right) \right] + O\left(\frac{1}{L}\right)
\end{aligned}$$

Cambiando gli indici di sommatoria e facendo un po' di manipolazioni algebriche si arriva a:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\tau} \mu^L [\langle \pi_\tau^L, f \rangle] &= \frac{1}{2L} \sum_{x=-L}^L L^2 \left[f\left(\frac{x+1}{L}\right) + f\left(\frac{x-1}{L}\right) - 2f\left(\frac{x}{L}\right) \right] \mu^L [g(\eta_{L^2\tau}(x))] + \\
& + \frac{1}{2L} \sum_{x=-L}^L L \left[f\left(\frac{x+1}{L}\right) \partial_u H\left(\tau, \frac{x+1}{L}\right) - f\left(\frac{x-1}{L}\right) \partial_u H\left(\tau, \frac{x-1}{L}\right) \right] \mu^L [g(\eta_{L^2\tau}(x))] + \\
& - \frac{1}{4L} \sum_{x=-L}^L \left[f\left(\frac{x+1}{L}\right) \partial_u^2 H\left(\tau, \frac{x+1}{L}\right) + f\left(\frac{x-1}{L}\right) \partial_u^2 H\left(\tau, \frac{x-1}{L}\right) \right] 2\mu^L [g(\eta_{L^2\tau}(x))] + \\
& \quad + \frac{L}{2} \left\{ f(1)p_+ - f\left(1 + \frac{1}{L}\right) \mu^L [g(\eta_{L^2\tau}(L))] \right\} + \\
& \quad + \frac{L}{2} \left\{ f(-1)p_- - f\left(-1 - \frac{1}{L}\right) \mu^L [g(\eta_{L^2\tau}(-L))] \right\} + \\
& \quad - \frac{1}{2} \left\{ f(1) \partial_u H(\tau, 1) p_+ + f\left(1 + \frac{1}{L}\right) \partial_u H\left(\tau, 1 + \frac{1}{L}\right) \mu^L [g(\eta_{L^2\tau}(L))] \right\} + \\
& + \frac{1}{2} \left\{ f(-1) \partial_u H(\tau, -1) p_- + f\left(-1 - \frac{1}{L}\right) \partial_u H\left(\tau, -1 - \frac{1}{L}\right) \mu^L [g(\eta_{L^2\tau}(-L))] \right\} + O\left(\frac{1}{L}\right)
\end{aligned}$$

Effettuiamo il limite per $L \rightarrow \infty$ utilizzando la regolarità di $f(\cdot)$ e $H(\tau, \cdot)$ e sfruttando le ipotesi (5.17) e (5.18) fatte sul LED $\{\mu^L\}$:

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L [\langle \pi_\tau^L, f \rangle] \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int_{-1}^1 du \left\{ \frac{1}{2} f''(u) + \partial_u [f(u) \partial_u H(\tau, u)] - f(u) \partial_u^2 H(\tau, u) \right\} \varphi(\rho(\tau, u)) +$$

$$\begin{aligned}
& +\frac{1}{2}f(1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, 1)) - \frac{1}{2}f(-1)\partial_u\varphi(\rho(\tau, -1)) + \\
& -f(1)\partial_u H(\tau, 1)p_+ + f(-1)\partial_u H(\tau, -1)p_- - \frac{1}{2}f'(1)p_+ + \frac{1}{2}f'(-1)p_-
\end{aligned}$$

La relazione (6.6) si ottiene integrando per parti tutti i termini in cui compaiono derivate di $f(\cdot)$: i termini di bordo si cancellano a vicenda. Ciò conclude la dimostrazione dell'equazione idrodinamica (6.7).

6.3 Funzionale di grandi deviazioni

Cerchiamo ora il funzionale di grandi deviazioni. Lo schema che seguiremo è descritto nell'introduzione del capitolo.

Per non appesantire la trattazione ometteremo in un primo momento la derivazione esplicita di alcune relazioni, quando questa non è essenziale per la comprensione del testo e renderebbe difficoltoso seguire il processo logico.

6.3.1 Derivata di Radon-Nikodim

Bisogna calcolare la derivata di Radon-Nikodim:

$$\frac{dP_{L,\tau}^{\gamma(\cdot),H}}{dP_L}(\tau) = \frac{d\nu_{\gamma(\cdot)}}{d\mu_L} \frac{P_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau)$$

P_L è la probabilità nello spazio dei cammini $E = D([0, T] \times \mathcal{A}_N)$ definita dallo stato iniziale stazionario μ_L e dalla dinamica generata da Ω_L ;

$P_{L,\tau}^{\gamma(\cdot),H}$ è la probabilità su E definita da uno stato iniziale $\nu_{\gamma(\cdot)}$ di equilibrio locale associato al profilo di densità $\gamma(\cdot)$, e dinamica perturbata dal campo esterno $H(\cdot, \cdot)$, cioè generata da $\Omega_{L,\tau}^H$;

$P_{L,\tau}^H$ coincide con $P_{L,\tau}^{\gamma(\cdot),H}$ per stato iniziale stazionario, cioè per $\gamma(u) = \varphi^{-1}(p(u))$.

Il problema si scompone in:

1. una parte statica: $\frac{d\nu_{\gamma(\cdot)}}{d\mu_L}$ (che non presenta nessuna difficoltà);
2. ed una parte dinamica: $\frac{P_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau)$.

È essenziale scrivere tali derivate di Radon-Nikodim come funzioni della misura empirica $\pi_\tau(\cdot)$, a meno di correzioni superesponenzialmente piccole, cioè nella forma:

$$\begin{aligned}\frac{d\nu_{\gamma(\cdot)}}{d\mu_L} &= \exp L\{h_\gamma(\pi_0(\cdot))\} \\ \frac{dP_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau) &= \exp L\{J_H(\pi_{(\cdot)}(\cdot))\}\end{aligned}$$

In questo modo infatti si ha un'espressione variazionale del funzionale di grandi deviazioni:

$$I(\pi_{(\cdot)}(\cdot)) = h(\pi_0(\cdot)) + I_0(\pi_{(\cdot)}(\cdot))$$

dove:

$$\begin{aligned}h(\pi_0(\cdot)) &= \sup_{\gamma(\cdot) \in \mathcal{C}^1([-1,1])} h_{\gamma(\cdot)}(\pi_0(\cdot)) \\ I_0(\pi_{(\cdot)}(\cdot)) &= \sup_{H(\cdot, \cdot) \in \mathcal{C}^{1,2}([0,T] \times [-1,1])} J_H(\pi_{(\cdot)}(\cdot))\end{aligned}$$

A) parte dinamica

Un teorema generale sulle derivate di Radon-Nikodim (proposizione 4 in appendice B) assicura che:

$$\frac{P_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau) = \exp \left\{ F(\tau, \eta_{L^2\tau}) - F(\tau, \eta_0) - \int_0^\tau ds e^{-F(s, \eta_{L^2s})} (\partial_s + L^2 \Omega_L) e^{F(s, \eta_{L^2s})} \right\} \quad (6.8)$$

e nel nostro caso la funzione F è legata al campo esterno H da:

$$F(\tau, \eta) = \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta(x) H\left(\tau, \frac{x}{L}\right)$$

Inserendo questa espressione per la funzione F nella relazione (6.8) si riesce a scrivere la derivata di Radon-Nikodim nella seguente forma:

$$\begin{aligned}\frac{dP_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau) &= \exp L \left\{ \langle \pi_\tau^L, H_\tau \rangle - \langle \pi_0^L, H_0 \rangle - \int_0^\tau ds \langle \pi_s^L, \partial_s H_s \rangle + \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \frac{1}{L} \sum_{x=-L} Lg(\eta_{L^2s}(x)) [\partial_u^2 H(s, \frac{x}{L}) + (\partial_u H)^2(s, \frac{x}{L})] + \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \int_0^\tau ds [-p_+ \partial_u H(s, 1) + p_- \partial_u H(s, -1)] + O\left(\frac{1}{L}\right) + \\
& + \frac{1}{L} [\eta_{L^2\tau}(L+1)H(\tau, 1 + \frac{1}{L}) + \eta_{L^2\tau}(-L-1)H(\tau, -1 - \frac{1}{L}) + \\
& - \eta_0(L+1)H(0, 1 + \frac{1}{L}) - \eta_0(-L-1)H(0, -1 - \frac{1}{L}) + \\
& - \int_0^\tau ds \eta_{L^2s}(L+1) \partial_s H(s, 1 + \frac{1}{L}) - \int_0^\tau ds \eta_{L^2s}(-L-1) \partial_s H(s, -1 - \frac{1}{L})] \Big\} \\
& \hspace{15em} (6.9)
\end{aligned}$$

Nostro scopo è scrivere tutta l'espressione tra parentesi graffe come funzione della misura empirica a meno di termini che tendono a zero (in modo sufficientemente veloce) nel limite $L \rightarrow +\infty$. In particolare sappiamo che la misura empirica converge debolmente ad una misura assolutamente continua rispetto la misura di Lebesgue con densità $\rho(\cdot, \cdot)$; e vogliamo esprimere la derivata di Radon-Nikodim nella forma:

$$\frac{dP_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau) \simeq \exp L\{J_H(\rho(\cdot, \cdot))\} \quad (6.10)$$

cioè come funzionale dipendente solo dal profilo densità $\rho(\cdot, \cdot)$, a meno di termini superesponenzialmente piccoli.

1. Consideriamo subito il termine:

$$\frac{1}{2} \int_0^\tau ds \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^L g(\eta_{L^2s}(x)) [\partial_u^2 H(s, \frac{x}{L}) + (\partial_u H)^2(s, \frac{x}{L})]$$

Questo termine non è funzione della misura empirica, però possiamo supporre che valga un lemma di sostituzione superesponenziale (analogo a quelli dimostrati in [1, cap5]) e riscriverlo nella forma:

$$\frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(s, u)) [(\partial_u^2 H)(s, u) + (\partial_u H)^2(s, u)] \quad (6.11)$$

a meno di correzioni trascurabili nel limite $L \rightarrow \infty$. Questa è una sostituzione classica che si utilizza anche nello studio di sistemi di equilibrio (cf. ad esempio [14]).

2. Il termine nuovo è:

$$\frac{1}{2} \int_0^\tau ds [-p_+ \partial_u H(s, 1) + p_- \partial_u H(s, -1)] +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{L} \left[\eta_{L^2\tau}(L+1)H(\tau, 1 + \frac{1}{L}) + \eta_{L^2\tau}(-L-1)H(\tau, -1 - \frac{1}{L}) + \right. \\
& \quad \left. - \eta_0(L+1)H(0, 1 + \frac{1}{L}) - \eta_0(-L-1)H(0, -1 - \frac{1}{L}) + \right. \\
& \quad \left. - \int_0^\tau ds \eta_{L^2s}(L+1) \partial_s H(s, 1 + \frac{1}{L}) - \int_0^\tau ds \eta_{L^2s}(-L-1) \partial_s H(s, -1 - \frac{1}{L}) \right]
\end{aligned}$$

Anche questo dobbiamo cercare di riscriverlo come funzione della misura empirica; come prima cosa effettuiamo un'integrazione per parti nell'ultimo termine, considerando $\partial_s \eta_{L^2s}$ nel senso delle funzioni generalizzate. Una cosa interessante è che tutti i termini di bordo si cancellano a vicenda e resta:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \int_0^\tau ds [-p_+ \partial_u H(s, 1) + p_- \partial_u H(s, -1)] + \\
& + \frac{1}{L} \int_0^\tau [H(s, 1 + \frac{1}{L}) \partial_s \eta_{L^2s}(L+1) + H(s, -1 - \frac{1}{L}) \partial_s \eta_{L^2s}(-L-1)] \quad (6.12)
\end{aligned}$$

Notiamo che il secondo termine, pur essendo moltiplicato per $\frac{1}{L}$, non è infinitesimo; infatti $\partial_s \eta_{L^2s}$ è una derivata rispetto tempi macroscopici s di una funzione η_{L^2s} che varia su tempi microscopici, quindi è di ordine L^2 . Il significato di $\partial_s \eta_{L^2s}$ è quello di somma di funzioni tipo delta di Dirac che selezionano gli istanti di tempo in cui una particella entra o esce da $\pm L$. Riscriviamo cioè l'espressione (6.12) nella forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \int_0^\tau ds [-p_+ \partial_u H(s, 1) + p_- \partial_u H(s, -1)] + \\
& + \frac{1}{L} \left[\sum_{s_{[L \rightarrow L+1]}} H(s, 1 + \frac{1}{L}) - \sum_{s_{[L+1 \rightarrow L]}} H(s, 1 + \frac{1}{L}) + \right. \\
& \quad \left. + \sum_{s_{[-L \rightarrow -L-1]}} H(s, -1 - \frac{1}{L}) - \sum_{s_{[-L-1 \rightarrow -L]}} H(s, -1 - \frac{1}{L}) \right] \quad (6.13)
\end{aligned}$$

avendo indicato con $s_{[\pm L \rightarrow \pm(L+1)]}$ gli istanti in cui una particella esce da $\pm L$ nell'intervallo $[0, T]$ e con $s_{[\pm(L+1) \rightarrow \pm L]}$ gli istanti in cui una particella entra da $\pm L$ nell'intervallo $[0, T]$. Sfruttiamo ora la regolarità di H rispetto al tempo e ricordiamo che in un intervallo di tempo macroscopico ds (cioè un

intervallo microscopico $L^2 ds$), il numero di particelle che in media entra o esce dal reticolo è:

$$\begin{aligned} \text{esce da } L &: & \frac{1}{2}g(\eta(L))L^2 ds \\ \text{entra da } L &: & \frac{1}{2}p_+L^2 ds \\ \text{esce da } -L &: & \frac{1}{2}g(\eta(-L))L^2 ds \\ \text{entra da } -L &: & \frac{1}{2}p_-L^2 ds \end{aligned}$$

Poiché per L molto grande il numero di salti tende a coincidere con il valore aspettato, possiamo sostituire: $\sum \rightarrow \int L^2 ds \times$ (tasso) commettendo un errore trascurabile. L'espressione (6.13) risulta quindi, a meno di correzioni trascurabili, equivalente a:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^\tau ds [-p_+ \partial_u H(s, 1) + p_- \partial_u H(s, -1)] + \\ & + \frac{1}{L} \left[\int_0^\tau H(s, 1 + \frac{1}{L}) \frac{1}{2} g(\eta(L)) L^2 ds - \int_0^\tau H(s, 1 + \frac{1}{L}) \frac{1}{2} p_+ L^2 ds + \right. \\ & \left. + \int_0^\tau H(s, -1 - \frac{1}{L}) \frac{1}{2} g(\eta(-L)) L^2 ds - \int_0^\tau H(s, -1 - \frac{1}{L}) \frac{1}{2} p_- L^2 ds \right] = \end{aligned}$$

raggruppando i vari termini

$$\begin{aligned} = & \frac{1}{2} \int_0^\tau ds [-p_+ \partial_u H(s, 1) + p_- \partial_u H(s, -1)] + \frac{1}{2} \int_0^\tau \left\{ -L[p_+ - g(\eta_{L^2_s}(L))] H(s, 1 + \frac{1}{L}) + \right. \\ & \left. -L[p_- - g(\eta_{L^2_s}(-L))] H(s, -1 - \frac{1}{L}) \right\} \end{aligned} \quad (6.14)$$

A questo punto per poter procedere dobbiamo fare delle ipotesi fisiche forti, basandoci sul significato di p_+ e p_- , cioè di fugacità delle riserve di particelle (situate in posizione $\pm(L+1)$). Come prima cosa vincoliamo il profilo limite della misura empirica $\pi_\tau^N(du) \rightarrow \rho(\tau, u) du$ a soddisfare le condizioni al contorno:

$$\varphi(\rho(\tau, u)) = p_\pm$$

Inoltre immaginiamo che valgano dei lemmi di sostituzione che permettano di approssimare:

$$L[p_+ - g(\eta_{L^2_s}(L))] \stackrel{L \rightarrow \infty}{\simeq} \partial_u \varphi(\rho(s, 1)) \quad (6.15)$$

$$L[p_- - g(\eta_{L^2_s}(-L))] \stackrel{L \rightarrow \infty}{\simeq} -\partial_u \varphi(\rho(s, -1)) \quad (6.16)$$

a meno di correzioni che nel limite $L \rightarrow \infty$ non modificano l'espressione del funzionale di grandi deviazioni. È un'ipotesi analoga a quella (5.18) fatta nel ricavare l'equazione idrodinamica, ma più forte. Con tali sostituzioni l'espressione (6.14) diventa:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^\tau ds [-\varphi(\rho(s, 1))\partial_u H(s, 1) + \varphi(\rho(s, -1))\partial_u H(s, -1)] + \\ & - \partial_u \varphi(\rho(s, 1))H(s, 1) + \partial_u \varphi(\rho(s, -1))H(s, -1)] \end{aligned} \quad (6.17)$$

Unendo tutti questi risultati, ovvero sostituendo le espressioni (6.11) e (6.17) nella relazione (6.9), si arriva ad esprimere la derivata di Radom-Nikodim $\frac{dP_{L,\tau}^H}{dP_L}$ nella forma (6.10) con funzionale J_H definito da:

$$\begin{aligned} J_H(\pi(\cdot)) &= \langle \pi_\tau, H_\tau \rangle - \langle \pi_0, H_0 \rangle - \int_0^\tau ds \langle \pi_s, \partial_s H_s \rangle + \\ & - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \partial_u^2 \varphi(\rho(s, u))H(s, u) + \\ & - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(s, u))(\partial_u H)^2(s, u) \end{aligned} \quad (6.18)$$

B) parte statica

La parte statica non presenta nessuna difficoltà. A partire dalla forma esplicita (5.2) dello stato stazionario e dalla definizione di stato con profilo lentamente variabile si ha:

$$\begin{aligned} \frac{d\nu_{\gamma(\cdot)}(\eta)}{d\mu_L}(\eta) &= \prod_{x \in \Lambda_L} \frac{\frac{\varphi(\gamma(\frac{x}{L}))^{\eta(x)}}{g(\eta(x))!} \frac{1}{\mathcal{Z}(\varphi(\gamma(\frac{x}{L})))}}{\frac{p_L(x)^{\eta(x)}}{g(\eta(x))!} \frac{1}{\mathcal{Z}(p_L(x))}} = \\ &= \exp \sum_{x \in \Lambda_L} \left\{ \eta(x) \log \frac{\varphi(\gamma(\frac{x}{L}))}{p_L(x)} + \log \frac{\mathcal{Z}(p_L(x))}{\mathcal{Z}(\varphi(\gamma(\frac{x}{L})))} \right\} = \\ &= \exp L \left\{ \langle \pi_0^L, \log \frac{\varphi(\gamma(\cdot))}{p(\cdot)} \rangle + \langle \lambda^L, \log \frac{\mathcal{Z}(p(\cdot))}{\mathcal{Z}(\varphi(\gamma(\cdot)))} \rangle \right\} \end{aligned}$$

avendo indicato con λ^L la misura di Lebsgue discretizzata (concentrata sui punti del reticolo macroscopico $\frac{x}{L}$, con $x = -L, \dots, L$). Dunque abbiamo l'espressione del funzionale $h_{\gamma(\cdot)}$:

$$h_{\gamma(\cdot)}(\pi_0) = \langle \pi_0, \log \frac{\varphi(\gamma(\cdot))}{p(\cdot)} \rangle + \int_{-1}^1 du \log \frac{\mathcal{Z}(p(u))}{\mathcal{Z}(\varphi(\gamma(u)))} \quad (6.19)$$

6.3.2 Forma variazionale del funzionale di grandi deviazioni

Unendo i risultati (6.18) e (6.19) possiamo concludere che un buon candidato ad essere il funzionale di grandi deviazioni è fornito dalla seguente espressione variazionale:

$$I(\pi_{(\cdot)}) = h(\pi_0) + I_0(\pi_{(\cdot)}) \quad (6.20)$$

$$h(\pi_0) = \sup_{\gamma(\cdot) \in C^1([0,1])} h_{\gamma(\cdot)}(\pi_0) \quad (6.21)$$

$$h_{\gamma(\cdot)}(\pi_0) = \langle \pi_0, \log \frac{\varphi(\gamma(\cdot))}{p(\cdot)} \rangle + \int_{-1}^1 du \log \frac{\mathcal{Z}(p(u))}{\mathcal{Z}(\varphi(\gamma(u)))}$$

$$I_0(\pi_{(\cdot)}) = \sup_{H(\cdot, \cdot) \in C^{1,2}([0,T] \times [-1,1])} J_H(\pi_{(\cdot)}) \quad (6.22)$$

$$J_H(\pi_{(\cdot)}) = l_H(\pi_{(\cdot)}) - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(s, u)) (\partial_u H)^2(s, u)$$

$$l_H(\pi_{(\cdot)}) = \langle \pi_\tau, H_\tau \rangle - \langle \pi_0, H_0 \rangle - \int_0^\tau ds \langle \pi_s, \partial_s H_s \rangle + \\ - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \partial_u^2 \varphi(\rho(s, u)) H(s, u)$$

osservazioni

Tale espressione del funzionale di grandi deviazioni è la stessa di quella che si aveva in situazione di equilibrio (cf. ad esempio [14]); l'unica differenza consiste nel fatto che in l_H bisogna sostituire: $\varphi(\rho(s, u)) \partial_u^2 H(s, u) \rightarrow \partial_u^2 \varphi(\rho(s, u)) H(s, u)$. D'altro canto in situazione di equilibrio queste due espressioni sono equivalenti poiché si ottengono l'una dall'altra integrando due volte per parti, e grazie alle condizioni di periodicità tutti i termini di bordo risultano nulli.

Notiamo che non è stata data una dimostrazione rigorosa del fatto che il funzionale così ottenuto è proprio il funzionale di grandi deviazioni. In generale infatti, data una famiglia di martingale a media unitaria:

$$M_\beta = \exp\{-LJ_\beta(\pi_{(\cdot)}(\cdot))\}$$

si ha che il funzionale:

$$\tilde{I}(\pi_{(\cdot)}(\cdot)) = \sup_{\beta} J_{\beta}(\pi_{(\cdot)}(\cdot))$$

costituisce una stima inferiore del funzionale di grandi deviazioni:

$$\tilde{I}(\pi) \leq I(\pi)$$

e questa relazione è un'uguaglianza solo se la famiglia di martingale M_{β} è sufficientemente grande. Nel nostro caso bisognerebbe quindi dimostrare che la famiglia di martingale $\left\{ \frac{dP_L^{\gamma, H}}{dP_L} \right\}$ non è restrittiva.

Per il modello zero range di equilibrio (cf. [1]) c'è una dimostrazione rigorosa di questa affermazione ed è ragionevole pensare che l'estensione di tale dimostrazione al modello di non-equilibrio non costituisca un grosso problema.

6.3.3 Forma esplicita del funzionale di grandi deviazioni

Cerchiamo ora una forma esplicita del funzionale $I(\pi_{(\cdot)})$ a partire dalla forma variazionale (6.20).

parte statica

Al solito la parte statica non presenta difficoltà ed il $\sup_{\gamma_{(\cdot)}}$ si trova con un semplice calcolo variazionale. Consideriamo una misura $\pi_0^{\theta_{(\cdot)}}$ assolutamente continua rispetto la misura di Lebesgue con densità $\theta_{(\cdot)}$. Risulta allora:

$$h_{\gamma_{(\cdot)}}(\pi_0^{\theta_{(\cdot)}}) = \int_{-1}^1 du \left[\theta(u) \log \frac{\varphi(\gamma(u))}{p(u)} + \log \frac{\mathcal{Z}(p(u))}{\mathcal{Z}(\varphi(\gamma(u)))} \right]$$

ed il $\sup_{\gamma_{(\cdot)} \in C^1([-1,1])} h_{\gamma_{(\cdot)}}$ si ottiene massimizzando l'integrando rispetto $\gamma(u)$. Con un rapido calcolo si ha che l'integrale assume il valore massimo per: $\theta(u) = \gamma(u)$. Dunque:

$$h(\pi_0^{\theta_{(\cdot)}}) = \int_{-1}^1 du \left[\theta(u) \log \frac{\varphi(\theta(u))}{p(u)} + \log \frac{\mathcal{Z}(p(u))}{\mathcal{Z}(\varphi(\theta(u)))} \right]$$

Se invece π_0 non è assolutamente continua rispetto la misura di Lebesgue, scegliendo una successione di funzioni $\gamma_{(\cdot)}$ che tendono ad essere concentrate nella zona che ha misura di Lebesgue nulla ma misura π_0 positiva, si capisce subito che:

$$h(\pi_0) = +\infty$$

parte dinamica

Per la parte dinamica invece si utilizza una tecnica standard basata sull'applicazione del teorema di Riesz al funzionale $l_H(\pi(\cdot))$ visto come funzionale lineare su $H(\cdot, \cdot) \in C^{1,2}([0, T] \times [-1, 1])$ (cf. [1, cap.10]).

Definiamo nello spazio $C^{1,2} = C^{1,2}([0, T] \times [-1, 1])$ il prodotto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\pi(\cdot)} : C^{1,2} \times C^{1,2} \rightarrow \mathbb{R}$ tale che:

$$\langle H, G \rangle_{\pi(\cdot)} = \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(s, u)) \partial_u H(s, u) \partial_u G(s, u) \quad (6.23)$$

e consideriamo lo spazio di Hilbert ottenuto a partire da $C^{1,2}$ prendendo lo spazio quoziente rispetto al nucleo di $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\pi(\cdot)}$ e prendendo il completamento dello spazio così ottenuto: $H_2(\pi(\cdot)) = \overline{C^{1,2}([0, T] \times [-1, 1])}_{N(\langle \cdot, \cdot \rangle_{\pi(\cdot)})}$. Fissata la misura empirica $\pi(\cdot)$, il funzionale $l_H(\pi(\cdot))$ può essere visto come funzionale lineare a norma limitata su $H_2(\pi(\cdot))$; dunque per il teorema di Riesz deve esistere una funzione $\tilde{H}_{\pi(\cdot)} \in H_2(\pi(\cdot))$ tale che:

$$l_G(\pi(\cdot)) = \langle \tilde{H}_{\pi(\cdot)}, G \rangle_{\pi(\cdot)} \quad \forall G \in C^{1,2} \subset H_2(\pi(\cdot)) \quad (6.24)$$

Ricordando poi l'espressione (6.18) del funzionale J_H risulta:

$$J_G(\pi(\cdot)) = \langle \tilde{H}_{\pi(\cdot)}, G \rangle_{\pi(\cdot)} - \frac{1}{2} \langle G, G \rangle_{\pi(\cdot)}$$

e capiamo subito come sarà il sup su G :

$$I_0(\pi(\cdot)) = \sup_{G \in C^{1,2}} J_G(\pi(\cdot)) = \frac{1}{2} \langle \tilde{H}_{\pi(\cdot)}, \tilde{H}_{\pi(\cdot)} \rangle_{\pi(\cdot)}$$

Ci resta solo da trovare la forma della funzione \tilde{H} che chiaramente dipende dalla scelta di $\pi(\cdot)$; a tale scopo facciamo l'ipotesi che il cammino $\pi(\cdot)$ sia del tipo: $\pi_\tau^{\gamma, H}(du) = \rho^{\gamma, H}(\tau, u) du$ con $\rho^{\gamma, H}(\cdot, \cdot)$ soluzione dell'equazione idrodinamica (6.7) del sistema con campo $H(\cdot, \cdot)$ e di profilo iniziale $\gamma(\cdot)$. In tal caso si ottiene:

$$\tilde{H} = H \quad (6.25)$$

purché H soddisfi il vincolo:

$$p_+ H(s, 1) \partial_u H(s, 1) = p_- H(s, -1) \partial_u H(s, -1) \quad (6.26)$$

e questo è sempre possibile sfruttando il fatto che il campo H è definito a meno di una costante additiva.

conclusione

Nella situazione in cui il cammino $\pi_{(\cdot)}$ è del tipo $\pi_{\tau}^{\gamma, H}(du) = \rho^{\gamma, H}(\tau, u)du$ con $\rho^{\gamma, H}(\cdot, \cdot)$ soluzione delle equazioni (6.7) e il campo H soddisfa il vincolo (6.26), allora conosciamo la forma esplicita del funzionale di grandi deviazioni:

$$I(\pi_{(\cdot)}) = h(\pi_0) + I_0(\pi_{(\cdot)})$$

$$h(\pi_0) = \int_{-1}^1 du \left[\gamma(u) \log \frac{\varphi(\gamma(u))}{p(u)} + \log \frac{\mathcal{Z}(p(u))}{\mathcal{Z}(\varphi(\gamma(u)))} \right] \quad (6.27)$$

$$I_0(\pi_{(\cdot)}) = \frac{1}{2} \int_0^{\tau} ds \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(s, u)) [\partial_u H(s, u)]^2 \quad (6.28)$$

nota

Vorremmo conoscere il funzionale di grandi deviazioni nello spazio dei cammini $D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$, invece ne abbiamo trovato l'espressione solo per quei cammini tali che: $\pi_{\tau}^{\gamma, H}(du) = \rho^{\gamma, H}(\tau, u)du$. Ciò non dovrebbe costituire un grosso problema poiché si può far vedere che i cammini di questo tipo formano un sottoinsieme denso; dunque minimizzare il funzionale su tali cammini equivale a minimizzare su tutto $D([0, T] \times \mathcal{M}_+)$.

Dimostrazioni

Come annunciato all'inizio del paragrafo, deriviamo esplicitamente alcune relazioni lasciate in sospeso.

relazione (6.9)

Sostituendo l'espressione esplicita della funzione $F(\tau, \eta)$ nella relazione (6.8) abbiamo:

$$\frac{P_{L, \tau}^H}{dP_L}(\tau) = \exp \left\{ \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2 \tau}(x) H\left(\tau, \frac{x}{L}\right) - \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_0(x) H\left(0, \frac{x}{L}\right) + \right.$$

$$\left. - \int_0^{\tau} ds \exp \left[- \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2 s}(x) H\left(s, \frac{x}{L}\right) \right] (\partial_s + L^2 \Omega_L) \exp \left[\sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2 s}(x) H\left(s, \frac{x}{L}\right) \right] \right\} \quad (6.29)$$

Consideriamo separatamente i vari termini tra parentesi graffe. Le prime due

somme si riscrivono così:

$$\begin{aligned} \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2\tau}(x)H(\tau, \frac{x}{L}) &= L \langle \pi_\tau^L, H_\tau \rangle + \eta_{L^2\tau}(L+1)H(\tau, 1 + \frac{1}{L}) + \\ &+ \eta_{L^2\tau}(-L-1)H(\tau, -1 - \frac{1}{L}) \end{aligned} \quad (6.30)$$

$$\begin{aligned} \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_0(x)H(0, \frac{x}{L}) &= L \langle \pi_0^L, H_0 \rangle + \eta_0(L+1)H(0, 1 + \frac{1}{L}) + \\ &+ \eta_0(-L-1)H(0, -1 - \frac{1}{L}) \end{aligned} \quad (6.31)$$

Consideriamo ora l'integrando dell'ultimo termine. La derivata temporale agisce solo sul campo H e quindi risulta:

$$\begin{aligned} \exp \left[- \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(x)H(s, \frac{x}{L}) \right] \partial_s \exp \left[\sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(x)H(s, \frac{x}{L}) \right] &= \\ = \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(x) \partial_s H(s, \frac{x}{L}) &= L \langle \pi_s^L, \partial_s H_s \rangle + \\ + \eta_{L^2s}(L+1) \partial_s H(s, 1 + \frac{1}{L}) &+ \eta_{L^2s}(-L-1) \partial_s H(s, -1 - \frac{1}{L}) \end{aligned} \quad (6.32)$$

Resta da considerare nell'integrando a secondo membro della (6.29) la parte in cui c'è l'azione del generatore Ω_L . A partire dalla definizione del generatore abbiamo:

$$\begin{aligned} \exp \left[- \sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(x)H(s, \frac{x}{L}) \right] L^2 \Omega_L \exp \left[\sum_{x=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(x)H(s, \frac{x}{L}) \right] &= \\ = \exp \left[- \sum_{z=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(z)H(s, \frac{z}{L}) \right] \frac{1}{2} L^2 \times \\ \times \left\{ \sum_{x=-L}^L g(\eta(x)) \left[\exp \left(\sum_{z=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}^{x,x+1}(z)H(s, \frac{z}{L}) \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \exp \left(\sum_{z=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}^{x,x-1}(z)H(s, \frac{z}{L}) \right) - 2 \exp \left(\sum_{z=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(z)H(s, \frac{z}{L}) \right) \right] \right\} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +p_+ \left[\exp \left(\sum_{z=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}^L(z) H(s, \frac{z}{L}) \right) - \exp \left(\sum_{z=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(z) H(s, \frac{z}{L}) \right) \right] + \\
& +p_- \left[\exp \left(\sum_{z=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}^{-L}(z) H(s, \frac{z}{L}) \right) - \exp \left(\sum_{z=-L-1}^{L+1} \eta_{L^2s}(z) H(s, \frac{z}{L}) \right) \right] \Big\} = \\
& = \frac{1}{2} L^2 \left\{ \sum_{x=-L}^L g(\eta(x)) \left[e^{H(s, \frac{x+1}{L}) - H(s, \frac{x}{L})} + e^{H(s, \frac{x-1}{L}) - H(s, \frac{x}{L})} - 2 \right] + \right. \\
& \quad \left. + p_+ \left[e^{H(s, 1) - H(s, 1 + \frac{1}{L})} - 1 \right] + p_- \left[e^{H(s, -1) - H(s, -1 - \frac{1}{L})} - 1 \right] \right\} = \\
& \text{sviluppiamo in potenze di } \frac{1}{L} \text{ e sfruttando la regolarità di } H(\cdot, \cdot) \\
& = \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^L g(\eta(x)) \left[(\partial_u^2 H)(s, \frac{x}{L}) + (\partial_u H)^2(s, \frac{x}{L}) + O\left(\frac{1}{L}\right) \right] + \\
& \quad + \frac{L}{2} \left[-p_+ \partial_u H(s, 1) + p_- \partial_u H(s, -1) + O\left(\frac{1}{L}\right) \right] \tag{6.33}
\end{aligned}$$

Sostituendo le espressioni (6.30), (6.31), (6.32) e (6.33) nella (6.29) si ottiene facilmente la relazione (6.9) che volevamo dimostrare.

relazione (6.18)

Partiamo dall'espressione (6.9) per la derivata di Radom-Nikodim $\frac{dP_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau)$. Usando le sostituzioni descritte dalle relazioni (6.11) e (6.17) si arriva a:

$$\begin{aligned}
\frac{dP_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau) &= \exp L \left\{ \langle \pi_\tau^L, H_\tau \rangle - \langle \pi_0^L, H_0 \rangle - \int_0^\tau ds \langle \pi_s^L, \partial_s H_s \rangle + \right. \\
& \quad - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(s, u)) [\partial_u^2 H(s, u) + (\partial_u H)^2(s, u)] + \\
& \quad + \frac{1}{2} \int_0^\tau ds [-\varphi(\rho(s, 1)) \partial_u H(s, 1) + \varphi(\rho(s, -1)) \partial_u H(s, -1) + \\
& \quad \left. - \partial_u \varphi(\rho(s, 1)) H(s, 1) + \partial_u \varphi(\rho(s, -1)) H(s, -1)] \right\} + \text{(correzioni)}
\end{aligned}$$

Tutti i termini di bordo si cancellano qualora si integra due volte per parti il termine integrale con la derivata seconda del campo H . Si ottiene dunque:

$$\frac{dP_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau) = \exp L \left\{ \langle \pi_\tau^L, H_\tau \rangle - \langle \pi_0^L, H_0 \rangle - \int_0^\tau ds \langle \pi_s^L, \partial_s H_s \rangle + \right.$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \partial_u^2 \varphi(\rho(s, u)) H(s, u) + \\
& -\frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(s, u)) (\partial_u H)^2(s, u) \Big\} + \text{(correzioni)}
\end{aligned}$$

Tale relazione fornisce direttamente l'espressione (6.18) del funzionale J_H , definito da:

$$\frac{dP_{L,\tau}^H}{dP_L}(\tau) \simeq \exp LJ_H(\pi)$$

relazione (6.25)

Sia $\rho^{\gamma,H}(\tau, u)$ la soluzione (unica) dell'equazione idrodinamica con campo esterno H e profilo iniziale γ :

$$\begin{aligned}
\partial_\tau \rho^{\gamma,H}(\tau, u) &= \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho^{\gamma,H}(\tau, u)) - \partial_u [\varphi(\rho^{\gamma,H}(\tau, u)) \partial_u H(\tau, u)] \quad (6.34) \\
\rho^{\gamma,H}(0, u) &= \gamma(u) \\
\varphi(\rho^{\gamma,H}(\tau, \pm 1)) &= p_\pm
\end{aligned}$$

Moltiplicando ambo i membri per $H(s, u)$ ed integrando in ds e du si ottiene:

$$\begin{aligned}
\int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \partial_s \rho^{\gamma,H}(s, u) H(s, u) &= \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \partial_u^2 \varphi(\rho^{\gamma,H}(s, u)) H(s, u) + \\
& - \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \partial_u [\varphi(\rho^{\gamma,H}(s, u)) \partial_u H(s, u)] H(s, u)
\end{aligned}$$

Integrando il membro di sinistra per parti rispetto al tempo ed il secondo termine del membro di destra per parti rispetto allo spazio si ha:

$$\begin{aligned}
& \int_{-1}^1 du \rho^{\gamma,H}(\tau, u) H(\tau, u) - \int_{-1}^1 du \rho^{\gamma,H}(0, u) H(0, u) - \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \rho^{\gamma,H}(s, u) \partial_s H(s, u) + \\
& - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \partial_u^2 \varphi(\rho^{\gamma,H}(s, u)) H(s, u) = \\
& = - \int_0^\tau ds \varphi(\rho^{\gamma,H}(s, u)) H(s, u) \partial_u H(s, u) \Big|_{-1}^1 + \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \varphi(\rho^{\gamma,H}(s, u)) [\partial_u H(s, u)]^2
\end{aligned}$$

Riconosciamo nel primo membro il funzionale l_H calcolato nel cammino $\pi^{\gamma,H}$ tale che: $\pi^{\gamma,H}(\tau, du) = \rho^{\gamma,H}(\tau, u) du$. L'ultimo termine a secondo membro è invece il prodotto scalare $\langle H, H \rangle_{\pi^{\gamma,H}}$. Abbiamo cioè:

$$l_H(\pi^{\gamma,H}) = \langle H, H \rangle_{\pi^{\gamma,H}} - \int_0^\tau ds \varphi(\rho^{\gamma,H}(s, u)) H(s, u) \partial_u H(s, u) \Big|_{-1}^1$$

Dunque, se il campo H soddisfa le condizioni al bordo (6.26), possiamo concludere che:

$$l_H(\pi^{\gamma, H}) = \langle H, H \rangle_{\pi^{\gamma, H}}$$

ovvero possiamo identificare:

$$\tilde{H} = H$$

che è proprio quello che volevamo dimostrare.

6.4 Minimizzazione del funzionale di grandi deviazioni: traiettoria più probabile

Vogliamo cercare il punto di minimo del funzionale $I(\pi_{(\cdot)})$ nell'insieme $\mathcal{G}_{\gamma(\cdot)}$ di tutte le traiettorie $\pi_{(\cdot)}$ assolutamente continue rispetto la misura di Lebesgue tali che: $\pi_\tau(du) = \rho(\tau, u)du$, con vincoli $\varphi(\rho(-\infty, u)) = p(u)$ e $\rho(0, u) = \gamma(u)$. Tale punto di minimo descrive la traiettoria più probabile che genera la fluttuazione di profilo $\gamma(\cdot)$.

Enunciamo subito il risultato; la traiettoria più probabile di grandi deviazioni è soluzione dell'equazione idrodinamica aggiunta invertita nel tempo:

$$\begin{aligned} \partial_\tau \rho(\tau, u) &= -\frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) + \alpha \partial_u \left[\frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \right] \\ \varphi(\rho(\tau, \pm 1)) &= p_\pm \\ \rho(0, u) &= \gamma(u) \end{aligned} \quad (6.35)$$

Questo risultato generalizza la relazione di Onsager-Machlup secondo cui, quando c'è reversibilità microscopica rispetto al tempo, la traiettoria più probabile che genera fluttuazione dall'equilibrio è soluzione dell'equazione idrodinamica invertita temporalmente. Nel caso di reversibilità microscopica infatti (cioè quando vale il bilancio dettagliato) il processo diretto ed il processo aggiunto coincidono.

Dimostrazione

Nella dimostrazione seguiremo il seguente schema:

1. Cerchiamo per quale campo H^* l'equazione idrodinamica con campo esterno H^* si riduce all'equazione aggiunta invertita nel tempo (6.35).
2. Studiamo il funzionale di grandi deviazioni nel punto π^* tale che $\pi_\tau^*(du) = \rho^*(\tau, u)$, essendo $\rho^*(\cdot, \cdot)$ la soluzione dell'equazione idrodinamica aggiunta invertita nel tempo (6.35).

3. Infine studiamo il funzionale $\Delta(\rho) = I(\rho) - I(\rho^*)$ e verifichiamo che è definito positivo e si annulla solo per $\rho = \rho^*$.

Questo è lo stesso schema utilizzato nella verifica del principio di Onsager-Machlup per il modello zero range di equilibrio ed è stato introdotto da D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, C. Landim e M. E. Vares (cf. [12]).

A) *Ricerca di H^**

Vogliamo vedere per quale H l'equazione idrodinamica con campo esterno (6.7):

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \partial_u [\varphi(\rho(\tau, u)) \partial_u H(\tau, u)]$$

si riduce all'equazione idrodinamica aggiunta invertita temporalmente (6.35):

$$\partial_\tau \rho(\tau, u) = -\frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) + \alpha \partial_u \left[\frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \right]$$

Ciò avviene per:

$$H^*(\tau, u) = \log \frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \quad (6.36)$$

ed osserviamo subito che con tale scelta è verificata la condizione (6.26) poiché $H^*(s, 1) = H^*(s, -1) = 0$.

B) *Calcolo di $I_0(\rho^*)$*

Cerchiamo il funzionale $I_0(\cdot)$ nel punto ρ^* partendo dall'espressione (6.27):

$$I_0(\rho^*(\cdot, \cdot)) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \varphi(\rho^*(\tau, u)) [\partial_u H^*(\tau, u)]^2 \quad (6.37)$$

dove ρ^* è la soluzione (unica) dell'equazione idrodinamica:

$$\begin{aligned} \partial_\tau \rho^*(\tau, u) &= -\frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho^*(\tau, u)) + \alpha \partial_u \left[\frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \right] \\ \varphi(\rho^*(\tau, \pm 1)) &= p_\pm \\ \rho^*(0, u) &= \gamma(u) ; \quad \varphi(\rho^*(-\infty, u)) = p(u) \end{aligned} \quad (6.38)$$

Sostituendo l'espressione (6.36) di H^* in quella (6.37) di $I_0(\rho^*)$ si ottiene:

$$I_0(\rho^*(\cdot, \cdot)) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \varphi(\rho^*(\tau, u)) \left[\partial_u \log \frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \right]^2 =$$

integrando per parti una delle due derivate:

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 d\tau \left\{ p(u) \partial_u \left[\frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \right] \log \frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \Big|_{-1}^1 + \right. \\ \left. - \int_{-1}^1 du \log \frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \partial_u \left[p(u) \partial_u \left(\frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \right) \right] \right\}$$

Il termine di bordo si annulla poiché $\frac{\varphi(\rho^*(\tau, \pm 1))}{p(\pm 1)} = 1$; quindi resta:

$$I_0(\rho^*(\cdot, \cdot)) = \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \log \frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \left\{ -\frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho^*(\tau, u)) + \alpha \partial_u \frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \right\} + \\ - \frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \log \frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \partial_u \left(\frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \right)$$

Riconosciamo nel primo termine il secondo membro dell'equazione idrodinamica (6.38) che definisce ρ^* . Il secondo termine invece risulta nullo da un calcolo diretto. Risulta quindi:

$$I_0(\rho^*(\cdot, \cdot)) = \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \log \frac{\varphi(\rho^*(\tau, u))}{p(u)} \partial_\tau \rho^*(\tau, u) =$$

integrando rispetto al tempo

$$= \left\{ \int_{-1}^1 du \int^{\rho^*(\tau, u)} d\rho \log \varphi(\rho) - \int_{-1}^1 du \log p(u) \rho^*(\tau, u) \right\}_{-\infty}^0$$

A questo punto notiamo che questa espressione di $I(\rho^*)$ dipende da ρ^* solo tramite il profilo agli istanti $-\infty$ e 0 . Quindi, qualunque sia il cammino $\rho(\cdot, \cdot)$ all'interno dell'insieme $\mathcal{G}_{\gamma(\cdot)}$, cioè con profilo fissato agli istanti $-\infty$ e 0 , risulta:

$$I(\rho^*) = \left\{ \int_{-1}^1 du \int^{\rho(\tau, u)} d\rho \log \varphi(\rho) - \int_{-1}^1 du \log p(u) \rho(\tau, u) \right\}_{-\infty}^0 \quad (6.39)$$

C) *Studio del segno di $\Delta(\rho)$*

Partendo dalla definizione di $\Delta(\rho)$ e dalla espressione (6.39) di $I(\rho^*)$ appena trovata risulta, per ogni $\rho = \rho^{\gamma, H} \in \mathcal{G}_{\gamma(\cdot)}$:

$$\Delta(\rho) = I(\rho) - I(\rho^*) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(\tau, u)) [\partial_u H(\tau, u)]^2 +$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{-\infty}^0 d\tau \partial_\tau \left\{ \int_{-1}^1 du \int^{\rho(\tau, u)} d\rho \log \varphi(\rho) - \int_{-1}^1 du \log p(u) \rho(\tau, u) \right\} = \\
& = \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \left\{ \frac{1}{2} \varphi(\rho(\tau, u)) [\partial_u H(\tau, u)]^2 - \log \frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \partial_\tau \rho(\tau, u) \right\}
\end{aligned}$$

La derivata rispetto al tempo di $\rho(\tau, u)$ si riscrive utilizzando l'equazione idrodinamica (con campo esterno H). In questo modo si ottiene:

$$\begin{aligned}
\Delta(\rho) = & \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \left\{ \frac{1}{2} \varphi(\rho(\tau, u)) [\partial_u H(\tau, u)]^2 + \right. \\
& \left. - \log \frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \left[\frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi(\rho(\tau, u)) - \partial_u (\varphi(\rho(\tau, u)) \partial_u H(\tau, u)) \right] \right\}
\end{aligned}$$

Integrando per parti tutti i termini di bordo si eliminano poiché $\log \frac{\varphi(\rho(\tau, \pm 1))}{p(\pm 1)} = 0$. Possiamo quindi riscrivere:

$$\begin{aligned}
\Delta(\rho) = & \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \left\{ \frac{1}{2} \varphi(\rho(\tau, u)) [\partial_u H(\tau, u)]^2 + \right. \\
& \left. + \frac{1}{2} \partial_u \varphi(\rho(\tau, u)) \partial_u \log \frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} + \varphi(\rho(\tau, u)) \partial_u H(\tau, u) \partial_u \log \frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \right\}
\end{aligned}$$

sostituiamo la funzione H con la nuova funzione:

$$F(\tau, u) = H(\tau, u) - \log \frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \Leftrightarrow H(\tau, u) = F(\tau, u) + \log \frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)} \quad (6.40)$$

e l'unico termine che resta dopo qualche manipolazione algebrica è:

$$\Delta(\rho) = \int_{-\infty}^0 d\tau \int_{-1}^1 du \varphi(\rho(\tau, u)) [\partial_u F(\tau, u)]^2 \quad (6.41)$$

Dunque possiamo concludere che $\Delta(\rho)$ ha segno definito positivo e si annulla (a meno di una costante additiva) solo per $F = 0 \Leftrightarrow H(\tau, u) = \log \frac{\varphi(\rho(\tau, u))}{p(u)}$; e ciò equivale a dire $H = H^*$ e $\rho = \rho^*$, che è proprio quello che volevamo dimostrare.

□

6.5 Modello a due componenti

Nel seguito ripeteremo lo studio fatto fin'ora, adattandolo ad un modello con due tipi di particelle, in modo da poter verificare le relazioni di simmetria di Onsager.

definizione del modello

In ogni punto x del reticolo unidimensionale $\Lambda_L = \{-L, \dots, L\}$ indichiamo con $\eta_1(x)$ il numero di particelle di tipo 1 e con $\eta_2(x)$ il numero di particelle di tipo 2. Quindi lo spazio di tutte le configurazioni possibili del sistema è $\mathcal{A}_L = \mathbb{N}^{\Lambda_L} \times \mathbb{N}^{\Lambda_L}$ ed i suoi elementi sono le configurazioni $\vec{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$, con $\eta_a = (\eta_a(-L), \dots, \eta_a(L))$, $a = 1, 2$. Lo spazio dei cammini è la collezione delle funzioni $\vec{\eta}(\cdot) : [0, T] \rightarrow \mathcal{A}_L$ continue a sinistra (dinamica a salti): $E = D([0, T] \times \mathcal{A}_L)$.

Per quanto riguarda l'evoluzione del sistema diciamo che i salti delle singole particelle avvengono solo tra primi vicini ed in modo simmetrico verso destra e verso sinistra. Inoltre le interazioni locali tra le particelle non distinguono il tipo di particella; cioè una particella di tipo 1 interagisce allo stesso modo sia con particelle di tipo 1 che con particelle di tipo 2. Nel modello ad una componente la frequenza media con cui una generica particella del sito x salta verso un sito vicino è $g(\eta(x))$. Per il modello a due componenti, poiché l'interazione non distingue il tipo di particella, il tasso di transizione con cui una generica particella in x salta via da x è proprio $g(\eta_1(x) + \eta_2(x))$; quindi il tasso di transizione con cui una particella di tipo a salta via da x risulta $g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \frac{\eta_a(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)}$ (Il fattore $\frac{\eta_a(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)}$ è la probabilità che, pescando a caso una particella in x , sia di tipo a). Infine il sistema è tenuto fuori dall'equilibrio dal contatto con delle riserve di particelle: al bordo destro ($-L$) c'è una riserva di particelle di tipo 1 di potenziale chimico $\lambda_1^- = \log p_1^-$ ed una riserva di particelle di tipo 2 di potenziale chimico $\lambda_2^- = \log p_2^-$; analogamente al bordo sinistro ci sono due riserve di potenziali chimici $\lambda_1^+ = \log p_1^+$ (di particelle di tipo 1) e $\lambda_2^+ = \log p_2^+$ (di particelle di tipo 2).

In conclusione il generatore della dinamica Ω_L è definito da:

$$\begin{aligned}
 (\Omega_L f)(\vec{\eta}) &= \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \frac{\eta_1(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)} [f(\eta_1^{x,x+1}, \eta_2) + \\
 &+ f(\eta_1^{x,x-1}, \eta_2) - 2f(\eta_1, \eta_2)] + \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \frac{\eta_2(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)} \times \\
 &\times [f(\eta_1, \eta_2^{x,x+1}) + f(\eta_1, \eta_2^{x,x-1}) - 2f(\eta_1, \eta_2)] + \\
 &+ \frac{1}{2} p_1^+ [f(\eta_1^{+L}, \eta_2) - f(\eta_1, \eta_2)] + \frac{1}{2} p_1^- [f(\eta_1^{-L}, \eta_2) - f(\eta_1, \eta_2)] + \\
 &+ \frac{1}{2} p_2^+ [f(\eta_1, \eta_2^{+L}) - f(\eta_1, \eta_2)] + \frac{1}{2} p_2^- [f(\eta_1, \eta_2^{-L}) - f(\eta_1, \eta_2)]
 \end{aligned} \tag{6.42}$$

Il modello conservativo di equilibrio, cioè con $p_1^\pm = p_2^\pm = 0$ e con condizioni di periodicità ai bordi, è già stato analizzato da D. Gabrielli, G.

Jona-Lasinio e C. Landim (cf. [13] e [14]). In tal caso restano costanti il numero di particelle di tipo 1 e 2; in conseguenza di ciò si ha una famiglia a due parametri di misure di equilibrio. Per parametri possiamo prendere le fugacità $(\varphi_1, \varphi_2) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$. Le misure di equilibrio $\bar{\nu}_{\varphi_1, \varphi_2}^L$ sono quindi misure prodotto sul reticolo:

$$\bar{\nu}_{\varphi_1, \varphi_2}^L[\vec{\eta}] = \prod_{x \in \Lambda_L} \bar{\nu}_{\varphi_1, \varphi_2}^L[\eta_1(x), \eta_2(x)]$$

con marginali:

$$\bar{\nu}_{\varphi_1, \varphi_2}^L[\eta_1(x) = k_1; \eta_2(x) = k_2] = \frac{1}{\mathcal{Z}(\varphi_1, \varphi_2)} \frac{\varphi_1^{k_1} \varphi_2^{k_2}}{g(k_1 + k_2)!} \frac{(k_1 + k_2)!}{k_1! k_2!} \quad (6.43)$$

essendo $\mathcal{Z}(\vec{\varphi})$ la costante di normalizzazione o funzione di partizione. Notiamo subito che la funzione di partizione $\mathcal{Z}(\varphi_1, \varphi_2)$ non è funzione di φ_1 e φ_2 separatamente ma solo della loro somma $\hat{\varphi} = \varphi_1 + \varphi_2$:

$$\mathcal{Z}(\varphi_1, \varphi_2) = \sum_{k_1, k_2 \in \mathbb{N}} \frac{(k_1 + k_2)!}{k_1! k_2!} \frac{\varphi_1^{k_1} \varphi_2^{k_2}}{g(k_1 + k_2)!} = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{(\varphi_1 + \varphi_2)^n}{g(n)!} = \mathcal{Z}(\hat{\varphi}) \quad (6.44)$$

In genere si cerca di parametrizzare le misure di equilibrio con le densità anziché le fugacità. Cerchiamo quindi le relazioni termodinamiche tra le densità (ρ_1, ρ_2) e le fugacità (φ_1, φ_2) . Date le fugacità (φ_1, φ_2) , le densità sono fissate tramite le relazioni:

$$\rho_a(\varphi_1, \varphi_2) = \bar{\nu}_{\varphi_1, \varphi_2}^L[\eta_a(0)] = \varphi_a \partial_{\varphi_a} \log \mathcal{Z}(\hat{\varphi}) \quad (6.45)$$

Dunque la somma delle densità $\hat{\rho} = \rho_1 + \rho_2$ è funzione solo di $\hat{\varphi}$:

$$\rho_1(\varphi_1, \varphi_2) + \rho_2(\varphi_1, \varphi_2) = \hat{\varphi} \partial_{\hat{\varphi}} \log \mathcal{Z}(\hat{\varphi}) = \hat{\rho}(\hat{\varphi}) \quad (6.46)$$

e quindi l'espressione (6.45) di $\rho_a(\varphi_1, \varphi_2)$ si può riscrivere:

$$\rho_a(\varphi_1, \varphi_2) = \frac{\varphi_a}{\varphi_1 + \varphi_2} \hat{\rho}(\hat{\varphi}) \quad (6.47)$$

Analogamente date le densità (ρ_1, ρ_2) sono fissate le fugacità (φ_1, φ_2) e sono date da:

$$\varphi_a(\rho_1, \rho_2) = \frac{\rho_a}{\rho_1 + \rho_2} \hat{\varphi}(\hat{\rho}) \quad (6.48)$$

essendo $\hat{\varphi}(\cdot)$ la funzione inversa di $\hat{\rho}(\cdot)$. In conclusione le misure di equilibrio ν_{ρ_1, ρ_2}^L parametrizzate dalle densità sono definite tramite:

$$\nu_{\rho_1, \rho_2}^L[\cdot] =: \bar{\nu}_{\varphi_1(\rho_1, \rho_2), \varphi_2(\rho_1, \rho_2)}^L[\cdot] \quad (6.49)$$

Da ciò si ottiene facilmente che:

$$\hat{\varphi}(\hat{\rho}) = \nu_{\rho_1, \rho_2} [g(\eta_1(0) + \eta_2(0))] \quad (6.50)$$

Nel seguito indicheremo con $b(\cdot)$ le funzioni:

$$b(\hat{\rho}) = \frac{\hat{\varphi}(\hat{\rho})}{\hat{\rho}} \quad \text{o} \quad b(\hat{\varphi}) = \frac{\hat{\varphi}}{\hat{\rho}(\hat{\varphi})}$$

(le due relazioni esprimono la stessa grandezza fisica vista come funzione di parametri diversi).

misura stazionaria di non-equilibrio

Per $p_a^+ \neq p_a^-$, $a = 1, 2$ il sistema non ha nessuna grandezza conservata ed esiste un'unica misura stazionaria μ_L su \mathcal{A}_L . La forma di tale misura è del tutto analoga a quella del modello con una componente; è una misura prodotto sul reticolo Λ_L :

$$\mu_L[\vec{\eta}] = \prod_{x \in \Lambda_L} \mu_L[\eta_1(x), \eta_2(x)]$$

con marginali:

$$\mu_L[\eta_1(x) = k_1, \eta_2(x) = k_2] = \frac{p_{1L}(x)^{k_1} p_{2L}(x)^{k_2} (k_1 + k_2)!}{g(k_1 + k_2)! k_1! k_2!} \frac{1}{\mathcal{Z}(p_{1L}(x) + p_{2L}(x))} \quad (6.51)$$

La costante di normalizzazione è la funzione di partizione:

$$\mathcal{Z}(\hat{p}) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{\hat{p}^n}{g(n)!}$$

In situazione stazionaria entrambe le particelle hanno fugacità con profilo lineare:

$$p_{aL}(x) + \frac{p_a^+ - p_a^-}{2(L+1)}x + \frac{p_a^+ + p_a^-}{2}$$

generatore aggiunto

Per verificare che μ_L è una misura stazionaria cerchiamo l'operatore aggiunto Ω_L^* rispetto μ_L e verifichiamo che è un generatore (cf. cap.1), cioè soddisfa le relazioni:

$$\Omega_L^*(\vec{\eta}, \vec{\zeta}) \geq 0 \quad \text{se} \quad \vec{\zeta} \neq \vec{\eta}$$

$$\Omega_L^*(\vec{\eta}, \vec{\eta}) < 0 \quad (6.52)$$

$$\sum_{\vec{\zeta} \in \mathcal{A}_L} \Omega_L^*(\vec{\eta}, \vec{\zeta}) = 0$$

A partire dalla definizione di generatore aggiunto, con un calcolo diretto si trova:

$$\begin{aligned} (\Omega_L^* f)(\vec{\eta}) &= \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \frac{\eta_1(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)} \times \\ &\quad \times \left[\frac{p_{1L}(x+1)}{p_{1L}(x)} (f(\eta_1^{x,x+1}, \eta_2) - f(\eta_1, \eta_2)) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{p_{1L}(x-1)}{p_{1L}(x)} (f(\eta_1^{x,x-1}, \eta_2) - f(\eta_1, \eta_2)) \right] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \frac{\eta_2(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)} \left[\frac{p_{2L}(x+1)}{p_{2L}(x)} (f(\eta_1, \eta_2^{x,x+1}) + \right. \\ &\quad \left. - f(\eta_1, \eta_2)) + \frac{p_{2L}(x-1)}{p_{2L}(x)} (f(\eta_1, \eta_2^{x,x-1}) - f(\eta_1, \eta_2)) \right] + \\ &+ \frac{1}{2} p_{1L}(L) [f(\eta_1^{+L}, \eta_2) - f(\eta_1, \eta_2)] + \frac{1}{2} p_{1L}(-L) [f(\eta_1^{-L}, \eta_2) - f(\eta_1, \eta_2)] + \\ &+ \frac{1}{2} p_{2L}(L) [f(\eta_1, \eta_2^{+L}) - f(\eta_1, \eta_2)] + \frac{1}{2} p_{2L}(-L) [f(\eta_1, \eta_2^{-L}) - f(\eta_1, \eta_2)] \end{aligned} \quad (6.53)$$

Da questo risultato appare evidente che Ω_L^* è un generatore (cioè verifica le proprietà (6.52)) a conferma del fatto che μ_L è una misura stazionaria. Inoltre Ω_L^* è distinto dal generatore diretto Ω_L (coincidono solo per $p_a^+ = p_a^-$); questo vuol dire che μ_L è una misura stazionaria ma non reversibile (non vale il bilancio dettagliato).

Dim. Verifichiamo esplicitamente l'espressione (6.53) del generatore aggiunto. Partiamo dalla definizione:

$$\langle h, \Omega_L f \rangle_{\mu_L} = \langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L}$$

per ogni coppia di funzioni cilindriche h ed f . Riscriviamo il membro di destra utilizzando l'espressione (6.42) del generatore diretto:

$$\langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} = \langle h, \Omega_L f \rangle_{\mu_L} = \sum_{\eta_1, \eta_2} \mu_L[\eta_1, \eta_2] h(\eta_1, \eta_2) \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \frac{\eta_1(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)} [f(\eta_1^{x,x+1}, \eta_2) + f(\eta_1^{x,x-1}, \eta_2) - 2f(\eta_1, \eta_2)] + \right. \\
& + \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \frac{\eta_2(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)} [f(\eta_1, \eta_2^{x,x+1}) + f(\eta_1, \eta_2^{x,x-1}) - 2f(\eta_1, \eta_2)] + \\
& + \frac{1}{2} p_1^+ [f(\eta_1^{+L}, \eta_2) - f(\eta_1, \eta_2)] + \frac{1}{2} p_1^- [f(\eta_1^{-L}, \eta_2) - f(\eta_1, \eta_2)] + \\
& \left. + \frac{1}{2} p_2^+ [f(\eta_1, \eta_2^{+L}) - f(\eta_1, \eta_2)] + \frac{1}{2} p_2^- [f(\eta_1, \eta_2^{-L}) - f(\eta_1, \eta_2)] \right\}
\end{aligned}$$

Effettuiamo dei cambi di variabile $\eta_a \rightarrow \zeta_a = \eta_a^{x,x\pm 1}$ o $\eta_a^{\pm L}$; $\eta_{1-a} = \zeta_{1-a}$, in modo che l'argomento della funzione f sia sempre (ζ_1, ζ_2) . Si ottiene così:

$$\begin{aligned}
\langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} &= \sum_{\zeta_1, \zeta_2} \sum_{a=1,2} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L-1} \mu_L[\zeta_a^{x+1,x}, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a^{x+1,x}, \zeta_{1-a}) \times \right. \\
& \times g(\zeta_a^{x+1,x}(x) + \zeta_{1-a}(x)) \frac{\zeta_a^{x+1,x}(x)}{\zeta_a^{x+1,x}(x) + \zeta_{1-a}(x)} + \\
& + \frac{1}{2} \mu_L[\zeta_a^L, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a^L, \zeta_{1-a}) g(\zeta_a^L(L) + \zeta_{1-a}(L)) \frac{\zeta_a^L(L)}{\zeta_a^L(L) + \zeta_{1-a}(L)} + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{x=-L+1}^{+L} \mu_L[\zeta_a^{x-1,x}, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a^{x-1,x}, \zeta_{1-a}) \times \\
& \times g(\zeta_a^{x-1,x}(x) + \zeta_{1-a}(x)) \frac{\zeta_a^{x-1,x}(x)}{\zeta_a^{x-1,x}(x) + \zeta_{1-a}(x)} + \\
& + \frac{1}{2} \mu_L[\zeta_a^{-L}, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a^{-L}, \zeta_{1-a}) g(\zeta_a^{-L}(-L) + \zeta_{1-a}(-L)) \frac{\zeta_a^{-L}(-L)}{\zeta_a^{-L}(-L) + \zeta_{1-a}(-L)} + \\
& - \frac{2}{2} \sum_{x=-L}^{+L} \mu_L[\zeta_a, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a, \zeta_{1-a}) g(\zeta_a(x) + \zeta_{1-a}(x)) \frac{\zeta_a(x)}{\zeta_a(x) + \zeta_{1-a}(x)} + \\
& + \frac{1}{2} p_a^- \mu_L[\zeta_a^{-L, -L-1}, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a^{-L, -L-1}, \zeta_{1-a}) f(\zeta_a, \zeta_{1-a}) + \\
& + \frac{1}{2} p_a^+ \mu_L[\zeta_a^{L, L+1}, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a^{L, L+1}, \zeta_{1-a}) f(\zeta_a, \zeta_{1-a}) + \\
& \left. - \frac{1}{2} p_a^- \mu_L[\zeta_a, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a, \zeta_{1-a}) - \frac{1}{2} p_a^+ \mu_L[\zeta_a, \zeta_{1-a}] h(\zeta_a, \zeta_{1-a}) \right\} f(\zeta_1, \zeta_2) \quad (6.54)
\end{aligned}$$

Per come è definita la misura μ_L valgono le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} \frac{\mu_L[\zeta_a^{x\pm 1, x}, \zeta_{1-a}]}{\mu_L[\zeta_a, \zeta_{1-a}]} &= \frac{p_{aL}(x)}{p_{aL}(x\pm 1)} \frac{g(\zeta_a(x\pm 1) + \zeta_{1-a}(x\pm 1))}{g(\zeta_a(x) + \zeta_{1-a}(x) + 1)} \times \\ &\quad \times \frac{\zeta_a(x) + \zeta_{1-a}(x) + 1}{\zeta_a(x\pm 1) + \zeta_{1-a}(x\pm 1)} \frac{\zeta_a(x\pm 1)}{\zeta_a(x) + 1} \\ \frac{\mu_L[\zeta_a^{\pm L}, \zeta_{1-a}]}{\mu_L[\zeta_a, \zeta_{1-a}]} &= p_{aL}(\pm L) \frac{1}{g(\zeta_a(\pm L) + \zeta_{1-a}(\pm L) + 1)} \frac{\zeta_a(\pm L) + \zeta_{1-a}(\pm L) + 1}{\zeta_a(\pm L) + 1} \\ \frac{\mu_L[\zeta_a^{\pm L, \pm(L+1)}, \zeta_{1-a}]}{\mu_L[\zeta_a, \zeta_{1-a}]} &= \frac{1}{p_{aL}(\pm L)} g(\zeta_a(x\pm 1) + \zeta_{1-a}(x\pm 1)) \frac{\zeta_a(\pm L)}{\zeta_a(\pm L) + \zeta_{1-a}(\pm L)} \end{aligned}$$

Facendo queste sostituzioni, riordinando i termini e con un po' di manipolazioni algebriche la relazione (6.54) assume la forma:

$$\begin{aligned} \langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} &= \sum_{\zeta_1, \zeta_2} f(\zeta_1, \zeta_2) \mu_L[\zeta_1, \zeta_2] \sum_{a=1,2} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{x=-L}^{+L-1} \frac{p_{aL}(x)}{p_{aL}(x+1)} g(\zeta_1(x+1) + \zeta_2(x+1)) \times \right. \\ &\quad \times \frac{\zeta_a(x+1)}{\zeta_1(x+1) + \zeta_2(x+1)} h(\zeta_a^{x+1, x}, \zeta_{1-a}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{x=-L+1}^{+L} \frac{p_{aL}(x)}{p_{aL}(x-1)} g(\zeta_1(x-1) + \zeta_2(x-1)) \times \\ &\quad \times \frac{\zeta_a(x-1)}{\zeta_1(x-1) + \zeta_2(x-1)} h(\zeta_a^{x-1, x}, \zeta_{1-a}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{p_a^+}{p_{aL}(L)} g(\zeta_1(L) + \zeta_2(L)) \frac{\zeta_a(L)}{\zeta_1(L) + \zeta_2(L)} h(\zeta_a^{L, L+1}, \zeta_{1-a}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{p_a^-}{p_{aL}(-L)} g(\zeta_1(-L) + \zeta_2(-L)) \frac{\zeta_a(-L)}{\zeta_1(-L) + \zeta_2(-L)} h(\zeta_a^{-L, -L-1}, \zeta_{1-a}) + \\ &\quad - \frac{2}{2} \sum_{x=-L}^{+L} g(\zeta_1(x) + \zeta_2(x)) \frac{\zeta_a(x)}{\zeta_1(x) + \zeta_2(x)} h(\zeta_a, \zeta_{1-a}) + \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} p_{aL}(L) h(\zeta_a^L, \zeta_{1-a}) + \frac{1}{2} p_{aL}(-L) h(\zeta_a^{-L}, \zeta_{1-a}) - \frac{1}{2} (p_a^+ + p_a^-) h(\zeta_a, \zeta_{1-a}) \right\} \end{aligned}$$

L'espressione tra parentesi graffe definisce l'azione del generatore aggiunto Ω_L^* sulla funzione cilindrica h . Per arrivare alla relazione (6.53) basta rinominare i siti reticolari: nel primo termine sostituiamo $x \rightarrow y = x + 1$, nel secondo termine $x \rightarrow y = x - 1$. Inoltre notiamo che il terzo e quarto termine

completano le somme dei primi due termini grazie al fatto che $p_a^+ \equiv p_{aL}(L+1)$ e $p_a^- \equiv p_{aL}(-L-1)$. Infine sfruttiamo la linearità dei profili p_{aL} sostituendo nel quinto termine $2 = \frac{p_{aL}(x+1)+p_{aL}(x-1)}{p_{aL}(x)}$ e nell'ultimo termine $p_a^- + p_a^+ = p_{aL}(-L) + p_{aL}(L)$. Si ottiene così:

$$\begin{aligned} \langle f, \Omega_L^* h \rangle_{\mu_L} &= \sum_{\zeta_1, \zeta_2} f(\zeta_1, \zeta_2) \mu_L[\zeta_1, \zeta_2] \sum_{a=1,2} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{y=-L}^L \frac{p_{aL}(y-1)}{p_{aL}(y)} \times \right. \\ & \quad g(\zeta_1(y) + \zeta_2(y)) \frac{\zeta_a(y)}{\zeta_1(y) + \zeta_2(y)} [h(\zeta_a^{y,y-1}, \zeta_{1-a}) - h(\zeta_a, \zeta_{1-a})] + \\ & \quad + \frac{1}{2} \sum_{y=-L}^L \frac{p_{aL}(y+1)}{p_{aL}(y)} g(\zeta_1(y) + \zeta_2(y)) \frac{\zeta_a(y)}{\zeta_1(y) + \zeta_2(y)} [h(\zeta_a^{y,y+1}, \zeta_{1-a}) - h(\zeta_a, \zeta_{1-a})] + \\ & \quad \left. + \frac{1}{2} p_{aL}(L) [h(\zeta_a^L, \zeta_{1-a}) - h(\zeta_a, \zeta_{1-a})] + \frac{1}{2} p_{aL}(-L) [h(\zeta_a^{-L}, \zeta_{1-a}) - h(\zeta_a, \zeta_{1-a})] \right\} \end{aligned}$$

e questa relazione fornisce la forma esplicita del generatore aggiunto (6.53). □

6.6 Relazioni di Onsager per il modello a due componenti

Le relazioni di reciprocità di Onsager valgono in generale per sistemi con dinamica microscopica reversibile e si esprimono dicendo che la matrice dei coefficienti di trasporto $L(\vec{\rho})$ è simmetrica; noi vogliamo verificare che valgono anche nel nostro modello di non-equilibrio.

Per calcolare i coefficienti di trasporto $L_{ab}(\vec{\rho})$ bisogna cercare la matrice di diffusione $D(\vec{\rho})$ definita dall'equazione idrodinamica:

$$\partial_\tau \vec{\rho} = \partial_u [D(\vec{\rho}) \partial_u \vec{\rho}]$$

ed inoltre bisogna calcolare il funzionale entropia $S(\vec{\gamma}(\cdot))$, definito come il valore del funzionale di grandi deviazioni $I(\cdot) : C^{1,2}(\mathbb{R}_+ \times \mathcal{M}_+) \rightarrow \mathbb{R}$ calcolato nella traiettoria più probabile che fluttua fuori dall'equilibrio:

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = \inf_{\vec{\rho}(\cdot, \cdot) \in \mathcal{G}_{\vec{\gamma}}} I(\vec{\rho}(\cdot, \cdot))$$

essendo $\mathcal{G}_{\vec{\gamma}}$ la collezione dei profili densità $\vec{\rho}(\cdot, \cdot)$ che soddisfano le condizioni: $\vec{\rho}(0, u) = \vec{\gamma}(u)$ e $\vec{\rho}(\infty, \cdot) = (\text{profilo stazionario})$.

Come detto nell'introduzione del capitolo, la matrice di Onsager è definita da:

$$L(\vec{\rho}) = D(\vec{\rho})R(\vec{\rho}) \quad (6.55)$$

dove $D(\vec{\rho})$ è la matrice dei coefficienti di diffusione; $R(\vec{\rho})$ è la matrice definita a partire dal funzionale entropia $S(\vec{\rho}(\cdot)) = \int s(\vec{\rho}(u))du$ tramite: $[R^{-1}(\vec{\rho})]_{ab} = \frac{\partial^2}{\partial \rho_a \partial \rho_b} s(\vec{\rho})$.

6.6.1 Modello con campo esterno

Il primo passo nello studio delle grandi deviazioni consiste nell'introdurre un modello perturbato da un campo esterno e nell'analizzarne il comportamento idrodinamico.

Dato il campo esterno $\vec{H}(\cdot, \cdot)$ il generatore della dinamica perturbata dal campo è:

$$\begin{aligned} (\Omega_{L,\tau}^H f)(\vec{\eta}) &= \frac{1}{2} \sum_{a=1,2} \left\{ \sum_{x=-L}^{+L} g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \frac{\eta_a(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)} \right. \\ &\quad \left[e^{H_a(\tau, \frac{x+1}{L}) - H_a(\tau, \frac{x}{L})} (f(\eta_a^{x,x+1}, \eta_{1-a}) - f(\eta_a, \eta_{1-a})) + \right. \\ &\quad \left. + e^{H_a(\tau, \frac{x-1}{L}) - H_a(\tau, \frac{x}{L})} (f(\eta_a^{x,x-1}, \eta_{1-a}) - f(\eta_a, \eta_{1-a})) \right] + \\ &\quad + p_a^+ e^{H_a(\tau, 1) - H_a(\tau, 1 + \frac{1}{L})} (f(\eta_a^{+L}, \eta_{1-a}) - f(\eta_a, \eta_{1-a})) + \\ &\quad \left. + p_a^- e^{H_a(\tau, -1) - H_a(\tau, -1 - \frac{1}{L})} (f(\eta_a^{-L}, \eta_{1-a}) - f(\eta_a, \eta_{1-a})) \right\} \quad (6.56) \end{aligned}$$

Il modello definito da questo generatore si riduce al modello diretto per $H_a = 0$ ed al modello aggiunto per $H_a(\tau, u) = \log p_a(u)$. Vogliamo verificare che l'equazione idrodinamica associata al modello perturbato dai campi \vec{H} è:

$$\partial_\tau \rho_a(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u^2 [\rho_a(\tau, u) b(\hat{\rho}(\tau, u))] - \partial_u [\rho_a(\tau, u) b(\hat{\rho}) \partial_u H_a(\tau, u)] \quad (6.57)$$

con vincoli al bordo sulla fugacità:

$$\rho_a(\tau, \pm 1) b(\hat{\rho}(\tau, \pm 1)) = p_a^\pm$$

Dim. La corrente di particelle di tipo a tra x ed i siti vicini è espressa per $x \in \Lambda_L$ da:

$$\Omega_{L,\tau}^H \eta_a(x) = \frac{1}{2} g(\eta_1(x+1) + \eta_2(x+1)) \frac{\eta_a(x+1)}{\eta_1(x+1) + \eta_2(x+1)} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times e^{-[H_a(\tau, \frac{x+1}{L}) - H_a(\tau, \frac{x}{L})]} \mathbb{1}_{\{x \neq L\}} + \frac{1}{2} g(\eta_1(x-1) + \eta_2(x-1)) \times \\
& \times \frac{\eta_a(x-1)}{\eta_1(x-1) + \eta_2(x-1)} e^{+[H_a(\tau, \frac{x}{L}) - H_a(\tau, \frac{x-1}{L})]} \mathbb{1}_{\{x \neq -L\}} - \frac{1}{2} g(\eta_1(x) + \eta_2(x)) \times \\
& \times \frac{\eta_a(x)}{\eta_1(x) + \eta_2(x)} \left[e^{+[H_a(\tau, \frac{x+1}{L}) - H_a(\tau, \frac{x}{L})]} + e^{-[H(\tau, \frac{x}{L}) - H_a(\tau, \frac{x-1}{L})]} \right] + \\
& + \frac{1}{2} p_a^+ \mathbb{1}_{x=L} e^{-[H(\tau, 1 + \frac{1}{L}) - H_a(\tau, 1)]} + \frac{1}{2} p_a^- \mathbb{1}_{x=-L} e^{[H(\tau, -1) - H_a(\tau, -1 - \frac{1}{L})]} \quad (6.58)
\end{aligned}$$

Si consideri quindi una LED $\{\mu^L\}$ (cf. le definizioni date nel cap.3) tale che:

$$\begin{aligned}
& T_{L^2\tau} D_{Lu} \mu^L \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \nu_{\vec{\rho}(\tau, u)} \\
& \lim_{L \rightarrow \infty} \mu^L [g(\eta_a(L^2\tau, \pm L))] = p_a^\pm \\
& \lim_{L \rightarrow \infty} L \{p_a^\pm - \mu^L [g(\eta_a(L^2\tau, \pm L))]\} = \pm \partial_u \varphi_a(\vec{\rho}(\tau, \pm 1))
\end{aligned}$$

Dato un generico campo scalare $\vec{f} \in C([-1, 1])^{\times 2}$, dobbiamo studiare per $L \sim \infty$:

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L [\langle \vec{\pi}_a^L, \vec{f} \rangle]$$

essendo $\vec{\pi}$ la misura empirica; dalla definizione e dalle equazioni di Kolmogorov risulta:

$$\frac{d}{d\tau} \mu^L [\langle \vec{\pi}_a^L, \vec{f} \rangle] = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^L \sum_{a=1,2} L^2 f_a\left(\frac{x}{L}\right) \mu^L [\Omega_{L,\tau}^H \eta_a(x)] =$$

per la (6.58) e trascurando tutti i termini infinitesimi per $L \rightarrow \infty$

$$= \int_{-1}^1 du \sum_{a=1,2} f_a(u) \left\{ \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi_a(\vec{\rho}(\tau, u)) - \partial_u [\varphi_a(\vec{\rho}(\tau, u)) \partial_u H_a(\tau, u)] \right\} + O\left(\frac{1}{L}\right)$$

da cui si ottiene la tesi. □

Sostituendo nella (6.57) $H_a = 0$ o $H_a(u) = \log p_a(u)$ si ottengono le equazioni idrodinamiche del processo diretto e del processo aggiunto rispettivamente. In particolare l'equazione idrodinamica del processo diretto si riscrive nella forma:

$$\partial_\tau \rho_a(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u \sum_{b=1,2} [b(\hat{\rho}(\tau, u)) \delta_{a,b} + \rho_a(\tau, u) b'(\hat{\rho}(\tau, u))] \partial_u \rho_b(\tau, u) \quad (6.59)$$

da cui si ottiene l'espressione della matrice di diffusione:

$$D_{ab}(\vec{\rho}) = b(\hat{\rho})\delta_{a,b} + b'(\hat{\rho})\rho_a \quad (6.60)$$

L'equazione idrodinamica del processo aggiunto è:

$$\partial_\tau \rho_a(\tau, u) = \frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi_a(\vec{\rho}(\tau, u)) - \partial_u [\varphi_a(\vec{\rho}(\tau, u)) \partial_u \log p_a(u)] \quad (6.61)$$

Un aspetto interessante è che l'equazione idrodinamica diretta, e dunque la matrice di diffusione, è la stessa che si ottiene per il modello di equilibrio (cf. [14]); l'unica differenza è che fuori dall'equilibrio ci sono vincoli sulla fugacità al bordo (Proprio come per il modello ad una componente).

6.6.2 Funzionale di grandi deviazioni

Per trovare il funzionale di grandi deviazioni bisogna calcolare la derivata di Radom-Nikodim $\frac{dP_{L;\tau}^H}{dP_L}(\tau)$ e cercare di esprimerla nella forma: $\frac{dP_{L;\tau}^H}{dP_L}(\tau) = \exp\{-LJ_H(\vec{\pi}_{(\cdot)}^L)\}$ a meno di correzioni trascurabili. Si parte dalla proposizione 4 presentata in app.B che ci permette di scrivere:

$$\begin{aligned} \frac{dP_{L;\tau}^H}{dP_L}(\tau) = & \exp \left\{ \sum_{x=-L-1}^{L+1} \sum_{a=1,2} \eta_a(L^2\tau, x) H_a(\tau, \frac{x}{L}) - \sum_{x=-L-1}^{L+1} \sum_{a=1,2} \eta_a(0, x) H_a(0, \frac{x}{L}) + \right. \\ & - \int_0^\tau ds \sum_{x=-L-1}^{L+1} \sum_{a=1,2} \eta_a(L^2s, x) \partial_s H_a(\tau, \frac{x}{L}) - \int_0^\tau ds \exp \left[- \sum_{x=-L-1}^{L+1} \sum_{a=1,2} \eta_a(L^2s, x) \times \right. \\ & \left. \left. \times H_a(s, \frac{x}{L}) \right] L^2 \Omega_L \exp \left[\sum_{x=-L-1}^{L+1} \sum_{a=1,2} \eta_a(L^2s, x) H_a(s, \frac{x}{L}) \right] \right\} \end{aligned}$$

A questo punto si procede parallelamente a quanto fatto per il modello ad una componente: si approssima tutto all'ordine $(\frac{1}{L^2})$ e si fanno delle opportune sostituzioni analoghe alle (6.11) e (6.15). Il risultato è:

$$\begin{aligned} \frac{dP_{L;\tau}^H}{dP_L}(\tau) = & \exp L \left\{ \langle \vec{\pi}_\tau, \vec{H}_\tau \rangle - \langle \vec{\pi}_0, \vec{H}_0 \rangle + \right. \\ & - \int_0^\tau ds \langle \vec{\pi}_s, \partial_s \vec{H}_s \rangle - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \sum_{a=1,2} [\partial_u^2 (\rho_a(s, u) b(\hat{\rho}(s, u))) H_a(s, u) + \\ & \left. + \rho_a(s, u) b(\hat{\rho}(s, u)) (\partial_u H_a)^2(s, u) \right] \} \end{aligned}$$

Dunque il funzionale di grandi deviazioni sarà, a meno di una parte statica dipendente solo da $\vec{\pi}_0$:

$$I_0(\vec{\pi}(\cdot)) = \sup_{H \in C^{1,2} \times C^{1,2}} J_H(\vec{\pi}(\cdot)) \quad (6.62)$$

avendo indicato:

$$J_H(\vec{\pi}(\cdot)) = l_H(\vec{\pi}(\cdot)) - \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \sum_{a=1,2} \rho_a(s, u) b(\hat{\rho}(s, u)) (\partial_u H_a)^2(s, u)$$

$$\begin{aligned} l_H(\vec{\pi}(\cdot)) &= \langle \vec{\pi}_\tau, \vec{H}_\tau \rangle - \langle \vec{\pi}_0, \vec{H}_0 \rangle - \int_0^\tau ds \langle \vec{\pi}_s, \partial_s \vec{H}_s \rangle + \\ &- \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \sum_{a=1,2} \partial_u^2 (\rho_a(s, u) b(\hat{\rho}(s, u))) H_a(s, u) \end{aligned}$$

allorché $\vec{\pi}(\cdot)$ è assolutamente continua rispetto la misura di Lebesgue con densità: $\pi_a(\tau, du) = \rho_a(\tau, u) du$. Infine dobbiamo esplicitare il funzionale $I_0(\vec{\pi}(\cdot))$ (a partire dalla sua forma variazionale). Con un ragionamento del tutto analogo a quello visto per il modello ad una componente si trova:

$$I(\vec{\pi}(\cdot)) = \frac{1}{2} \int_0^\tau ds \int_{-1}^1 du \sum_{a=1,2} \rho_a(s, u) b(\hat{\rho}(s, u)) (\partial_u H_a)^2(s, u) + \text{(parte statica)}$$

allorché $\vec{\pi}(\cdot)$ ha densità $\pi_a(\tau, du) = \rho_a(\tau, u) du$ e $\vec{\rho}(\cdot, \cdot)$ è soluzione dell'equazione idrodinamica con campo esterno \vec{H} .

6.6.3 Funzionale entropia

A questo punto si cerca il minimo del funzionale di grandi deviazioni nello spazio $\mathcal{G}_{\vec{\gamma}(\cdot)}$ delle traiettorie $\vec{\rho}(\cdot, \cdot)$ tali che: $\rho_a(-\infty, u) b(\hat{\rho}(-\infty, u)) = p_a(u)$, $\rho_a(0, u) = \gamma_a(u)$ e $\rho_a(\tau, \pm 1) b(\hat{\rho}(\tau, \pm 1)) = p_a^\pm$. Come per il modello ad una componente il risultato che si ottiene è che il punto di minimo $\vec{\rho}^*$ è la soluzione dell'equazione idrodinamica del modello aggiunto invertita nel tempo (cioè la generalizzazione della relazione di Onsager-Machlup già discussa nel modello con un'unica componente). Dunque il funzionale entropia, che coincide con il funzionale $I(\cdot)$ calcolato nel punto di minimo $\vec{\rho}^*$, vale (a meno di una costante):

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = I(\vec{\rho}^*) = \int_{-1}^1 du \left\{ \sum_{a=1,2} \int^{\gamma_a(u)} d\rho \log \rho + \right.$$

$$+ \left. \int^{\gamma_1(u)+\gamma_2(u)} d\rho \log b(\rho) - \sum_{a=1,2} \log p_a(u) \gamma_a(u) \right\} \quad (6.63)$$

Dim. L'equazione idrodinamica con campo esterno (6.57) si riduce all'equazione idrodinamica aggiunta invertita temporalmente:

$$\partial_\tau \rho_a(\tau, u) = -\frac{1}{2} \partial_u^2 \varphi_a(\vec{\rho}(\tau, u)) + \partial_u [\varphi_a(\vec{\rho}(\tau, u)) \partial_u \log p_a(u)] \quad (6.64)$$

prendendo il campo:

$$H_a^*(\tau, u) = \log \frac{\varphi_a(\vec{\rho}(\tau, u))}{p_a(u)} \quad (6.65)$$

Indichiamo con $\vec{\rho}^*(\tau, u)$ la soluzione dell'equazione idrodinamica con campo \vec{H}^* con condizioni al bordo: $\rho_a(-\infty, u) b(\hat{\rho}(-\infty, u)) = p_a(u)$, $\rho_a(0, u) = \gamma_a(u)$ e $\rho_a(\tau, \pm 1) b(\hat{\rho}(\tau, \pm 1)) = p_a^\pm$. Dobbiamo verificare che è il punto di minimo del funzionale di grandi deviazioni in $\mathcal{G}_{\vec{\gamma}(\cdot)}$. Partiamo dall'espressione esplicita del funzionale $I_0(\vec{\pi}(\cdot))$:

$$I_0(\vec{\rho}^*) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 ds \int_{-1}^1 du \sum_{a=1,2} \varphi_a(\vec{\rho}^*(s, u)) (\partial_u H_a^*)^2(s, u)$$

Sostituendo l'espressione di H_a^* , integrando due volte per parti ed utilizzando l'equazione idrodinamica (6.64), si arriva a:

$$I_0(\vec{\rho}^*) = \int_{-1}^1 du \left\{ \sum_{a=1,2} \int^{\rho_a(\tau, u)} d\rho \log \rho + \int^{\hat{\rho}(\tau, u)} d\rho \log b(\rho) - \sum_{a=1,2} \log p_a(u) \rho_a(\tau, u) \right\}_{-\infty}^0$$

che, a meno di una costante, coincide con l'espressione (6.63). Quindi per avere la tesi basta far vedere che la differenza $\Delta(\vec{\rho}) = I(\vec{\rho}) - I(\vec{\rho}^*)$ è definita positiva in $\mathcal{G}_{\vec{\gamma}(\cdot)}$ e ciò si fa in modo analogo a quanto visto per il modello ad una componente.

□

È interessante notare che allo stesso risultato si arriva studiando l'entropia relativa dello stato di profilo $\vec{\gamma}(\cdot)$ rispetto lo stato stazionario μ_L , e facendo il limite termodinamico $L \rightarrow \infty$:

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} H(\mu_{\vec{\gamma}(\cdot)} | \mu_L) \quad (6.66)$$

Dim. Ricordando che:

$$\mu_L[\eta] = \prod_{x=-L}^L \frac{p_1(\frac{x}{L})^{\eta_1(x)} p_2(\frac{x}{L})^{\eta_2(x)} (\eta_1(x) + \eta_2(x))!}{g(\eta_1(x) + \eta_2(x))! \eta_1(x)! \eta_2(x)!} \frac{1}{\mathcal{Z}(p_1(\frac{x}{L}) + p_2(\frac{x}{L}))}$$

$$\mu_{\vec{\gamma}(\cdot)}[\eta] = \prod_{x=-L}^L \frac{\varphi_1(\vec{\gamma}(\frac{x}{L}))^{\eta_1(x)} \varphi_2(\vec{\gamma}(\frac{x}{L}))^{\eta_2(x)} (\eta_1(x) + \eta_2(x))!}{g(\eta_1(x) + \eta_2(x))! \eta_1(x)! \eta_2(x)!} \frac{1}{\mathcal{Z}(\hat{\varphi}(\hat{\gamma}(\frac{x}{L})))}$$

si ottiene:

$$\frac{1}{L} H(\mu_{\vec{\gamma}(\cdot)} | \mu_L) = \frac{1}{L} \sum_{x=-L}^L \sum_{\eta} \mu_{\vec{\gamma}(\cdot)}[\eta] \times$$

$$\times \log \frac{\varphi_1(\vec{\gamma}(\frac{x}{L}))^{\eta_1(x)} \varphi_2(\vec{\gamma}(\frac{x}{L}))^{\eta_2(x)} \mathcal{Z}(p_1(\frac{x}{L}) + p_2(\frac{x}{L}))}{p_1(\frac{x}{L})^{\eta_1(x)} p_2(\frac{x}{L})^{\eta_2(x)} \mathcal{Z}(\hat{\varphi}(\hat{\gamma}(\frac{x}{L})))} \stackrel{L \rightarrow \infty}{\simeq}$$

$$\stackrel{L \rightarrow \infty}{\simeq} \int_{-1}^1 du \left\{ \gamma_1(u) \log \frac{\gamma_1(u) b(\hat{\gamma}(u))}{p_1(u)} + \gamma_2(u) \log \frac{\gamma_2(u) b(\hat{\gamma}(u))}{p_2(u)} - \frac{\mathcal{Z}(\hat{\varphi}(\hat{\gamma}(u)))}{\mathcal{Z}(\hat{p}(u))} \right\}$$

Si verifica abbastanza facilmente che questa espressione coincide con quella del funzionale entropia $S(\vec{\gamma}(\cdot))$ a meno di una costante.

□

6.6.4 Relazioni di simmetria di Onsager

Data l'espressione del funzionale entropia $S(\vec{\gamma}(\cdot))$ possiamo esplicitare la matrice dei coefficienti di trasporto $L(\vec{\rho})$. Il funzionale entropia si scrive come integrale spaziale di una funzione densità:

$$S(\vec{\gamma}(\cdot)) = \int_{-1}^1 du s(\vec{\gamma}(u), u)$$

avendo indicato:

$$s(\vec{\rho}, u) = \sum_{a=1,2} \int^{\rho_a} d\rho \log \rho + \int^{\rho_1 + \rho_2} d\rho \log b(\rho) - \sum_{a=1,2} \log p_a(u) \rho_a$$

Possiamo confrontare questo risultato con la funzione densità di entropia che si trova nel modello di equilibrio (cf. [14]); l'unica differenza è nell'ultimo termine in cui compare una dipendenza esplicita dalla posizione u . Tuttavia quest'ultimo termine è lineare nella densità $\vec{\rho}$, quindi non contribuisce nella definizione della matrice $R(\vec{\rho})$ data da:

$$[R^{-1}(\vec{\rho})]_{ab} = \frac{\partial^2}{\partial \rho_a \partial \rho_b} s(\vec{\rho}, u)$$

In conclusione sia la matrice di diffusine $D(\vec{\rho})$ sia la matrice $R(\vec{\rho})$ sono le stesse che si hanno all'equilibrio:

$$\begin{aligned} D(\vec{\rho})_{ab} &= b(\hat{\rho})\delta_{a,b} + b'(\hat{\rho})\rho_a \\ R^{-1}(\vec{\rho})_{ab} &= \frac{1}{\rho_a}\delta_{a,b} + \frac{b'(\hat{\rho})}{b(\hat{\rho})} \end{aligned}$$

Necessariamente quindi la matrice dei coefficienti di trasporto verifica le relazioni di simmetria:

$$L(\vec{\rho})_{ab} = \rho_a b(\hat{\rho})\delta_{a,b} = L(\vec{\rho})_{ba}$$

6.6.5 Osservazioni sulla scelta del funzionale entropia

Cerchiamo di capire qual è il significato fisico del funzionale entropia definito da (6.63) o, equivalentemente, da (6.66).

La prima considerazione è che tale funzionale non può descrivere l'entropia totale dell'*universo* (cioè del sistema più le sorgenti a contatto). Per capire ciò basta notare che il funzionale $S(\vec{\gamma}(\cdot))$ calcolato in situazione stazionaria è identicamente nullo e costante nel tempo:

$$H(\mu_L|\mu_L) = 0 \quad \Rightarrow \quad S(\vec{\gamma}_{staz}) = cost = 0$$

Di contro il secondo principio della termodinamica ci assicura che in uno stato stazionario di non-equilibrio l'entropia totale dell'universo \tilde{S}_{tot} deve aumentare nel tempo. Ovvero ci deve essere una produzione di entropia strettamente positiva:

$$\sigma_{staz} = \left. \frac{d\tilde{S}_{tot}}{dt} \right|_{staz} > 0$$

Fatta questa osservazione è interessante chiedersi che relazione c'è tra il funzionale di grandi deviazioni $S(\vec{\gamma})$ definito da (6.66) e l'entropia totale dell'universo \tilde{S}_{tot} . Nel prossimo capitolo troveremo, con considerazioni fisiche, un modo ragionevole per definire l'entropia dell'universo:

$$\tilde{S}_{tot}(\vec{\gamma}) = H(\mu_{\vec{\gamma}}|\mu^{eq}) + \Delta\lambda\mu[J(L+1, L; [0, T]) - J(-L-1, -L; [0, T])] \quad (6.67)$$

μ^{eq} indica lo stato di equilibrio con potenziale chimico $\lambda_0 = \frac{1}{2}(\lambda_+ + \lambda_-)$; abbiamo inoltre definito $\Delta\lambda = (\lambda_+ - \lambda_-)$ e $J(x, y; [0, T])$ rappresenta il numero di particelle che nell'intervallo $[0, T]$ passano da x in y meno il numero

di particelle che passano da y in x . In questa espressione (6.67) per l'entropia \tilde{S}_{tot} risulta separato un contributo di equilibrio

$$H(\mu_{\vec{\gamma}}|\mu^{eq})$$

che risulta costante in situazione stazionaria, ed un contributo di non-equilibrio

$$\Delta\lambda\mu[J(L+1, L; [0, T]) - J(-L-1, -L; [0, T])]$$

che aumenta in media anche in situazione stazionaria e descrive la produzione di entropia legata al flusso continuo di particelle dalla riserva con potenziale chimico maggiore alla riserva con potenziale chimico minore.

Per quanto detto, il funzionale $S(\vec{\gamma}(\cdot))$ che descrive le fluttuazioni dall'equilibrio è differente dal funzionale $\tilde{S}_{tot}(\vec{\gamma}(\cdot))$ che definisce l'entropia totale. È dunque legittimo chiedersi quale dei due deve essere utilizzato per calcolare la matrice dei coefficienti di trasporto con cui verificare le relazioni di Onsager. Notiamo che nei sistemi di equilibrio tale ambiguità non esiste poiché $H(\mu|\mu^{eq})$ definisce sia l'entropia totale $\tilde{S}_{tot}(\vec{\gamma})$ sia il funzionale di grandi deviazioni $S(\vec{\gamma})$.

Per sistemi fuori dall'equilibrio la scelta che sembra più ragionevole è quella di prendere il funzionale di grandi deviazioni $S(\vec{\gamma})$ per calcolare la matrice dei coefficienti di trasporto di Onsager L_{ab} .

Infatti le relazioni di Onsager sono strettamente legate alle fluttuazioni dalla situazione di equilibrio (o stazionaria, per sistemi fuori dall'equilibrio). Definiscono cioè una simmetria nel modo in cui il sistema, a partire da una fluttuazione, si porta verso lo stato stazionario.

Inoltre, come visto in Introduzione, il punto di partenza di tutta la trattazione di Onsager è assumere la funzione entropia come una funzione convessa nei parametri di stato con un punto di massimo nello stato di equilibrio:

$$S \simeq -\frac{1}{2} \sum_{i,j} s_{ij} \alpha_i \alpha_j$$

A) Nella situazione di non-equilibrio l'entropia "fisica" \tilde{S}_{tot} perde questa caratteristica e nello stato stazionario non ha un massimo nè ha un valore costante.

B) Di contro il funzionale $S(\vec{\gamma}(\cdot))$ che descrive le fluttuazioni dallo stato stazionario è convessa ed ha un massimo esattamente nello stato stazionario. Per avere una verifica esplicita basta partire dall'espressione della densità di

entropia:

$$s(\vec{\rho}(u)) = \sum_{a=1,2} \int^{\rho_a(u)} d\rho \log \rho + \int^{\rho_1(u)+\rho_2(u)} d\rho \log b(\rho) - \sum_{a=1,2} \log p_a(u) \rho_a(u)$$

Il punto di massimo si ha imponendo:

$$\frac{\partial}{\partial \rho_a(u)} s(\vec{\rho}(u)) = 0$$

da cui si ottiene:

$$\rho_a(u) b(\hat{\rho}(u)) = p_a(u) \quad \Leftrightarrow \quad \varphi_a(\vec{\rho}(u)) = p_a(u)$$

e questa è proprio la condizione di stazionarietà. La convessità si ha studiando il segno delle derivate seconde.

Tutte queste considerazioni danno una giustificazione della scelta di partire dal funzionale di grandi deviazioni per verificare le relazioni di Onsager.

Capitolo 7

Produzione di entropia

In uno scritto del 1989 (cf. [19]) Eynk, Lebowitz e Sphon hanno studiato un modello di particelle interagenti di tipo esclusione generalizzata, tenuto fuori dall'equilibrio dal contatto con delle riserve di particelle. Un risultato interessante che hanno ottenuto è la validità del *principio di minima produzione di entropia*. Tale principio può essere considerato come l'analogo, in meccanica statistica fuori dell'equilibrio, dei principi variazionali associati all'energia libera nei sistemi all'equilibrio.

Dalla termodinamica sappiamo che l'entropia di un sistema isolato cresce nel tempo e resta costante solo in situazione di equilibrio. Tuttavia il sistema presentato nel cap.5 ed il sistema descritto da Eynk, Lebowitz e Spohn non sono isolati a causa dei contatti con le riserve di particelle ed i bagni termici, quindi l'entropia del sistema non è vincolata a crescere. Possiamo però dire che l'entropia totale dell'universo, data dall'entropia del sistema più l'entropia del bagno termico e di eventuali riserve di particelle a contatto, è vincolata a crescere nel tempo. Per produzione di entropia si intende la variazione temporale dell'entropia dell'universo. In [19] si fa vedere che, come ci si aspetta, la produzione di entropia è definita positiva ed è nulla solo in situazione di equilibrio (cioè se non c'è gradiente di potenziale chimico tra le riserve di particelle a contatto); inoltre è verificato che esiste ed è unico lo stato di minima produzione di entropia. Una domanda che nasce spontanea è se esiste una relazione tra lo stato stazionario del sistema e lo stato di minima produzione di entropia. Il principio di minima produzione di entropia stabilisce che questi due stati, pur non coincidendo, sono uguali nello sviluppo al primo ordine per piccoli gradienti di potenziale chimico tra le riserve di particelle a contatto.

Nel corso di questo capitolo dimostreremo che il principio di minima produzione di entropia è verificato anche nel modello zero range fuori dall'equilibrio presentato nel cap.5. Il che fa pensare che tale principio sia di validità

generale e non sia legato al tipo di interazione che definisce la dinamica del sistema.

7.1 Considerazioni sulla definizione di entropia totale per un sistema di particelle interagenti

Il primo passo da fare per lo studio della produzione di entropia consiste nella definizione di entropia totale (di sistema più ambiente esterno). Per un modello di equilibrio tale definizione è quasi immediata e risulta coincidente con l'entropia relativa rispetto allo stato di equilibrio. Nel caso di non-equilibrio la situazione è più complicata.

situazione di equilibrio

Consideriamo un modello di equilibrio la cui dinamica è caratterizzata da una funzione hamiltoniana $H(\eta)$, $\eta \in \mathcal{A}$, a contatto con l'ambiente esterno di temperatura $T = \frac{1}{\beta}$ (che possiamo prendere pari ad 1) e di potenziale chimico λ . In tale situazione la meccanica statistica di equilibrio ci assicura che lo stato di equilibrio è la distribuzione dell'ensemble di Gibbs:

$$\mu_G[\eta] = \frac{1}{\mathcal{Z}_G(\beta, \lambda)} e^{-\beta H(\eta) + \beta \lambda \sum_x \eta(x)} \quad (7.1)$$

Inoltre l'entropia totale dell'universo è del tipo:

$$S_{tot}(\mu) = S_{sist}(\mu) + S_{bt}(\mu) + S_{rp}(\mu)$$

se il sistema si trova nello stato μ . In questo modo abbiamo separato i vari contributi che analizziamo separatamente.

- Il primo termine è l'entropia del sistema. La forma classica di entropia di un sistema con dinamica stocastica è:

$$S_{sist}(\mu) = - \sum_{\eta \in \mathcal{A}} \mu[\eta] \log \mu[\eta]$$

- C'è poi un termine di entropia del bagno termico. La variazione di entropia è data dall'integrale di Clausius:

$$\Delta S_{bt}(\mu_{(\cdot)}) = \int \frac{dQ_{bt}}{T} = \beta \Delta Q_{bt}$$

Il bagno termico scambia solo calore con il sistema; per il primo principio della termodinamica risulta quindi:

$$\Delta S_{bt}(\mu_{(\cdot)}) = \beta \Delta U_{bt} = -\beta \Delta U_{sist} = -\beta(\mu_{fin}[H] - \mu_{in}[H])$$

Dunque, poiché l'entropia è definita a meno di una costante, possiamo prendere:

$$S_{bt}(\mu) = -\beta \mu[H] = -\sum_{\eta \in \mathcal{A}} \mu[\eta] H(\eta)$$

- Infine c'è un termine di entropia della riserva di particelle di potenziale chimico λ ; la sua variazione è:

$$\Delta S_{rp}(\mu_{(\cdot)}) = -\beta \lambda \Delta N_{rp} = \beta \lambda \left(\mu_{fin} \left[\sum_x \eta(x) \right] - \mu_{in} \left[\sum_x \eta(x) \right] \right)$$

Dunque possiamo prendere, a meno di una costante:

$$S_{rp}(\mu) = \beta \lambda \mu \left[\sum_x \eta(x) \right] = \beta \lambda \sum_{\eta \in \mathcal{A}} \mu[\eta] \left(\sum_x \eta(x) \right)$$

Unendo tutti questi risultati abbiamo l'espressione dell'entropia totale:

$$S_{tot}(\mu) = -\sum_{\eta \in \mathcal{A}} \mu[\eta] \left\{ \log \mu[\eta] + \beta H(\eta) - \beta \lambda \sum_x \eta(x) \right\} \quad (7.2)$$

Confrontiamo questa espressione con quella dell'entropia relativa dello stato μ rispetto allo stato di equilibrio di Gibbs:

$$\begin{aligned} H(\mu|\mu_G) &= -\sum_{\eta} \mu[\eta] \log \frac{\mu[\eta]}{\mu_G[\eta]} = \\ &= -\sum_{\eta \in \mathcal{A}} \mu[\eta] \left\{ \log \mu[\eta] + \beta H(\eta) - \beta \lambda \sum_x \eta(x) \right\} + \log \mathcal{Z}_G(\beta, \lambda) \end{aligned}$$

Possiamo cioè concludere che, all'equilibrio, l'entropia totale coincide con l'entropia relativa rispetto lo stato di equilibrio (a meno di una costante):

$$S_{tot}(\mu) \equiv H(\mu|\mu_G)$$

situazione di non-equilibrio

Ripetiamo il ragionamento in situazione di non-equilibrio, cioè per un sistema a contatto con due riserve di particelle (in $+L$ e $-L$) con potenziali chimici differenti: $\lambda_+ = \log p_+$ e $\lambda_- = \log p_-$. Chiamiamo $\lambda_0 = \frac{\lambda_+ + \lambda_-}{2}$ e $\Delta\lambda = \frac{\lambda_+ - \lambda_-}{2}$. L'entropia totale dell'universo è ancora del tipo:

$$S_{tot}(\mu) = S_{sist}(\mu) + S_{bt}(\mu) + S_{rp+}(\mu) + S_{rp-}(\mu)$$

- con un termine di entropia del sistema:

$$S_{sist}(\mu) = - \sum_{\eta \in \mathcal{A}} \mu[\eta] \log \mu[\eta]$$

- un termine di entropia di bagno termico:

$$S_{bt}(\mu) = -\beta\mu[H] = - \sum_{\eta \in \mathcal{A}} \mu[\eta] H(\eta)$$

- la novità è che ora ci sono due riserve di particelle; complessivamente la loro entropia è (a meno di una costante additiva):

$$S_{rp}(\mu) = \beta\lambda_+\mu[J(L+1, L; [0, T])] + \beta\lambda_-\mu[J(-L-1, -L; [0, T])]$$

dove $J(x, y; [0, T])$ è il numero di particelle che passano da x a y meno il numero di particelle che passano da y a x nell'intervallo $[0, T]$.

Inoltre fuori dall'equilibrio dobbiamo distinguere gli stati di equilibrio (di Gibbs) associati al potenziale chimico λ

$$\mu_G^\lambda[\eta] = \frac{1}{\mathcal{Z}_G(\lambda)} e^{-\beta H(\eta) + \beta\lambda \sum_x \eta(x)}$$

dallo stato stazionario (unico), tale che

$$\frac{d}{dt} \mu_{staz}[\eta] = 0 \Leftrightarrow (\mu_{staz} \Omega)(\eta) = 0$$

(Ω è il generatore della dinamica). Tale stato stazionario perde l'invarianza per traslazioni e lo possiamo immaginare con un profilo di fugacità lineare: $p(x) = \alpha x + \beta$ (È quanto abbiamo visto per il modello zero range).

La differenza sostanziale con la situazione di equilibrio è che ora l'entropia totale dell'universo non può essere identificata con l'entropia relativa rispetto lo stato di equilibrio perché $\lambda_+ \neq \lambda_-$. E d'altro canto non può essere identificata neppure con l'entropia relativa rispetto lo stato stazionario $H(\mu|\mu_{staz})$. Infatti sappiamo che l'entropia totale deve crescere nel tempo anche nello stato stazionario poiché il sistema è fuori dall'equilibrio: $\frac{d}{dt} S_{tot}(\mu_{staz}) \neq 0$; mentre risulta banalmente: $\frac{d}{dt} H(\mu_{staz}|\mu_{staz}) = 0$.

7.2 Entropia totale per il modello zero range fuori dall'equilibrio

Cerchiamo un'espressione dell'entropia totale dell'universo $S_{tot}(\mu)$ per il modello zero range unidimensionale fuori dall'equilibrio presentato in cap.5 (in modo poi da poter calcolare la produzione di entropia $\sigma = \frac{d}{dt}S_{tot}(\mu_t)$). Per definizione risulta:

$$S_{tot}(\mu) = - \sum_{\eta} \mu[\eta] \log \mu[\eta] - \sum_{\eta} H(\eta) + \\ + \lambda_+ \mu[J(L+1, L; [0, T])] + \lambda_- \mu[J(-L-1, -L; [0, T])]$$

dove λ_+ e λ_- sono i potenziali chimici delle due riserve di particelle dati da $\lambda_{\pm} = \log p_{\pm}$ e $H(\eta)$ è l'hamiltoniano che descrive le interazioni del sistema (la cui espressione esplicita si può ricavare dalle interazioni zero range). Un modo alternativo per trovare l'entropia totale si ha aggiungendo e sottraendo $\lambda_0 \mu[N_{tot}]$ al secondo membro:

$$S_{tot}(\mu) = - \sum_{\eta} \mu[\eta] \left\{ \log \mu[\eta] + H(\eta) - \lambda_0 \sum_x \eta(x) \right\} + \\ + \Delta \lambda \mu[J(L+1, L; [0, T])] - \Delta \lambda \mu[J(-L-1, -L; [0, T])]$$

abbiamo sfruttato il fatto che $\sum_x \eta(x) = J(L+1, L; [0, T]) + J(-L-1, -L; [0, T])$ a meno di una costante additiva; inoltre $\lambda_+ - \lambda_0 = \lambda_0 - \lambda_- = \Delta \lambda$. A questo punto ci accorgiamo che il primo termine $-\sum_{\eta} \mu[\eta] \{ \log \mu[\eta] + H(\eta) - \lambda_0 \sum_x \eta(x) \}$ coincide con l'entropia totale di un modello zero range a contatto con un'unica riserva di particelle di potenziale chimico λ_0 ; dunque per quanto visto nel paragrafo precedente coincide con $H(\mu|\mu_G^{\lambda_0})$. Possiamo quindi concludere che:

$$S_{tot}(\mu) = H(\mu|\mu_G^{\lambda_0}) + \Delta \lambda \mu[J(L+1, L; [0, T])] - \Delta \lambda \mu[J(-L-1, -L; [0, T])]$$

e la produzione di entropia è:

$$\sigma(\mu) = \frac{d}{dt} S_{tot}(\mu_t) = \frac{d}{dt} H(\mu_t|\mu_G^{\lambda_0}) + \tag{7.3}$$

$$+ \Delta \lambda \frac{d}{dt} \{ \mu_t[J(L+1, L; [0, T])] - \mu_t[J(-L-1, -L; [0, T])] \}$$

Il primo pezzo è la parte di entropia legata alla dinamica interna di equilibrio (senza considerare le costrizioni al bordo). Dunque nello stato stazionario dà contributo nullo: $\frac{d}{dt} H(\mu_{staz}|\mu_G^{\lambda_0}) = 0$. Il secondo pezzo invece tiene conto dei vincoli al bordo e dà un contributo positivo alla produzione di entropia anche nello stato stazionario: $\Delta \lambda \frac{d}{dt} \{ \mu_{staz}[J_t(L+1, L)] - \mu_{staz}[J_t(-L-1, -L)] \} > 0$.

7.3 Calcolo della produzione di entropia

Calcoliamo separatamente i due contributi di produzione di entropia nella relazione (7.3).

A) *Parte di equilibrio*

Per definizione di entropia relativa:

$$\frac{d}{dt}H(\mu_t|\mu_G^{\lambda_0}) = - \sum_{\eta} \left(1 + \log \frac{\mu_t[\eta]}{\mu_G^{\lambda_0}[\eta]} \right) \frac{d}{dt}\mu_t[\eta]$$

Dalle equazioni di Kolmogorov abbiamo $\frac{d}{dt}\mu_t[\eta] = (\mu_t\Omega_L)[\eta]$. Se indichiamo con $k(\eta, \zeta)$ il tasso di transizione dalla configurazione η alla configurazione ζ risulta:

$$\frac{d}{dt}H(\mu_t|\mu_G^{\lambda_0}) = - \sum_{\eta, \zeta} \left(1 + \log \frac{\mu_t[\eta]}{\mu_G^{\lambda_0}[\eta]} \right) \{ \mu_t[\zeta]k(\zeta, \eta) - \mu_t[\eta]k(\eta, \zeta) \} \quad (7.4)$$

il fattore $\left(1 + \log \frac{\mu_t[\eta]}{\mu_G^{\lambda_0}[\eta]} \right)$ viene moltiplicato per un termine completamente antisimmetrico rispetto lo scambio $\eta \leftrightarrow \zeta$, quindi può essere sostituito con $\frac{1}{2} \left[\left(1 + \log \frac{\mu_t[\eta]}{\mu_G^{\lambda_0}[\eta]} \right) - \left(1 + \log \frac{\mu_t[\zeta]}{\mu_G^{\lambda_0}[\zeta]} \right) \right] = \frac{1}{2} \log \frac{\mu_t[\eta]}{\mu_t[\zeta]} \frac{\mu_G^{\lambda_0}[\zeta]}{\mu_G^{\lambda_0}[\eta]}$. Con tali considerazioni la relazione (7.4) diventa:

$$\frac{d}{dt}H(\mu_t|\mu_G^{\lambda_0}) = \frac{1}{2} \sum_{\eta, \zeta} \log \frac{\mu_t[\zeta]}{\mu_t[\eta]} \frac{\mu_G^{\lambda_0}[\eta]}{\mu_G^{\lambda_0}[\zeta]} \{ \mu_t[\zeta]k(\zeta, \eta) - \mu_t[\eta]k(\eta, \zeta) \}$$

nel modello zero range conosciamo la forma esplicita dei tassi di transizione:

$$k(\eta, \zeta) = \begin{cases} \frac{1}{2}g(\eta(x)) & \text{se } \zeta = \eta^{x, x\pm 1} \\ \frac{1}{2}p_{\pm} & \text{se } \zeta = \eta^{\pm L} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

sfruttiamo inoltre la forma esplicita della misura di equilibrio:

$$\mu_G^{\lambda_0}[\eta] = \prod_{x=-L}^L \frac{p_0^{\eta(x)}}{g(\eta(x))!} \frac{1}{\mathcal{Z}(p_0)} ; p_0 = e^{\lambda_0}$$

Utilizzando tali relazioni si arriva al seguente risultato:

$$\frac{d}{dt}H(\mu_t|\mu_G^{\lambda_0}) = \frac{1}{4} \sum_{\eta} \left\{ \sum_{x=-L}^{L-1} [g(\eta(x))\mu_t[\eta] + \right.$$

$$\begin{aligned}
& -g(\eta(x+1)+1)\mu_t[\eta^{x,x+1}] \log \frac{g(\eta(x))\mu_t[\eta]}{g(\eta(x+1)+1)\mu_t[\eta^{x,x+1}]} + \\
& + \sum_{x=-L+1}^L [g(\eta(x))\mu_t[\eta] - g(\eta(x-1)+1)\mu_t[\eta^{x,x-1}]] \log \frac{g(\eta(x))\mu_t[\eta]}{g(\eta(x-1)+1)\mu_t[\eta^{x,x-1}]} + \\
& \quad + [g(\eta(L))\mu_t[\eta] - p_+\mu_t[\eta^{L,L+1}]] \log \frac{g(\eta(L))\mu_t[\eta]}{p_+\mu_t[\eta^{L,L+1}]} + \\
& \quad + [g(\eta(-L))\mu_t[\eta] - p_-\mu_t[\eta^{-L,-L-1}]] \log \frac{g(\eta(-L))\mu_t[\eta]}{p_-\mu_t[\eta^{-L,-L-1}]} + \\
& \quad + [p_+\mu_t[\eta] - g(\eta(L)+1)\mu_t[\eta^L]] \log \frac{p_+\mu_t[\eta]}{g(\eta(L)+1)\mu_t[\eta^L]} + \\
& \quad + [p_-\mu_t[\eta] - g(\eta(-L)+1)\mu_t[\eta^{-L}]] \log \frac{p_-\mu_t[\eta]}{g(\eta(-L)+1)\mu_t[\eta^{-L}]} \Big\} \quad (7.5)
\end{aligned}$$

Abbiamo sfruttato il fatto che tra p_{\pm} e p_0 vale la relazione: $\frac{p_{\pm}}{p_0} = \frac{p_0}{p_{\mp}}$.

B) *Parte di non-equilibrio*

Consideriamo il secondo termine in (7.3) che descrive la produzione di entropia legata al contatto con le riserve di particelle. Per come sono definiti i tassi di transizione tra $\pm L$ e $\pm(L+1)$ risulta:

$$\begin{aligned}
& \Delta\lambda \frac{d}{dt} \mu_t [J_t(L+1, L) - J_t(-L-1, -L)] = \\
& = \frac{1}{2} \Delta\lambda \sum_{\eta} \mu_t[\eta] (p_+ - g(\eta(L))) - \frac{1}{2} \Delta\lambda \sum_{\eta} \mu_t[\eta] (p_- - g(\eta(-L))) =
\end{aligned}$$

facendo dei cambi di variabile ad hoc su η e sfruttando il fatto che $\Delta\lambda = \log \frac{p_+}{p_0} = \log \frac{p_0}{p_-}$

$$\begin{aligned}
& = \frac{1}{4} \sum_{\eta} \left\{ -\log \frac{p_+}{p_0} (-p_+\mu_t[\eta^{L,L+1}] + g(\eta(L))\mu_t[\eta]) + \right. \\
& \quad - \log \frac{p_-}{p_0} (g(\eta(-L))\mu_t[\eta] - p_-\mu_t[\eta^{-L,-L-1}]) + \\
& \quad + \log \frac{p_+}{p_0} (p_+\mu_t[\eta] - g(\eta(L)+1)\mu_t[\eta^L]) + \\
& \quad \left. + \log \frac{p_-}{p_0} (p_-\mu_t[\eta] - g(\eta(-L)+1)\mu_t[\eta^{-L}]) \right\} \quad (7.6)
\end{aligned}$$

Unendo le relazioni (7.5) e (7.6) otteniamo l'espressione finale della produzione di entropia:

$$\begin{aligned}
\sigma(\mu) = & \frac{1}{4} \sum_{\eta} \left\{ \sum_{x=-L}^{L-1} F(g(\eta(x))\mu_t[\eta], g(\eta(x+1)+1)\mu_t[\eta^{x,x+1}]) + \right. \\
& + \sum_{x=-L+1}^L F(g(\eta(x))\mu_t[\eta], g(\eta(x-1)+1)\mu_t[\eta^{x,x-1}]) + \\
& + F(g(\eta(L))\mu_t[\eta], p_+\mu_t[\eta^{L,L+1}]) + F(g(\eta(-L))\mu_t[\eta], p_-\mu_t[\eta^{-L,-L-1}]) + \\
& \left. + F(p_+\mu_t[\eta], g(\eta(L)+1)\mu_t[\eta^L]) + F(p_-\mu_t[\eta], g(\eta(-L)+1)\mu_t[\eta^{-L}]) \right\} \quad (7.7)
\end{aligned}$$

avendo indicato con $F(\cdot, \cdot) : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ la funzione:

$$F(x, y) = (x - y) \log \frac{x}{y}$$

Questa espressione della produzione di entropia è del tutto analoga a quella trovata da Eynk, Lebowitz e Spohn in [19] nel caso di interazione tra sfere dure.

Fisicamente ci aspettiamo che anche nello stato stazionario ci sia produzione di entropia positiva poiché siamo fuori dall'equilibrio (ed in media c'è un flusso continuo di particelle dalla riserva con potenziale chimico maggiore a quella con potenziale chimico minore). Verifichiamo ciò calcolando esplicitamente la produzione di entropia dello stato stazionario

$$\sigma(\mu_{staz}) = \frac{d}{dt} H(\mu_{staz} | \mu_G^{\lambda_0}) + \log \frac{p_+}{p_0} \frac{d}{dt} \mu_{staz} [J_t(L+1, L) - J_t(-L-1, -L)]$$

La parte di equilibrio dà chiaramente contributo nullo; esplicitando la parte di non-equilibrio tramite la forma esplicita dello stato stazionario (5.2) risulta:

$$\sigma(\mu_{staz}) = \frac{1}{2} \log \frac{p_+}{p_0} [p_+ - p_L(L) - p_- + p_L(-L)]$$

Ricordando che il profilo stazionario $p_L(x)$ è lineare, risulta:

$$\sigma(\mu_{staz}) = \frac{p_+ - p_-}{4(L+1)} \log \frac{p_+}{p_-} \quad (7.8)$$

cioè, come ci aspettavamo, la produzione di entropia è strettamente positiva anche nello stato stazionario purché $p_+ \neq p_-$.

7.4 Proprietà della produzione di entropia. Stato di minima produzione di entropia

Verifichiamo ora alcune proprietà della produzione di entropia espressa dalla relazione (7.7). In particolare cercheremo di dimostrare che esiste ed è unico lo stato di minima produzione di entropia.

1. Si vede facilmente che la produzione di entropia $\sigma(\mu)$, definita nello spazio $\mathcal{M}_+(\mathcal{A})$ delle misure positive sullo spazio delle configurazioni \mathcal{A} , soddisfa le seguenti proprietà:

è definita positiva

$$\sigma(\mu) \geq 0 \quad \forall \mu \in \mathcal{M}_+$$

è omogenea

$$\sigma(\alpha\mu) = \alpha\sigma(\mu) \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}^+, \forall \mu \in \mathcal{M}_+$$

è convessa

$$\sigma(\alpha\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2) \leq \alpha\sigma(\mu_1) + (1-\alpha)\sigma(\mu_2) \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}^+, \forall \mu_1, \mu_2 \in \mathcal{M}_+$$

Dim. Queste proprietà sono diretta conseguenza del fatto che la funzione $F(\cdot, \cdot)$ è positiva, omogenea e convessa.

□

2. Abbiamo definito $\sigma(\mu)$ sullo spazio \mathcal{M}_+ delle misure positive in \mathcal{A} . Sappiamo però che gli stati fisici del sistema sono descritti dalle misure di probabilità su \mathcal{A} ; ci interessa quindi la restrizione $\sigma(\mu)$ allo spazio \mathcal{P} delle misure di probabilità. Vogliamo verificare che la restrizione $\sigma(\cdot)|_{\mathcal{P}}$ è essa stessa convessa.

Dim. Per verificare ciò basta notare che \mathcal{P} è un sottospazio chiuso e convesso di \mathcal{M}_+ . La convessità di \mathcal{P} segue dalla definizione. Il fatto che \mathcal{P} è un sottospazio chiuso si ottiene trovando esplicitamente la sua frontiera:

$$\partial\mathcal{P} = \{\mu \in \mathcal{P} : \exists \eta \text{ t.c. } \mu(\eta) = 0\}$$

Quindi $\partial\mathcal{P} \subset \mathcal{P}$, il che vuol dire che \mathcal{P} è chiuso.

□

3. La produzione di entropia è divergente sui punti di frontiera dello spazio degli stati:

$$\sigma(\mu) = \infty, \quad \forall \mu \in \partial \mathcal{P}$$

Dim. Sia μ un generico elemento della frontiera $\partial \mathcal{P}$ il che vuol dire che esiste un η_0 tale che $\mu[\eta_0] = 0$. Inoltre, poiché μ è correttamente normalizzato, deve esistere almeno una configurazione η_+ tale che $\mu[\eta_+] > 0$. Sfruttiamo ora la non degenerazione della dinamica che assicura che esiste un cammino di salti permessi (cioè di tipo $\eta \rightarrow \eta^{x,x\pm 1}$ o $\eta \rightarrow \eta^{\pm L}$) che collega η_0 ad η_+ ; sia $\eta_0 \rightarrow \eta_1 \rightarrow \dots \rightarrow \eta_N \equiv \eta_+$ un cammino di questo tipo. In particolare deve esistere un passo $\eta_k \rightarrow \eta_{k+1}$ tale che:

$$\mu[\eta_k] = 0; \quad \mu[\eta_{k+1}] > 0$$

L'espressione (7.7) della produzione di entropia può essere schematizzata così:

$$\sigma(\mu) = \frac{1}{4} \sum_{\text{passi permessi } \eta \rightarrow \zeta} F(g_\eta \mu[\eta], g_\zeta \mu[\zeta]) \geq$$

prendendo solo il salto $\eta_k \rightarrow \eta_{k+1}$ si ha una maggiorazione

$$\geq \frac{1}{4} F(g_{\eta_k} \mu[\eta_k], g_{\eta_{k+1}} \mu[\eta_{k+1}]) = +\infty$$

Abbiamo così ottenuto la tesi. □

4. La restrizione di $\sigma(\cdot)$ all'interno di \mathcal{P} è strettamente convessa:

$$\sigma(\lambda \mu_1 + (1-\lambda) \mu_2) < \lambda \sigma(\mu_1) + (1-\lambda) \sigma(\mu_2) \quad \forall \mu_1, \mu_2 \in \text{Int} \mathcal{P}, \lambda \in (0, 1)$$

Dim. Come prima cosa cerchiamo in che situazione $F(\cdot, \cdot)$ non è strettamente convessa; cioè per quali $z_1 = (x_1, y_1), z_2 = (x_2, y_2) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$ risulta:

$$F(\lambda z_1 + (1-\lambda) z_2) = \lambda F(z_1) + (1-\lambda) F(z_2), \quad \forall \lambda \in (0, 1)$$

Ciò equivale a chiedere:

$$(z_1 - z_2)[H(F)](\lambda z_1 + (1-\lambda) z_2)(z_1 - z_2) = 0$$

essendo $[H(F)](z)$ l'hessiano di $F(\cdot)$ calcolato in $z \in \mathbb{R}^2$. Facendo un calcolo diretto si scopre che tale relazione è equivalente a dire che z_1 e z_2 sono linearmente dipendenti:

$$z_1 = \alpha z_2 \quad \text{per qualche } \alpha \in \mathbb{R}$$

Usiamo ora tale risultato per studiare la produzione di entropia. Cerchiamo in quale situazione non è strettamente convessa all'interno di \mathcal{P} . Fissiamo μ_1 e μ_2 all'interno di \mathcal{P} e vediamo in che condizione risulta

$$\sigma(\lambda\mu_1 + (1 - \lambda)\mu_2) = \lambda\sigma(\mu_1) + (1 - \lambda)\sigma(\mu_2) \quad \forall \lambda \in (0, 1)$$

usando l'espressione esplicita della produzione di entropia (7.7), ciò equivale a chiedere

$$\sum_{\text{salti permessi } \eta \rightarrow \zeta} \{F(\lambda g_\eta \mu_1[\eta] + (1 - \lambda)g_\eta \mu_2[\eta], \lambda g_\zeta \mu_1[\zeta] + (1 - \lambda)g_\zeta \mu_2[\zeta]) - \lambda F(g_\eta \mu_1[\eta], g_\zeta \mu_1[\zeta]) - (1 - \lambda)F(g_\eta \mu_2[\eta], g_\zeta \mu_2[\zeta])\} = 0$$

Per la convessità della funzione $F(\cdot, \cdot)$ tutti gli addendi della sommatoria sono positivi o nulli, quindi la somma è nulla se e solo se tutti gli addendi sono nulli. Sfruttando il risultato ottenuto prima per la funzione $F(\cdot, \cdot)$ ed il fatto che la dinamica è non degenera si arriva alla relazione:

$$\mu_1[\eta] = \alpha \mu_2[\eta], \quad \forall \eta$$

Poiché μ_1 e μ_2 sono per ipotesi entrambe normalizzate, allora ciò è possibile solo per $\mu_1 \equiv \mu_2$. A conferma del fatto che la produzione di entropia è strettamente convessa in $\text{Int}\mathcal{P}$.

□

conclusioni

Unendo i risultati ottenuti risulta che $\sigma(\cdot)$ è un funzionale strettamente convesso sullo spazio chiuso e convesso \mathcal{P} ; il che assicura che esiste ed è unico lo stato di minima produzione di entropia all'interno di \mathcal{P} .

Nel seguito cercheremo di scoprire che relazione esiste tra lo stato stazionario e lo stato di minima produzione di entropia. Ci aspettiamo già che all'equilibrio ($p_+ = p_-$) sono coincidenti. Fuori dall'equilibrio invece non possiamo dire a priori nulla. Dimostriamo che i loro sviluppi al primo ordine in $\Delta\lambda$ sono coincidenti; il che è noto come principio di minima produzione di entropia.

7.5 Equazione per lo stato di minima produzione di entropia

Per trovare lo stato di minima produzione di entropia dobbiamo risolvere il problema variazionale del funzionale

$$\begin{aligned} \sigma(\mu) = & \frac{1}{4} \sum_{\eta} \left\{ \sum_{x=-L}^{L-1} F(g(\eta(x))\mu_t[\eta], g(\eta(x+1)+1)\mu_t[\eta^{x,x+1}]) + \right. \\ & + \sum_{x=-L+1}^L F(g(\eta(x))\mu_t[\eta], g(\eta(x-1)+1)\mu_t[\eta^{x,x-1}]) + \\ & + F(g(\eta(L))\mu_t[\eta], p_+\mu_t[\eta^{L,L+1}]) + F(g(\eta(-L))\mu_t[\eta], p_-\mu_t[\eta^{-L,-L-1}]) + \\ & \left. + F(p_+\mu_t[\eta], g(\eta(L)+1)\mu_t[\eta^L]) + F(p_-\mu_t[\eta], g(\eta(-L)+1)\mu_t[\eta^{-L}]) \right\} \end{aligned}$$

con vincolo $\sum_{\eta} \mu[\eta] = 1$. Dunque dobbiamo risolvere il sistema di equazioni

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\mu[\eta]} \sigma(\mu_{Min}[\cdot]) &= \alpha \\ \sum_{\eta} \mu[\eta] &= 1 \end{aligned}$$

avendo indicato con α il moltiplicatore di Lagrange. Come prima cosa cerchiamo il significato di α . Poiché $\sigma(\mu)$ è omogenea, per il teorema di Eulero vale:

$$\sum_{\eta} \frac{d\sigma(\mu[\cdot])}{d\mu[\eta]} \mu[\eta] = \sigma(\mu[\cdot])$$

Scrivendo tale relazione in corrispondenza dello stato di minima produzione di entropia si ottiene:

$$\alpha = \sigma(\mu_{Min}[\cdot]) \quad (7.9)$$

Riscriviamo ora esplicitamente il problema variazionale

$$\frac{d}{d\mu[\eta]} \sigma(\mu[\cdot]) = \frac{d}{d\mu[\eta]} \frac{1}{4} \sum_{\eta' \rightarrow \eta''} F(g_{\eta'} \mu[\eta'], g_{\eta''} \mu[\eta''])$$

Nella somma sopravvivono solo i termini con $\eta' = \eta$ o $\eta'' = \eta$. Poiché inoltre $F(x, y) = F(y, x)$ i termini con $\eta' = \eta$ e $\eta'' = \eta$ danno lo stesso risultato; quindi prendiamo solo la parte con $\eta' = \eta$ e moltiplichiamo per due:

$$\frac{d}{d\mu[\eta]} \sigma(\mu[\cdot]) = \frac{1}{2} \sum_{\zeta} \partial_1 F(g_{\eta} \mu[\eta], g_{\zeta} \mu[\zeta]) g_{\eta}$$

dove la somma è estesa su tutte le configurazioni ζ che sono raggiungibili da η con un salto nella dinamica. Esplicitando questa relazione concludiamo che lo stato di minima produzione di entropia è la soluzione (unica) del sistema di equazioni:

$$\begin{aligned}
\sigma(\mu_{Min}) &= \frac{d}{d\mu[\eta]} \sigma(\mu_{Min}) = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{x=-L}^{L-1} g(\eta(x)) \Phi \left(1 - \frac{g(\eta(x+1)+1)\mu_{Min}[\eta^{x,x+1}]}{g(\eta(x))\mu_{Min}[\eta]} \right) + \right. \\
&\quad + \sum_{x=-L+1}^L g(\eta(x)) \Phi \left(1 - \frac{g(\eta(x-1)+1)\mu_{Min}[\eta^{x,x-1}]}{g(\eta(x))\mu_{Min}[\eta]} \right) + \\
&\quad + g(\eta(L)) \Phi \left(1 - \frac{p_+\mu_{Min}[\eta^{L,L+1}]}{g(\eta(L))\mu_{Min}[\eta]} \right) + g(\eta(-L)) \Phi \left(1 - \frac{p_-\mu_{Min}[\eta^{-L,-L-1}]}{g(\eta(-L))\mu_{Min}[\eta]} \right) + \\
&\quad \left. + p_+ \Phi \left(1 - \frac{g(\eta(L)+1)\mu_{Min}[\eta^L]}{p_+\mu_{Min}[\eta]} \right) + p_- \Phi \left(1 - \frac{g(\eta(-L)+1)\mu_{Min}[\eta^{-L}]}{p_-\mu_{Min}[\eta]} \right) \right\} \\
&\hspace{15em} (7.10)
\end{aligned}$$

avendo indicato con $\Phi(\cdot)$ la funzione reale di variabile reale:

$$\Phi(u) = u - \log(1 - u) \quad (7.11)$$

Da questa relazione per lo stato di minima produzione di entropia non si riesce a trovare un'espressione esplicita. Nel seguito ci muoveremo in due direzioni:

- cercheremo una maggiorazione per $\sigma(\mu_{Min})$ sfruttando le proprietà della funzione $\Phi(\cdot)$.
- svilupperemo la soluzione esatta μ_{Min} per piccoli valori del gradiente di potenziale chimico $\Delta\lambda$ al primo ordine perturbativo.

7.5.1 Maggiorazione di $\sigma(\mu_{Min})$: espressione esplicita in situazione di equilibrio.

La funzione $\Phi(\cdot)$ verifica la disuguaglianza

$$\Phi(u) = u - \log(1 - u) \leq 2u$$

Sfruttando questo fatto otteniamo per $\sigma(\mu_{Min})$ la seguente maggiorazione:

$$\sigma(\mu_{Min}) \leq \sum_{x=-L}^{L-1} g(\eta(x)) \left(1 - \frac{g(\eta(x+1)+1)\mu_{Min}[\eta^{x,x+1}]}{g(\eta(x))\mu_{Min}[\eta]} \right) +$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{x=-L+1}^L g(\eta(x)) \left(1 - \frac{g(\eta(x-1) + 1)\mu_{Min}[\eta^{x,x-1}]}{g(\eta(x))\mu_{Min}[\eta]} \right) + \\
& + g(\eta(L)) \left(1 - \frac{p_+\mu_{Min}[\eta^{L,L+1}]}{g(\eta(L))\mu_{Min}[\eta]} \right) + g(\eta(-L)) \left(1 - \frac{p_-\mu_{Min}[\eta^{-L,-L-1}]}{g(\eta(-L))\mu_{Min}[\eta]} \right) + \\
& + p_+ \left(1 - \frac{g(\eta(L) + 1)\mu_{Min}[\eta^L]}{p_+\mu_{Min}[\eta]} \right) + p_- \left(1 - \frac{g(\eta(-L) + 1)\mu_{Min}[\eta^{-L}]}{p_-\mu_{Min}[\eta]} \right)
\end{aligned}$$

con semplici passaggi algebrici e ricordando l'espressione del generatore Ω_L si arriva a:

$$\sigma(\mu_{Min}) \leq \frac{2}{\mu_{Min}[\eta]} (\mu_{Min}\Omega_L)(\eta) \quad (7.12)$$

Vediamo alcune conseguenze di tale risultato. Cerchiamo innanzitutto in quali situazioni vale $\sigma(\mu_{Min}) = 0$. Sfruttando la disuguaglianza (7.12) ciò è possibile solo se $(\mu_{Min}\Omega_L)(\eta) \geq 0$, $\forall \eta$. D'altro canto il generatore della dinamica è definito tale che $\sum_{\eta} (\mu\Omega_L)(\eta) = 0$. Quindi deve essere necessariamente $(\mu_{Min}\Omega_L)(\eta) = 0$, $\forall \eta$. Il che vuol dire che lo stato di minima produzione di entropia coincide con lo stato stazionario:

$$\mu_{Min} = \mu_{staz}$$

e quindi, per l'ipotesi iniziale, deve risultare:

$$\sigma(\mu_{staz}) = 0$$

Ma la produzione di entropia dello stato stazionario l'abbiamo calcolata esplicitamente (cf. par.3) e risulta nulla solo in situazione di equilibrio.

Possiamo quindi concludere che la produzione di entropia è nulla solo in situazione di equilibrio, cioè per $p_+ = p_-$; ed in tal caso lo stato di minima produzione di entropia coincide con lo stato stazionario.

Fuori dall'equilibrio, cioè per $p_+ \neq p_-$, possiamo dire solo che lo stato di minima produzione di entropia e lo stato stazionario sono distinti e vale la disuguaglianza stretta:

$$\sigma(\mu_{staz}) > \sigma(\mu_{Min}) > 0$$

7.5.2 Espansione in potenze di $\Delta\lambda$. Principio di minima produzione di entropia

Conviene considerare la produzione di entropia come funzionale, anziché degli stati $\mu[\cdot]$, delle derivate di Radom-Nikodim $f(\cdot)$ rispetto allo stato stazionario: $f(\eta) = \frac{\mu[\eta]}{\mu_{staz}[\eta]}$. Riscriviamo lo stato stazionario e lo stato di minima

produzione di entropia in termini delle derivate di Radom-Nikodim $f(\cdot)$. Lo stato stazionario è banalmente definito da:

$$f_{staz}(\eta) = 1, \quad \forall \eta$$

Il problema variazionale che definisce lo stato di minima produzione di entropia si riscrive così

$$\begin{aligned} \sigma[f_{Min}(\cdot)] &= \frac{1}{\mu_{staz}[\eta]} \frac{d}{df(\eta)} \sigma[f_{Min}(\cdot)] = & (7.13) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{x=-L}^{L-1} g(\eta(x)) \Phi \left(1 - \frac{p_L(x+1)}{p_L(x)} \frac{f_{Min}(\eta^{x,x+1})}{f_{Min}(\eta)} \right) + \right. \\ &\quad \sum_{x=-L+1}^L g(\eta(x)) \Phi \left(1 - \frac{p_L(x-1)}{p_L(x)} \frac{f_{Min}(\eta^{x,x-1})}{f_{Min}(\eta)} \right) + \\ &\quad + g(\eta(L)) \Phi \left(1 - \frac{p_+}{p_L(L)} \frac{f_{Min}(\eta^{L,L+1})}{f_{Min}(\eta)} \right) + \\ &\quad \left. + g(\eta(-L)) \Phi \left(1 - \frac{p_-}{p_L(-L)} \frac{f_{Min}(\eta^{-L,-L-1})}{f_{Min}(\eta)} \right) + \right. \\ &\quad \left. + p_+ \Phi \left(1 - \frac{p_L(L)}{p_+} \frac{f_{Min}(\eta^L)}{f_{Min}(\eta)} \right) + p_- \Phi \left(1 - \frac{p_L(-L)}{p_-} \frac{f_{Min}(\eta^{-L})}{f_{Min}(\eta)} \right) \right\} \end{aligned}$$

con vincolo:

$$\sum_{\eta} \mu_{staz}[\eta] f_{Min}(\eta) = 1$$

Vogliamo riscrivere queste relazioni sviluppando in serie di potenze di $\alpha = \frac{p_+ - p_-}{2}$ e trascurando tutti i termini di ordine superiore al primo.

A) All'ordine zero sappiamo tutto; lo stato di minima produzione di entropia coincide con lo stato stazionario: $f_{Min}^{(0)}(\eta) = 1$, e la produzione di entropia è nulla: $\sigma[f_{Min}^{(0)}(\cdot)] = 0$.

B) Sviluppamo dunque al primo ordine. Lo stato di minima produzione di entropia diventa $f_{Min}(\eta) = 1 + \alpha f_{Min}^{(1)}(\eta) + O(\alpha^2)$. Per quanto riguarda la produzione di entropia, per ovvie ragioni fisiche è facile capire che $\sigma[f_{Min}(\eta, \alpha)]$ deve essere simmetrica in α (la verifica esplicita è immediata). Quindi non può avere un termine di ordine uno diverso da zero: $\sigma[f_{Min}] = 0 + O(\alpha^2)$. Dunque l'equazione (7.13) sviluppata al primo ordine in α diventa:

$$\frac{1}{2} \left\{ \sum_{x=-L}^{L-1} g(\eta(x)) \Phi \left(1 - \frac{p_L(x+1)}{p_L(x)} \frac{f_{Min}(\eta^{x,x+1})}{f_{Min}(\eta)} \right) + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{x=-L+1}^L g(\eta(x)) \Phi \left(1 - \frac{p_L(x-1)}{p_L(x)} \frac{f_{Min}(\eta^{x,x-1})}{f_{Min}(\eta)} \right) + g(\eta(L)) \Phi \left(1 - \frac{p_+}{p_L(L)} \frac{f_{Min}(\eta^{L,L+1})}{f_{Min}(\eta)} \right) + \\
& + g(\eta(-L)) \Phi \left(1 - \frac{p_-}{p_L(-L)} \frac{f_{Min}(\eta^{-L,-L-1})}{f_{Min}(\eta)} \right) + p_+ \Phi \left(1 - \frac{p_L(L)}{p_+} \frac{f_{Min}(\eta^L)}{f_{Min}(\eta)} \right) + \\
& \quad + p_- \Phi \left(1 - \frac{p_L(-L)}{p_-} \frac{f_{Min}(\eta^{-L})}{f_{Min}(\eta)} \right) \Big\} = 0 + O(\alpha^2)
\end{aligned}$$

Sostituendo lo sviluppo $f_{Min}(\eta) = 1 + \alpha f_{Min}^{(1)}(\eta)$, ricordando che $p_L(x)$ è il profilo lineare $p_L(x) = \alpha \frac{x}{L+1} + \beta$ ed esplicitando la funzione $\Phi(u) = u - \log(1-u)$, si ottiene:

$$\begin{aligned}
& \sum_{x=-L}^{L-1} g(\eta(x)) \left[f_{Min}^{(1)}(\eta) - f_{Min}^{(1)}(\eta^{x,x+1}) - \frac{1}{p_L(x)(L+1)} \right] + \\
& + \sum_{x=-L+1}^L g(\eta(x)) \left[f_{Min}^{(1)}(\eta) - f_{Min}^{(1)}(\eta^{x,x-1}) + \frac{1}{p_L(x)(L+1)} \right] + \\
& \quad + g(\eta(L)) \left[f_{Min}^{(1)}(\eta) - f_{Min}^{(1)}(\eta^{L,L+1}) - \frac{1}{p_L(L)(L+1)} \right] + \\
& \quad + g(\eta(-L)) \left[f_{Min}^{(1)}(\eta) - f_{Min}^{(1)}(\eta^{-L,-L-1}) + \frac{1}{p_L(-L)(L+1)} \right] + \\
& \quad + p_+ \left[f_{Min}^{(1)}(\eta) - f_{Min}^{(1)}(\eta^L) + \frac{1}{p_+(L+1)} \right] + \\
& \quad + p_- \left[f_{Min}^{(1)}(\eta) - f_{Min}^{(1)}(\eta^{-L}) - \frac{1}{p_-(L+1)} \right] = 0
\end{aligned}$$

I termini del tipo $\frac{1}{p_L(x)(L+1)}$ si cancellano a vicenda e l'equazione si semplifica così:

$$\begin{aligned}
& \sum_{x=-L}^L g(\eta(x)) \left[f_{Min}^{(1)}(\eta^{x,x+1}) + f_{Min}^{(1)}(\eta^{x,x-1}) - 2f_{Min}^{(1)}(\eta) \right] + \\
& - p_+ \left[f_{Min}^{(1)}(\eta^L) - f_{Min}^{(1)}(\eta) \right] - p_- \left[f_{Min}^{(1)}(\eta^{-L}) - f_{Min}^{(1)}(\eta) \right] = 0
\end{aligned}$$

che equivale a dire:

$$(\Omega_L f_{Min}^{(1)})(\eta) = 0$$

Sfruttando il fatto che $f_{Min}^{(1)}(\cdot)$ deve verificare la condizione di normalizzazione $\sum_{\eta} f_{Min}^{(1)}(\eta) \mu_{staz}[\eta]$ si dimostra che deve essere necessariamente

$$f_{Min}^{(1)}(\eta) = 0$$

Dunque abbiamo verificato che anche all'ordine uno in α lo stato di minima produzione di entropia coincide con lo stato stazionario, ovvero il principio di minima produzione di entropia.

Appendice A

Elementi di teoria di probabilità

Lo scopo di questa appendice è presentare alcune idee di base della teoria di probabilità, necessarie per la comprensione dei modelli di particelle interagenti, senza alcuna pretesa di esaustività. Per una trattazione completa si rimanda il lettore interessato ad un testo specialistico di teoria della probabilità (ad esempio [6]).

Nei primi due paragrafi presentiamo le definizioni di spazio di probabilità e di variabile casuale. Nel seguito ci soffermeremo sui concetti di probabilità condizionata, derivata di Radom-Nikodim e martingala.

A.1 Spazio di probabilità

A) spazio finito

Dal punto di vista fisico la teoria della probabilità può servire per definire modelli probabilistici di un esperimento. Si considera ad esempio un esperimento (non meglio specificato) con un numero finito di possibili risultati aleatori, che indichiamo con $\omega_1, \dots, \omega_N$; tali possibili risultati sono detti, in termini probabilistici, *eventi elementari*. L'insieme $\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_N\}$ è lo *spazio degli eventi elementari*. La scelta dello spazio Ω è il primo passo nel formulare un modello probabilistico.

Esempio. Un esempio classico di esperimento è quello dei lanci di una moneta; se la moneta viene lanciata n volte gli eventi elementari sono successioni di testa (T) o croce (C) e lo spazio degli eventi elementari è

$$\Omega = \{\omega = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) ; \alpha_i = T \text{ o } C\}$$

Tale spazio è finito e contiene $N = 2^n$ elementi.

In genere ciò che interessa di un esperimento non è il particolare risultato dell'esperimento stesso, ma se tale risultato ha o no una particolare caratteristica, cioè appartiene o no ad un dato sottoinsieme dello spazio degli eventi elementari. Definiamo *eventi* tutti i sottoinsiemi $A \subset \Omega$ per cui, sotto le condizioni dell'esperimento, è possibile dire se il generico risultato ω appartiene o no ad A . Chiaramente se A e B sono due eventi ci aspettiamo che sia possibile dire se un risultato ω appartiene ad A o a B (quindi all'unione $A \cup B$), sia ad A che a B (cioè all'intersezione $A \cap B$), ad A ma non a B (cioè alla differenza $A - B$). Inoltre interpretiamo Ω e \emptyset rispettivamente come l'evento certo e l'evento impossibile. È quindi ragionevole che la collezione degli eventi \mathcal{A} formi un *algebra*, cioè sia tale che:

- $\Omega, \emptyset \in \mathcal{A}$
- dati $A, B \in \mathcal{A}$, allora $A \cup B, A \cap B, A - B$ appartengono ad \mathcal{A} .

Diremo che una collezione di eventi $\mathcal{D} = \{D_1, \dots, D_n\}$ è una *decomposizione* dello spazio Ω se i suoi *atomi* D_i sono disgiunti

$$D_i \cap D_j = \emptyset ; \forall i \neq j$$

e la loro somma è tutto lo spazio

$$D_1 \cup D_2 \cup \dots \cup D_n = \Omega$$

C'è un legame stretto tra algebre e decomposizioni di uno spazio finito Ω .

A) Data una decomposizione \mathcal{D} , tutte le possibili unioni di elementi di \mathcal{D} , insieme con \emptyset , formano un'algebra, detta *algebra indotta dalla decomposizione \mathcal{D}* , indicata con $\alpha(\mathcal{D})$.

B) Viceversa, se \mathcal{A} è un'algebra, c'è un'unica decomposizione \mathcal{D} i cui atomi sono elementi di \mathcal{A} e tale che $\alpha(\mathcal{D}) = \mathcal{A}$.

Dunque c'è una corrispondenza biunivoca tra algebre e decomposizioni di uno spazio finito.

Esempi. Alcune algebre sono:

1. l'algebra banale $\mathcal{A}_0 = \{\Omega, \emptyset\}$, a cui è associata la decomposizione $\mathcal{D}_0 = \{\Omega\}$.
2. dato $A \subset \Omega$ è definita l'algebra $\mathcal{A}_A = \{A, \bar{A}, \emptyset, \Omega\}$, associata alla decomposizione $\mathcal{D}_A = \{A, \bar{A}\}$
3. l'algebra più grande è la collezione di tutti i sottoinsiemi di Ω : $\bar{\mathcal{A}} = \{A : A \subset \Omega\}$; la decomposizione associata è $\bar{\mathcal{D}} = \{\{\omega_1\}, \{\omega_2\}, \dots, \{\omega_n\}\}$

Il passo successivo nella descrizione di un modello probabilistico consiste nell'assegnare un peso (o probabilità) $p(\omega)$ ad ogni evento elementare $\omega \in \Omega$.

Sui pesi $p(\omega)$ si fanno le ipotesi di non negatività:

$$p(\omega) \geq 0$$

e normalizzazione:

$$\sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1$$

In questo modo è possibile definire la *probabilità* $P[A]$ di ogni evento $A \in \mathcal{A}$ per additività

$$P[A] = \sum_{\omega \in A} p(\omega) \in [0, 1]$$

Indicheremo con P la funzione che associa ad ogni evento $A \in \mathcal{A}$ la sua probabilità $P[A]$.

In conclusione uno *spazio di probabilità* è una tripla

$$(\Omega, \mathcal{A}, P)$$

formata dallo spazio degli eventi elementari Ω , l'algebra degli eventi \mathcal{A} e la probabilità P .

Esempio. Riprendiamo l'esempio del lancio della moneta con spazio degli eventi elementari $\Omega_B = \{\omega = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) : \alpha_i = 0 \text{ o } 1\}$. Una decomposizione \mathcal{D}_B di questo spazio è definita dagli eventi

$$A_k = \{\omega = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) : \alpha_1 + \dots + \alpha_n = k\} ; k = 0, 1, \dots, n.$$

A_k corrisponde all'evento in cui si hanno k successi nel lancio della moneta. Indichiamo $\mathcal{A}_B = \alpha(\mathcal{D}_B)$. Per definire la probabilità P_B , associamo al singolo evento elementare il peso

$$p(\omega) = p^{\sum \alpha_i} (1-p)^{n-\sum \alpha_i}$$

essendo p un numero fissato tra 0 e 1 che corrisponde alla probabilità di successo in un singolo lancio di moneta. Lo spazio di probabilità così ottenuto: $(\Omega_B, \mathcal{A}_B, P_B)$ è noto come *schema di Bernoulli* e la collezione delle probabilità degli atomi A_k

$$P(k) =: P_B[A_k] = \frac{n!}{k!(n-k)!} p^k (1-p)^{n-k}$$

è nota come *distribuzione di Bernoulli* o *binomiale*. ($P(k)$ descrive la probabilità di avere k successi nel lancio di una moneta).

B) spazio generico

Il formalismo introdotto nella definizione di spazio di probabilità risulta ridondante se si ha a che fare solo con spazi finiti. In quel caso infatti è possibile prendere sempre come algebra degli eventi la collezione $\overline{\mathcal{A}}$ di tutti i sottoinsiemi di Ω . Questo non si può fare su spazio generico (ad esempio non numerabile), dove è quindi necessario specificare qual è la collezione di eventi che si vuole considerare.

Esempio. Per capire il problema consideriamo l'esperimento consistente in un numero infinito di lanci di moneta, tali che ad ogni lancio la probabilità di successo è p e la probabilità di insuccesso è $(1-p)$. Prendiamo per semplicità $p = \frac{1}{2}$. È naturale prendere come spazio degli eventi elementari

$$\Omega = \{\omega = (\alpha_1, \alpha_2, \dots) : \alpha_k = 0 \text{ o } 1 \text{ per } k = 1, 2, \dots\}$$

Tale spazio è infinito con la cardinalità del continuo; ogni successione ω può infatti essere vista come rappresentazione binaria di un numero reale in $[0, 1)$. Per ragioni di simmetria ci aspettiamo che tutti i risultati ω debbano essere equiprobabili e, necessariamente, a probabilità nulla $p(\omega) = 0$. Quindi conoscere la probabilità dei singoli eventi elementari non è più sufficiente a conoscere le probabilità degli eventi fisicamente interessanti.

Per costruire un modello probabilistico su spazio generico Ω è necessario assegnare la probabilità non ai singoli eventi elementari, ma direttamente agli eventi $A \subset \Omega$. Passando da spazi finiti a spazi generici le caratteristiche che si vogliono conservare sono il fatto che la collezione degli eventi sia un'algebra e l'additività della probabilità. Tuttavia per avere una teoria matematica interessante vanno fatte delle richieste più forti, ovvero di chiusura rispetto unioni (e intersezioni) numerabili per la collezione degli eventi e di additività numerabile per la probabilità P .

In base a queste considerazioni definiamo uno *spazio di probabilità* come una tripla

$$(\Omega, \mathcal{F}, P)$$

dove: Ω , lo spazio degli eventi elementari ω , è uno spazio generico; \mathcal{F} , la collezione degli eventi, è una σ -algebra di Ω , cioè una classe di sottoinsiemi di Ω tale che

- \emptyset, Ω sono elementi di \mathcal{F}
- se $A_n \in \mathcal{F}$ per $n = 1, 2, \dots$, allora l'unione e l'intersezione numerabile sono nella σ -algebra: $\cup_n A_n, \cap_n A_n \in \mathcal{F}$
- se $A \in \mathcal{F}$ allora $\overline{A} \in \mathcal{F}$

(chiaramente ogni σ -algebra è anche un'algebra). La coppia (Ω, \mathcal{F}) è detta *spazio di misura*. P è una misura di probabilità, cioè una funzione positiva $P[\cdot] : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ normalizzata:

$$P[\Omega] = 1$$

e σ -additiva, cioè tale che se A_1, A_2, \dots sono una collezione numerabile di eventi disgiunti allora

$$P[\cup_n A_n] = \sum_n P[A_n]$$

Se non valgono le condizioni di positività e normalizzazione si parla più in generale di misura σ -additiva rispetto ad \mathcal{F} .

Per definire una probabilità su uno spazio di misura (Ω, \mathcal{F}) non è necessario specificare la probabilità di ogni evento $A \in \mathcal{F}$. Questo fatto è espresso dai seguenti utili risultati.

Proposizione 11. *Data una qualsiasi classe \mathcal{G} di sottoinsiemi di Ω esiste ed è unica la σ -algebra minimale contenente \mathcal{G} , che viene indicata con $\sigma(\mathcal{G})$.*

Proposizione 12 (di Caratheodory). *Sia Ω uno spazio, \mathcal{A} un'algebra in Ω ed $\mathcal{F} = \sigma(\mathcal{A})$ la σ -algebra minimale contenente \mathcal{A} . Se P_0 è una probabilità su (Ω, \mathcal{A}) , c'è un'unica probabilità P su (Ω, \mathcal{F}) che è un'estensione di P_0 , cioè tale che $P[A] = P_0[A] \quad \forall A \in \mathcal{A}$.*

Esempio. Un esempio molto importante di spazio di misura è $(\mathbb{R}, \mathcal{B})$, dove $\mathbb{R} = (-\infty, +\infty)$ è la retta reale e \mathcal{B} è la σ -algebra dei boreliani, cioè la *sigma*-algebra minimale costruita a partire dagli intervalli $(-\infty, x]$. È facile capire che tale σ -algebra contiene ogni tipo di intervallo, i singoli punti ed ogni unione numerabile di insiemi di questo tipo; per costruire un insieme in \mathbb{R} non appartenente a \mathcal{B} bisogna faticare molto (chiamando in causa l'assioma della scelta). Per definire una probabilità P sui boreliani è sufficiente stabilire la probabilità di tutti gli insiemi del tipo $(-\infty, x]$; $x \in \mathbb{R}$, cioè basta conoscere la funzione di distribuzione $F(x) = P[(-\infty, x]]$. La *misura di Lebesgue* su $[0, 1]$ è definita da

$$F(x) = x \quad \forall x \in [0, 1]$$

e viene indicata con $\lambda[\cdot]$.

A.2 Variabili casuali

Il concetto di variabile casuale serve a definire le quantità che sono soggette a misurazione in un esperimento probabilistico.

Dato uno spazio di probabilità (Ω, \mathcal{F}, P) , una *variabile casuale* X è una generica funzione $X(\cdot) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ \mathcal{F} -misurabile, cioè tale che la preimmagine di ogni boreliano è un evento di \mathcal{F} :

$$B \in \mathcal{B} \quad \Rightarrow \quad X^{-1}(B) \in \mathcal{F}$$

Esempio. Il più semplice esempio di variabile casuale è la funzione indicatrice di un evento A

$$\mathbb{1}_A(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{se } \omega \in A \\ 0 & \text{se } \omega \notin A \end{cases}$$

Una variabile casuale del tipo

$$X(\omega) = \sum_n x_n \mathbb{1}_{A_n}(\omega)$$

dove $\{A_n\}$ è una decomposizione di Ω , è detta *semplice* se la somma è finita, *discreta* se la somma è numerabile.

La richiesta di misurabilità sulle variabili casuali è fondamentale. A partire dallo spazio di probabilità (Ω, \mathcal{F}, P) è ben definito il nuovo spazio di probabilità $(\mathbb{R}, \mathcal{B}, P_X)$ essendo P_X la *distribuzione di probabilità* di X :

$$P_X[B] = P[X^{-1}(B)] , \quad \forall B \in \mathcal{B}$$

Chiamiamo anche *funzione di distribuzione* di X la funzione

$$F_X(x) = P_X[(-\infty, x]]$$

Intermini di σ -algebre la richiesta di misurabilità su X si traduce in

$$X^{-1}(\mathcal{B}) \subset \mathcal{F}$$

È facile verificare che la preimmagine di una σ -algebra è sempre una σ -algebra; definiamo quindi $\sigma_X = X^{-1}(\mathcal{B})$ la σ -algebra generata da X . Più in generale una collezione $\{X_\alpha\}$ di variabili casuali genera la σ -algebra $\sigma(\cup_\alpha \sigma_{X_\alpha})$.

Un teorema fondamentale ci assicura che una qualunque variabile casuale X positiva su (Ω, \mathcal{F}) si può sempre ottenere come limite puntuale crescente di una successione di variabili casuali semplici X_n :

$$X_n(\omega) \uparrow X(\omega) \text{ se } n \rightarrow \infty , \quad \forall \omega \in \Omega$$

Questo ci permette di costruire la teoria inizialmente considerando variabili casuali semplici e poi generalizzando con passaggi al limite.

Questo modo di procedere si usa nella definizione di valore atteso. Data la variabile casuale semplice $X(\omega) = \sum_{i=1}^n x_i \mathbb{1}_{A_i}(\omega)$ definiamo il suo *valore atteso* tramite:

$$E[X] = \sum_{i=1}^n x_i P[A_i]$$

Per una generica variabile casuale X positiva basta prendere una successione $\{X_n\}$ di variabili semplici che tende ad X e si definisce:

$$E[X] = \lim_{n \rightarrow \infty} E[X_n]$$

(chiaramente bisogna dimostrare che il limite è ben definito e non dipende dalla particolare scelta della successione $\{X_n\}$). Se X non ha segno definito si scompone in parte positiva e parte negativa $X = X^+ - X^-$ e si prende

$$E[X] = E[X^+] - E[X^-]$$

Normalmente il valore atteso di una variabile casuale X si indica anche con $E[X] = \int_{\Omega} X dP$.

nozioni di convergenza

Vediamo le definizioni dei vari tipi di convergenza di successioni di variabili casuali. Sia X_1, X_2, \dots una successione di variabili casuali sullo spazio di probabilità (Ω, \mathcal{F}, P) .

Definizione1 La successione $\{X_n\}$ converge *in probabilità* alla variabile casuale X , e si indica con $X_n \xrightarrow{P} X$, se risulta

$$\forall \epsilon > 0 \quad \lim_{n \rightarrow \infty} P[|X_n - X| > \epsilon] = 0$$

Definizione2 La successione $\{X_n\}$ converge *con probabilità uno* (o quasi ovunque) alla variabile casuale X se:

$$P[\lim_{n \rightarrow \infty} X_n(\omega) = X(\omega)] = 1$$

Ciò si indica con $X_n \rightarrow X$ *q.o.*

Definizione3 La successione $\{X_n\}$ converge *in media di ordine p* alla variabile casuale X , e si indica con $X_n \xrightarrow{L_p} X$, se:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E[|X_n - X|^p] = 0$$

Con L^p si indica lo spazio di tutte le variabili casuali X tali che $E[|X^p|] < \infty$. Particolarmente interessante è lo spazio di Hilbert L_2 associato al prodotto scalare $\langle X, Y \rangle = E[XY]^{\frac{1}{2}}$.

Definizione4 La successione $\{X_n\}$ converge *in distribuzione* alla variabile casuale X , e si indica con $X_n \xrightarrow{d} X$, se:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E[f(X_n - X)] = E[f(X)]$$

per ogni funzione continua e limitata $f(\cdot)$.

Si può dimostrare (non lo faremo) che tra queste nozioni di convergenza sussistono le seguenti relazioni

$$\begin{aligned} X_n \rightarrow X \text{ q.o.} &\Rightarrow X_n \xrightarrow{p} X \\ X_n \xrightarrow{L^p} X &\Rightarrow X_n \xrightarrow{p} X \\ X_n \xrightarrow{p} X &\Rightarrow X_n \xrightarrow{d} X \end{aligned}$$

Ci limitiamo ad illustrare alcuni esempi istruttivi.

Esempi. Consideriamo lo spazio di probabilità $([0, 1], \mathcal{B}, \lambda)$. Scegliamo la successione di variabili casuali così

$$X_{n,1}(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in \left[\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n}\right] \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

con $i = 1, \dots, n$; $n = 1, 2, \dots$. Se ordiniamo la successione così: $X_{1,1}, X_{2,1}, X_{2,2}, X_{3,1}, \dots$ otteniamo una successione che converge in probabilità a zero, ma che non converge puntualmente in nessun punto. Il motivo è semplice; la zona in cui $X_{n,i}$ vale 1 ha misura che tende a zero, ma non è fissa e va da una parte all'altra dell'intervallo $[0, 1]$. È facile verificare che c'è anche convergenza in media di ordine p per ogni $p > 0$. Basta però definire $X_{n,1}$ pari ad e^n nell'intervallo $\left[\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n}\right]$ per perdere la convergenza in media (qualunque sia p). Invece per avere la convergenza quasi ovunque basta fissare i e considerare la sottosuccessione $\{X_{n,i}, n = 1, 2, \dots\}$.

Abbiamo già visto come ogni variabile casuale X definisce sullo spazio $(\mathbb{R}, \mathcal{B})$ una misura di probabilità P_X ed una funzione di distribuzione F_X . Ha quindi senso definire convergenza di misure di probabilità e funzioni di distribuzione definite sui boreliani (o in generale in spazi metrici).

Definizione5 Sia P_1, P_2, \dots una successione di misure di probabilità sullo spazio di misura (E, \mathcal{B}) con $E \subset \mathbb{R}^d$ e \mathcal{B} la σ -algebra dei boreliani. Diremo che *converge debolmente* alla probabilità P , e lo indichiamo con $P_n \xrightarrow{w} P$, se

$$\int_E f(x) P_n[dx] \rightarrow \int_E f(x) P[dx]$$

per ogni funzione f continua e limitata su E . In tal caso diciamo anche che la corrispondente successione di funzioni di distribuzione (d-dimensionale) converge debolmente.

Definizione6 La successione P_1, P_2, \dots converge *in generale* alla probabilità P (notazione $P_n \Rightarrow P$) se

$$P_n[A] \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P[A]$$

per ogni evento A tale che $P[\partial A] = 0$.

Definizione7 Per successioni di funzioni di distribuzione F_1, F_2, \dots si parla di convergenza *in generale* ad F se c'è convergenza in ogni punto di continuità della funzione F .

Si dimostra che tali nozioni di convergenza sono tutte equivalenti e corrispondono alla convergenza in distribuzione di variabili casuali; cioè se $X_n \xrightarrow{d} X$ allora le corrispondenti funzioni di distribuzione convergono debolmente, ovvero in generale.

A.2.1 Probabilità e valori aspettati condizionali

Per definire le probabilità condizionali consideriamo inizialmente due eventi A e B con la condizione $P[A] > 0$. Definiamo la probabilità di B condizionata da A tramite

$$P[B | A] = \frac{P[AB]}{P[A]}$$

Questa nozione ha un significato fisico immediato e descrive la probabilità dell'evento B supposto che sia verificato l'evento A .

Diremo che A e B sono *indipendenti* se $P[B | A] = P[B]$, cioè la probabilità di B non è modificata dal fatto che A è verificato. Come definizione di eventi indipendenti si usa la relazione equivalente:

$$P[AB] = P[A]P[B]$$

che evidenzia la simmetria tra gli eventi A e B e non necessita del vincolo $P[A] > 0$. Più in generale due σ -algebre σ_1 e $\sigma_2 \subset \mathcal{F}$ sono indipendenti se, comunque scegliamo due eventi $A_1 \in \sigma_1$ e $A_2 \in \sigma_2$, risultano indipendenti. Due variabili casuali X e Y sono indipendenti se le σ -algebre σ_X e σ_Y da esse generate sono indipendenti.

Spesso ha senso chiedersi qual è la probabilità condizionata da eventi a probabilità nulla.

Esempio. Consideriamo ad esempio lo spazio di probabilità $([0, 1]^2, \mathcal{B}(\mathbb{R}^2), \lambda)$. Fissiamo gli eventi $A = \{(x, y) : x = 0, 5\}$ e $B = \{(x, y) : y \geq x\}$. Nonostante $\lambda[A] = 0$, ha senso chiedersi qual è la probabilità $P[B | A]$, cioè la probabilità che y sia maggiore di x supposto che $x = 0, 5$.

Per rispondere a tale esigenza si introducono le probabilità condizionate da σ -algebre.

Consideriamo inizialmente uno spazio di probabilità finito (Ω, \mathcal{F}, P) e supponiamo sia $\mathcal{D} = (D_1, \dots, D_n)$ la decomposizione associata all'algebra $\mathcal{A} \subset \mathcal{F}$. Definiamo la probabilità dell'evento A condizionata dall'algebra \mathcal{A} come la variabile casuale che in ogni atomo D_i assume il valore $P[A | D_i]$:

$$P[A | \mathcal{A}](\omega) = \sum_{i=1}^n P[A | D_i] \mathbb{1}_{D_i}(\omega)$$

Data la variabile casuale $X = \sum_{i=1}^m x_i \mathbb{1}_{A_i}$ definiamo il valore aspettato condizionale tramite

$$E[X | \mathcal{A}] = \sum_{i=1}^m x_i P[A_i | \mathcal{A}]$$

Generalizziamo ora la trattazione ad uno spazio di probabilità (Ω, \mathcal{F}, P) generico. A tale scopo sono necessarie alcune nozioni preliminari. Siano μ e ν due misure finite σ -additive su (Ω, \mathcal{F}) . Diciamo che ν è *assolutamente continua* rispetto a μ se:

$$\mu[A] = 0 \quad \Rightarrow \quad \nu[A] = 0, \quad A \in \mathcal{F}$$

Vale il seguente

Teorema 4 (di Radom-Nikodim). *La misura ν è assolutamente continua rispetto a μ se e solo se esiste una variabile casuale f tale che*

$$\mu[A] = \int_A f(\omega) \nu[d\omega], \quad \forall A \in \mathcal{F}$$

La funzione $f(\cdot)$ è unica a meno di un'arbitrarietà su insiemi di misura nulla ed è detta *derivata di Radom-Nikodim* rispetto alla σ -algebra \mathcal{F} :

$$f = \left. \frac{d\mu}{d\nu} \right|_{\mathcal{F}}$$

Più in generale, date due misure μ e ν , possiamo scrivere in modo unico $\nu = \nu_\mu + \nu_\perp$ dove ν_μ è assolutamente continua rispetto a μ e ν_\perp è singolare rispetto a μ , cioè è concentrata in un insieme di misura μ nulla.

Possiamo quindi dare la definizione di valore aspettato condizionale.

Definizione 1 Data una variabile casuale X in (Ω, \mathcal{F}, P) ed una σ -algebra $\sigma \subset \mathcal{F}$ definiamo il valore aspettato di X condizionato da σ , indicato con $E[X | \sigma]$, una variabile casuale tale che:

- $E[X | \sigma]$ è σ -misurabile
- $\forall A \in \sigma$ risulta

$$\int_A X dP = \int_A E[X | \sigma] dP$$

Per il teorema di Radom-Nikodim possiamo scrivere

$$E[X | \sigma] = \left. \frac{d\nu}{dP} \right|_{\sigma}$$

essendo ν la misura definita da

$$\nu[A] = \int_A X dP, \quad A \in \sigma$$

Definizione2 Dato $A \in \mathcal{F}$ definiamo la probabilità di A condizionata dalla σ -algebra σ tramite

$$P[A | \sigma] = E[\mathbb{1}_A | \sigma]$$

Definizione3 Definiamo infine il valore aspettato di X condizionato da Y come

$$E[X | Y] = E[X | \sigma_Y]$$

essendo σ_Y la σ -algebra generata dalla variabile casuale Y . Oppure, più in generale:

$$E[X | \{Y_\alpha\}] = E[X | \sigma_{\{Y_\alpha\}}]$$

Si può dimostrare facilmente che su spazio finito tali definizioni si riducono a quelle viste prima.

Elenchiamo, senza dimostrarle, alcune proprietà che sono verificate da valori aspettati e probabilità condizionali.

1. linearità:

$$E[\alpha X_1 + \beta X_2 | \sigma] = \alpha E[X_1 | \sigma] + \beta E[X_2 | \sigma]$$

2. poichè $P[A | \sigma]$ e $E[X | \sigma]$ sono variabili casuali, possiamo chiederci qual è il loro valore aspettato:

$$E[P[A | \sigma]] = P[A]; \quad E[E[X | \sigma]] = E[X]$$

3. se la variabile casuale X è σ -misurabile (cioè $X^{-1}(\mathcal{B}) \subset \sigma$) allora

$$E[X | \sigma] = X$$

e, più in generale

$$E[XY | \sigma] = X E[Y | \sigma]$$

4. infine, se la σ -algebra σ_2 è un raffinamento di σ_1 , cioè $\sigma_1 \subset \sigma_2$, allora

$$E[E[X | \sigma_2] | \sigma_1] = E[X | \sigma_1]; \quad E[E[X | \sigma_1] | \sigma_2] = E[X | \sigma_1]$$

A.2.2 Martingale

In teoria della probabilità ci sono due importanti classi di successioni di variabili casuali dipendenti, le martingale e le catene di Markov. In questo paragrafo definiamo le martingale analizzandone alcuni esempi; le catene di Markov sono invece trattate in modo più approfondito nel capitolo 1, in quanto costituiscono lo strumento probabilistico essenziale in tutta la teoria dei sistemi stocastici di particelle interagenti.

Sia (Ω, \mathcal{F}, P) un dato spazio di probabilità e $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2, \dots$ una successione di σ -algebre contenute l'una nell'altra: $\mathcal{F}_1 \subset \mathcal{F}_2 \subset \dots \subset \mathcal{F}$; sia X_0, X_1, \dots una successione di variabili casuali tali che, per ogni n , X_n è \mathcal{F}_n -misurabile ed ha norma L_1 finita: $E[|X_n|] < \infty$. Diciamo che la successione $\{X_n\}$ è una *martingala* rispetto alle σ -algebre \mathcal{F}_n se, per ogni n ed m tali che $m \geq n$ risulta:

$$E[X_m | \mathcal{F}_n] = X_n \quad (\text{A.1})$$

Se non viene specificata la successione di σ -algebre si intende $\mathcal{F}_n \equiv \sigma(X_0, X_1, \dots, X_n)$. Un'immediata conseguenza della definizione di martingala è che $E[X_n] = E[X_0] \quad \forall n$.

Per capire meglio il significato di martingala conviene esaminare alcuni esempi:

1. Sia $\{\xi_n, n = 1, 2, \dots\}$ una successione di variabili casuali indipendenti ed identicamente distribuite (i.i.d) a media nulla; poniamo $X_n = \xi_0 + \xi_1 + \dots + \xi_n$ e $\mathcal{F}_n = \sigma(\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n)$. È facile capire che la successione $\{X_n, \mathcal{F}_n\}$ è una martingala. È chiaro infatti che X_n è \mathcal{F}_n -misurabile; per dimostrare la relazione (A.1) si scrive:

$$E[X_{n+1} | \mathcal{F}_n] = E[X_n | \mathcal{F}] + E[\xi_{n+1} | \mathcal{F}_n]$$

poichè X_n è \mathcal{F}_n -misurabile il primo termine coincide con X_n mentre, per l'indipendenza delle ξ_i , il secondo termine è $E[\xi_i] = 0$.

2. Se $\{\xi_n, n = 1, 2, \dots\}$ è una successione di variabili i.i.d. a media unitaria, con un ragionamento analogo a prima si trova che la successione definita da $X_n = \prod_{k=0}^n \xi_k$ è una martingala.

3. Un ulteriore esempio di martingala si ottiene a partire da una successione di σ -algebre $\mathcal{F}_1 \subset \mathcal{F}_2 \subset \dots \subset \mathcal{F}$ ed una variabile casuale X \mathcal{F} -misurabile, prendendo $X_n = E[X | \mathcal{F}_n]$. La verifica segue banalmente a partire dalle proprietà dei valori aspettati condizionali.

Appendice B

Processi di Markov non omogenei

Scopo di questa appendice è analizzare la relazione tra due catene di Markov definite nello stesso spazio di misura (Ω, \mathcal{F}) , espressa dalla derivata di Radom-Nikodim tra le due rispettive probabilità. Nel primo paragrafo consideriamo due catene di Markov omogenee $\{X_1(t)\}$ e $\{X_2(t)\}$. Nei paragrafi successivi definiamo la catena di Markov $X^F(t)$ resa non omogenea dalla presenza di un campo esterno F e vediamo che relazione c'è tra una catena di Markov omogenea ed una non omogenea.

B.1 Derivata di Radom-Nikodim tra due catene di Markov omogenee

Nel capitolo 1 abbiamo visto la definizione di catena di Markov a tempo continuo. Se \mathcal{A} è lo spazio (numerabile) su cui assume valori, allora risultano definiti in modo naturale lo spazio degli eventi elementari $\Omega = (\mathcal{A} \times \mathbb{R}_+)^{\mathbb{N}}$ e la σ -algebra $\mathcal{F} = \sigma(\{X_n, \tau_n\})$. Per definire la misura di probabilità P sullo spazio di misura (Ω, \mathcal{F}) , cioè per caratterizzare probabilisticamente la catena di Markov $X(t)$, bisogna fissare la distribuzione iniziale μ , la matrice delle probabilità di transizione $p(\alpha, \beta)$ ed i tassi di decadimento $\lambda(\alpha)$.

Consideriamo ora due distinte catene di Markov che assumono valori sullo stesso spazio delle configurazioni \mathcal{A} . Ad esse sono associate in modo unico le due terne (μ_1, p_1, λ_1) e (μ_2, p_2, λ_2) , ovvero le due misure di probabilità P_1 e P_2 sullo spazio di misura (Ω, \mathcal{F}) . La relazione tra le due catene di Markov è espressa dalla derivata di Radom-Nikodim tra le rispettive probabilità P_1 e P_2 calcolata rispetto alla σ -algebra generata dai cammini fino al tempo t .

Proposizione 13. *Se le due catene di Markov sono definite con lo stesso stato iniziale*

$$\mu_1 = \mu_2 =: \mu$$

ed hanno dinamica equivalente, nel senso che i salti permessi sono gli stessi per entrambi i processi:

$$p_1(\alpha, \beta) = 0 \Leftrightarrow p_2(\alpha, \beta) = 0$$

allora risulta

$$\begin{aligned} \frac{dP_1}{dP_2}(t) = \exp \left\{ \sum_{s \leq t} \log \frac{\lambda_1(X(s_-))p_1(X(s_-), X(s_+))}{\lambda_2(X(s_-))p_2(X(s_-), X(s_+))} + \right. \\ \left. - \int_0^t ds [\lambda_1(X(s_-)) - \lambda_2(X(s_-))] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

avendo indicato con $\sum_{s \leq t}$ la somma su tutti gli istanti di salto $X_n \rightarrow X_{n+1}$ nell'intervallo $[0, T]$.

La richiesta che lo stato iniziale sia lo stesso per entrambi i processi non è rilevante; in generale la derivata di Radom-Nikodim si fattorizza:

$$\frac{dP_1}{dP_2}(t) = \frac{d\mu_1}{d\mu_2} \frac{d\bar{P}_1}{d\bar{P}_2}(t)$$

con una parte statica $\frac{d\mu_1}{d\mu_2}$ che tiene conto della relazione tra i due stati iniziali ed una parte dinamica $\frac{d\bar{P}_1}{d\bar{P}_2}$ espressa dalla relazione (B.1). Al contrario la richiesta di equivalenza tra le dinamiche è essenziale, serve infatti a garantire che le due probabilità P_1 e P_2 siano l'una assolutamente continua rispetto l'altra (condizione necessaria e sufficiente per l'esistenza delle derivate di Radom-Nikodim).

Dim. Per come è definita la derivata di Radom-Nikodim dobbiamo dimostrare che

$$\int_A dP_1 = \int_A \frac{dP_1}{dP_2}(t) dP_2, \quad \forall A \in \mathcal{F}_t$$

Una forma equivalente di tale relazione è

$$E_1[F] = E_2[F \frac{dP_1}{dP_2}(t)] \quad (\text{B.2})$$

essendo F una generica funzione cilindrica \mathcal{F}_t -misurabile, cioè della forma

$$F(\{X(s) \mid s \in [0, t]\}) = F(X(s_1), \dots, X(s_k)), \quad 0 \leq s_1 < \dots < s_k \leq t$$

Cerchiamo di riscrivere il primo membro della (B.2).

$$E_1[F] = E_1[F(X(s_1), \dots, X(s_k))] = \sum_{n=0}^{\infty} E_1[F(X(s_1), \dots, X(s_k)) \mathbb{1}_{\{T_n \leq t \leq T_{n+1}\}}] \quad (\text{B.3})$$

abbiamo scomposto lo spazio Ω con gli eventi disgiunti $\{T_n \leq t \leq T_{n+1}\}$ (t è fissato, mentre T_n è l'istante di n -simo salto, cioè è una variabile casuale). Nell'insieme $\{T_n \leq t \leq T_{n+1}\}$ il cammino fino all'istante t è definito univocamente dalle prime n posizioni (X_1, \dots, X_n) e dai rispettivi istanti di salto (T_1, \dots, T_n) . Dunque possiamo riscrivere:

$$F(X(s_1), \dots, X(s_k)) =: F_n(X_1, T_1, \dots, X_n, T_n)$$

Sostituendo nella (B.3) otteniamo:

$$E_1[F] = \sum_{n=0}^{\infty} E_1[F_n(X_1, T_1, \dots, X_n, T_n) \mathbb{1}_{\{t \geq T_n\}} \mathbb{1}_{\{t < T_{n+1}\}}]$$

per le proprietà dei valori aspettati condizionali possiamo sostituire $E_1[\cdot] = E_1[E_1[\cdot \mid \mathcal{F}_n]]$. L'unico fattore che non è \mathcal{F}_n -misurabile è $\mathbb{1}_{\{t < T_{n+1}\}}$, quindi risulta:

$$E_1[F] = \sum_{n=0}^{\infty} E_1[F_n(X_1, T_1, \dots, X_n, T_n) \mathbb{1}_{\{t \geq T_n\}} E_1[\mathbb{1}_{\{t < T_{n+1}\}} \mid \mathcal{F}_n]] \quad (\text{B.4})$$

per la proprietà di Markov e per come è definita la probabilità P_1 :

$$E_1[\mathbb{1}_{\{t < T_{n+1}\}} \mid \mathcal{F}_n] = P_1[T_{n+1} > t \mid X_n, T_n] = e^{-\lambda(X_n)(t-T_n)}$$

sostituendo in (B.4) risulta:

$$E_1[F] = \sum_{n=0}^{\infty} E_1[F_n(X_1, T_1, \dots, X_n, T_n) e^{-\lambda(X_n)(t-T_n)} \mathbb{1}_{\{t \geq T_n\}}] =$$

eseguimo un calcolo diretto

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha_0, \dots, \alpha_n} \int_0^{\infty} ds_1 \dots ds_n \mu[\alpha_0] \left[\prod_{0 \leq i \leq n-1} p_1(\alpha_i, \alpha_{i+1}) \right] \left[\prod_{0 \leq j \leq n-1} \lambda_1(\alpha_j) e^{-\lambda_1(\alpha_j) s_{j+1}} \right] \times \\
&\times F_n(\alpha_1, s_1, \dots, \alpha_n, (s_1 + \dots + s_n)) e^{-\lambda_1(\alpha_n)(t-s_1-\dots-s_n)} \mathbb{1}_{\{t \geq s_1+\dots+s_n\}} = \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha_0, \dots, \alpha_n} \int_0^{\infty} ds_1 \dots ds_n \mu[\alpha_0] \left[\prod_{0 \leq i \leq n-1} p_2(\alpha_i, \alpha_{i+1}) \right] \left[\prod_{0 \leq j \leq n-1} \lambda_2(\alpha_j) e^{-\lambda_2(\alpha_j) s_{j+1}} \right] \times \\
&\times \prod_{0 \leq k \leq n-1} \left[\frac{\lambda_1(\alpha_k) p_1(\alpha_k, \alpha_{k+1})}{\lambda_2(\alpha_k) p_2(\alpha_k, \alpha_{k+1})} e^{-[\lambda_1(\alpha_k) - \lambda_2(\alpha_k)] s_{k+1}} \right] e^{[\lambda_1(\alpha_n) - \lambda_2(\alpha_n)](t-s_1-\dots-s_n)} \times \\
&\times F_n(\alpha_1, s_1, \dots, \alpha_n, (s_1 + \dots + s_n)) e^{-\lambda_2(\alpha_n)(t-s_1-\dots-s_n)} \mathbb{1}_{\{t \geq T_n\}} =
\end{aligned}$$

per come è definita la probabilità P_2

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=0}^{\infty} E_2 \left[\exp \left\{ \sum_{s \leq t} \frac{\lambda_1(X(s_-)) p_1(X(s_-), S(s_+))}{\lambda_2(X(s_-)) p_2(X(s_-), X(s_+))} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \int_0^{T_n} ds [\lambda_1(X(s)) - \lambda_2(X(s))] - [\lambda_1(X_n) - \lambda_2(X_n)](t - T_n) \right\} \right. \\
&\quad \left. F_n(X_1, T_1, \dots, X_n, T_n) e^{-\lambda_2(X_n)(t-T_n)} \mathbb{1}_{\{T_n \leq t\}} \right]
\end{aligned}$$

con un discorso analogo a prima risulta che si può sostituire

$$e^{-\lambda_2(X_n)(t-T_n)} \rightarrow \mathbb{1}_{\{T_{n+1} > t\}}$$

Sfruttando l'additività del valore aspettato si ottiene la tesi.

□

B.2 Alcune martingale nel contesto dei processi di Markov

Vogliamo introdurre in questo paragrafo alcune martingale nel contesto dei processi di Markov. Consideriamo una funzione regolare e limitata $F(\cdot, \cdot) : \mathbb{R}_+ \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ ed un processo di Markov $\{X(t)\}$ a valori in \mathcal{A} , di generatore L . Vale la seguente:

Proposizione 14. *I processi stocastici:*

$$M^F(t) = F(t, X(t)) - F(0, X(0)) - \int_0^t ds (\partial_s + L)F(s, X(s)) \quad (\text{B.5})$$

$$N^F(t) = [M^F(t)]^2 - \int_0^t ds [LF^2(s, X(s)) - 2F(s, X(s))LF(s, X(s))]$$

sono martingale rispetto alla filtrazione $\mathcal{F}_t = \sigma(\{X(s) ; s \leq t\})$

Dim. È immediato che $M^F(t)$ e $N^F(t)$ sono σ_t -misurabili; quindi, per definizione di martingala, ci basta verificare le relazioni:

$$E[M^F(t) | \mathcal{F}_s] = M^F(s) \quad (\text{B.6})$$

$$E[N^F(t) | \mathcal{F}_s] = N^F(s) \quad (\text{B.7})$$

Occupiamoci della prima relazione da verificare (B.6). Per la linearità del valore aspettato, ed il fatto che $F(0, X(0))$ e $\int_{[0,s]} dr (\partial_r + L)F(r, X(r))$ sono σ_s -misurabili la (B.6) si riscrive così

$$E[F(t, X(t)) | \mathcal{F}_s] = F(s, X(s)) + \int_s^t dr E[(\partial_r + L)F(r, X(r)) | \mathcal{F}_s]$$

Usiamo la notazione $F_r(\alpha) = F(r, \alpha)$, $F'_r(\alpha) = \partial_r F(r, \alpha)$, con cui la (B.6) assume la forma

$$E[F_t(X(t)) | \mathcal{F}_s] = F_s(X(s)) + \int_s^t dr \{E[F'_r(X(r)) | \mathcal{F}_s] + E[LF_r(X(r)) | \mathcal{F}_s]\} \quad (\text{B.8})$$

Sfruttando la proprietà di Markov e le equazioni di Kolmogorov si ottengono le seguenti identità:

$$E[F_t(X(t)) | \mathcal{F}_s] = E[F_t(X(t)) | X(s)] = (P_{t-s}F_t)(X(s))$$

$$E[F'_r | \mathcal{F}_s] = (P_{r-s}F'_r)(X(s))$$

$$E[(LF_r)(X(r)) | \mathcal{F}_s] = (P_{r-s}LF_r)(X(s))$$

Utilizzando tali relazioni la tesi (B.8) si riscrive nella forma:

$$(P_{t-s}F_t)(X(s)) = F_s(X(s)) + \int_s^t dr [(P_{r-s}F'_r)(X(s)) + (P_{r-s}LF_r)(X(s))]$$

Per $t = s$ tale relazione si riduce all'identità: $F_s(X(s)) = F_s(X(s))$; quindi ci basta verificare che le derivate temporali di entrambi i membri sono uguali

$$\frac{d}{dt}(P_{t-s}F_t)(X(s)) = (P_{t-s}F'_t)(X(s)) + (P_{t-s}LF_t)(X(s))$$

e questa relazione si verifica facilmente sfruttando le equazioni di Kolmogorov (1.10) e (1.11).

Ci resta da verificare la seconda parte della proposizione, cioè la relazione (B.7). A tale scopo dobbiamo studiare il processo $[M^F(t)]^2$ cercando di riscriverlo nella forma

$$\int_0^t ds \{LF^2(s, X(s)) - 2F(s, X(s))LF(s, X(s))\}$$

a meno di termini martingale. Partendo dalla definizione e manipolando algebricamente si ottiene:

$$\begin{aligned} [M^F(t)]^2 &= -2F(0, X(0))M^F(t) + M^{F^2}(t) + \int_0^t ds(\partial_s + L)F^2(s, X(s)) + \\ &- 2F(t, X(t)) \int_0^t ds(\partial_s + L)F(s, X(s)) + \left[\int_0^t ds(\partial_s + L)F(s, X(s)) \right]^2 \end{aligned}$$

I primi due termini sono martingale. Indichiamo con $M_0^F(t) = M^F(t) - F(0, X(0))$, che chiaramente è una martingala

$$\begin{aligned} [M^F(t)]^2 &= \int_0^t ds(\partial_s + L)F^2(s, X(s)) - 2M_0^F(t) \int_0^t ds(\partial_s + L)F(s, X(s)) + \\ &- \left[\int_0^t ds(\partial_s + L)F(s, X(s)) \right]^2 + \text{martingala} \end{aligned}$$

con un calcolo diretto si trova che è possibile sostituire

$$M_0^F(t) \int_0^t ds(\partial_s + L)F(s, X(s)) \longrightarrow \int_0^t ds M_0^F(s)(\partial_s + L)F(s, X(s))$$

modificando il risultato solo per una martingala a media nulla.

$$\begin{aligned} [M^F(t)]^2 &= \int_0^t ds [LF^2(s, X(s)) - 2F(s, X(s))LF(s, X(s))] + \\ &+ 2 \int_0^t ds \int_0^s dr(\partial_r + L)F(r, X(r))(\partial_s + L)F(s, X(s)) + \\ &- \left[\int_0^t ds(\partial_s + L)F(s, X(s)) \right]^2 + (\text{martingala}) \end{aligned}$$

la tesi si ottiene verificando che il secondo ed il terzo termine si annullano a vicenda. Risulta infatti

$$\begin{aligned} &2 \int_0^t ds \left(\int_0^s dr(\partial_r + L)F(r, X(r)) \right) (\partial_s + L)F(s, X(s)) + \\ &- \left(\int_0^t ds(\partial_s + L)F(s, X(s)) \right)^2 = \\ &= \left(\int_0^t ds \int_0^s dr - \int_0^t ds \int_s^t dr \right) (\partial_r + L)F(r, X(r))(\partial_s + L)F(s, X(s)) \end{aligned}$$

e questa espressione è nulla per l'evidente simmetria rispetto allo scambio $r \leftrightarrow s$ della funzione integranda.

□

La proposizione 14 è molto interessante perchè può essere immaginata come una generalizzazione a processi di Markov su spazio discreto della formula di Ito per i differenziali stocastici:

$$df(t, \xi(t)) = (\partial_t + L)f(t, \xi(t)) + (\partial_x f)b(t)dw(t)$$

($w(t)$ è il processo di Wiener) qualora $\xi(t)$ è una variabile stocastica L_2 con differenziale

$$d\xi(t) = a(t)dt + b(t)dw(t)$$

ed L è il generatore che agisce come

$$L = a(t)\partial_x + \frac{1}{2}b^2(t)\partial_x^2$$

È facile vedere che ogni integrale stocastico $\int G(t, \xi(t))dw(t)$ è una martingala a media nulla. Dunque la forma integrale della formula di Ito assume un aspetto del tutto analogo alla relazione (B.6). Ciò permette di utilizzare per processi di Markov su spazio discreto tecniche analoghe a quelle che si usano nella teoria dei processi stocastici continui. Da ora in poi ci riferiremo alla (B.6) come alla formula di Ito discreta.

B.3 Catene di Markov non omogenee

Nel capitolo 1 abbiamo introdotto solo catene di Markov omogenee temporalmente. Vogliamo ora considerare delle catene di Markov rese inomogenee dalla presenza di un campo esterno. Procederemo in modo costruttivo.

Il primo passo consiste nel verificare il seguente

Lemma 1. *Siano $V : \mathbb{R}_+ \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ e $F : \mathbb{R}_+ \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ due funzioni regolari rispetto alla variabile temporale e limitate. Il processo stocastico*

$$M_s^{V,F}(t) = F(t, X(t))e^{\int_s^t drV(r, X(r))} - \int_s^t du e^{\int_s^u drV(r, X(r))} \times \\ \times \{(\partial_u + L)F(u, X(u)) + V(u, X(u))F(u, X(u))\} \quad (\text{B.9})$$

è una martingala rispetto alle σ -algrebre $\mathcal{F}_t = \sigma(\{X(u) , s \leq u \leq t\})$ per $t \geq s$.

Dim. Definiamo il processo

$$A_s^{V,F}(t) = F(t, X(t))e^{\int_s^t drV(r, X(r))} \quad (\text{B.10})$$

Applicando la formula di Ito discreta alla funzione $F(t, \alpha)$ abbiamo che

$$M_s^F(t) = F(t, X(t)) - \int_s^t du(\partial_u + L)F(u, X(u))$$

è una martingala rispetto \mathcal{F}_t per $t \geq s$. Questo ci permette di riscrivere il processo (B.10) così

$$A_s^{V,F}(t) = \left[M_s^F(t) + \int_s^t du(\partial_u + L)F(u, X(u)) \right] e^{\int_s^t drV(r, X(r))} \quad (\text{B.11})$$

Nel secondo membro di tale relazione l'ultimo termine è differenziabile rispetto alla variabile t . Dunque per il teorema fondamentale del calcolo e la regola di Leibniz per la derivazione del prodotto si riscrive così

$$\begin{aligned} \int_s^t du(\partial_u + L)F(u, X(u))e^{\int_s^t drV(r, X(r))} &= \int_s^t du \{(\partial_u + L)F(u, X(u)) + \\ &+ V(u, X(u))\int_s^u dr(\partial_r + L)F(r, X(r))\} e^{\int_s^t drV(r, X(r))} = \end{aligned}$$

riutilizzando la formula di Ito discreta

$$\begin{aligned} &= \int_s^t du \{(\partial_u + L)F(u, X(u)) + V(u, X(u))F(u, X(u))\} e^{\int_s^u drV(r, X(r))} + \\ &\quad - \int_s^t du M_s^F(u)V(u, X(u))e^{\int_s^u drV(r, X(r))} \end{aligned}$$

Sostituendo tale risultato nella (B.11) abbiamo

$$\begin{aligned} A_s^{V,F}(t) &= \int_s^t du \{(\partial_u + L)F(u, X(u)) + V(u, X(u))F(u, X(u))\} e^{\int_s^u drV(r, X(r))} + \\ &\quad M_s^F(t)e^{\int_s^t drV(r, X(r))} - \int_s^t du M_s^F(u)V(u, X(u))e^{\int_s^u drV(r, X(r))} \end{aligned}$$

che ci permette di riscrivere il processo $M_s^{V,F}(t)$ definito in (B.9) nella forma

$$M_s^{V,F}(t) = M_s^F(t)e^{\int_s^t drV(r, X(r))} - \int_s^t du M_s^F(u)V(u, X(u))e^{\int_s^u drV(r, X(r))} \quad (\text{B.12})$$

Vogliamo verificare che tale relazione definisce una martingala (sfruttando il fatto che $M_s^F(t)$ è una martingala). È ovvio che $M_s^{V,F}(t)$ è \mathcal{F}_t -misurabile quindi, per definizione di martingala, dobbiamo solo verificare che:

$$E[M_s^{V,F}(t) | \mathcal{F}_u] = M_s^{V,F}(u), \quad \forall u \in [s, t]$$

Utilizzando la relazione (B.12) la tesi assume la forma

$$\begin{aligned} E \left[M_s^F(t) e^{\int_s^t dr V(r, X(r))} - \int_s^t dv M_s^F(v) V(v, X(v)) e^{\int_s^v dr V(r, X(r))} \middle| \mathcal{F}_u \right] = \\ = M_s^F(u) e^{\int_s^u dr V(r, X(r))} - \int_s^u dv M_s^F(v) V(v, X(v)) e^{\int_s^v dr V(r, X(r))} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Utilizziamo le proprietà dei valori aspettati condizionali ed il fatto che i processi

$$e^{\int_s^u dr V(r, X(r))} \quad \text{e} \quad \int_s^u dv M_s^F(v) V(v, X(v)) e^{\int_s^v dr V(r, X(r))}$$

sono \mathcal{F}_u -misurabili. La relazione (B.13) da verificare assume la forma equivalente:

$$E \left[M_s^F(t) e^{\int_u^t dr V(r, X(r))} - \int_u^t dv M_s^F(v) V(v, X(v)) e^{\int_u^v dr V(r, X(r))} \middle| \mathcal{F}_u \right] = M_s^F(u) \quad (\text{B.14})$$

Per il teorema fondamentale del calcolo possiamo riscrivere

$$e^{\int_u^t dr V(r, X(r))} = 1 + \int_u^t dv V(v, X(v)) e^{\int_u^v dr V(r, X(r))}$$

Con tale sostituzione la relazione (B.14) da verificare si riduce a:

$$E \left[\int_u^t dv (M_s^F(t) - M_s^F(v)) V(v, X(v)) e^{\int_u^v dr V(r, X(r))} \middle| \mathcal{F}_u \right] = 0$$

e ciò si deduce semplicemente sfruttando il fatto che $M_s^F(t)$ è una martingala per cui $E[M_s^F(t) | \mathcal{F}_v] - M_s^F(v) = 0$.

□

Una semplice conseguenza del lemma1 è la

Proposizione 15. *Siano $V : \mathbb{R}_+ \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ ed $F_0 : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ funzioni limitate e regolari e sia $F : [0, T] \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ la soluzione dell'equazione differenziale;*

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, \alpha) &= Lu(t, \alpha) + V(T - t, \alpha)u(t, \alpha) \\ u(0, \alpha) &= F_0(\alpha) \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Allora la soluzione F è tale che

$$F(T, \alpha) = E_\alpha \left[e^{\int_0^T ds V(s, X(s))} F_0(X(T)) \right] \quad (\text{B.16})$$

Tale relazione è nota come *formula di Feynman-Kac* (c'è un'evidente analogia con l'omonima formula che si introduce per processi stocastici continui). *Dim.* Applicando il lemma1 sulle funzioni $V(t, \alpha)$ e $F(T - t, \alpha)$ si conclude che

$$M(t) = F(T - t, X(t))e^{\int_0^t ds V(s, X(s))} + \\ - \int_0^t ds e^{\int_0^s dr V(r, X(r))} \{(\partial_s + L)F(T - s, X(s)) + V(s, X(s))F(T - s, X(s))\}$$

è una martingala. Poiché per ipotesi la funzione F è soluzione dell'equazione (B.15), il termine integrando è identicamente nullo. Ciò vuol dire che

$$M(t) = F(T - t, X(t))e^{\int_0^t ds V(s, X(s))}$$

La tesi segue immediatamente dalla proprietà delle martingale: $E[M(T)] = E[M(0)]$.

□

Consideriamo un processo di Markov omogeneo con probabilità di transizione $p(\alpha, \beta)$ e tassi di decadimento $\lambda(\alpha)$. Sappiamo che il generatore della dinamica è $L(\alpha, \beta) = \lambda(\alpha)[p(\alpha, \beta) - \delta_{\alpha, \beta}]$ ed il semigrupp delle probabilità di transizione è $P_t(\alpha, \beta) = (e^{Lt})(\alpha, \beta)$. Dato un campo $V : \mathbb{R}_+ \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ definiamo i nuovi operatori

$$S_t^V(\alpha, \beta) = L(\alpha, \beta) + V(t, \alpha)\partial_{\alpha, \beta} \quad (\text{B.17})$$

$$Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) = E \left[e^{\int_s^t V(r, X(r))dr} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(s) = \alpha \right] \quad (\text{B.18})$$

Tali operatori soddisfano proprietà simili a quelle di L e $\{P_t\}$. Ciò è descritto dal

Lemma 2. *Gli operatori $Q_{s,t}^V$ verificano la proprietà di semigrupp*

$$(Q_{s,u}^V \circ Q_{u,t}^V)(\alpha, \beta) = Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) \quad (\text{B.19})$$

Inoltre tra gli operatori $Q_{s,t}^V$ e S_t^V vale la relazione espressa dalle equazioni di Kolmogorov (non omogenee):

$$\partial_t Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) = (Q_{s,t}^V S_t^V)(\alpha, \beta) \quad (\text{B.20})$$

$$\partial_s Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) = -(L_s^V Q_{s,t}^V)(\alpha, \beta) \quad (\text{B.21})$$

$$Q_{s,s}^V = \delta_{\alpha, \beta}$$

Prima di dimostrare tali relazioni poniamo l'attenzione sul fatto che non è possibile considerare S_t^V come il generatore di un processo non omogeneo e $Q_{s,t}^V$ come il semigruppato associato. Infatti S_t^V non verifica le proprietà (1.9) di generatore poiché $\sum_{\beta} S_t^V(\alpha, \beta) \neq 0$, a meno che V non sia identicamente nullo. In conseguenza di ciò le funzioni $Q_{s,t}^V$ non sono correttamente normalizzate: $\sum_{\beta} Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) \neq 1$; pertanto non possono essere interpretate come probabilità di transizione.

Dim. Cominciamo col dimostrare la proprietà di semigruppato (B.19). Dalla definizione dell'operatore $Q_{s,t}^V$ risulta

$$\begin{aligned} (Q_{s,u}^V Q_{u,t}^V)(\alpha, \beta) &= \sum_{\gamma} E \left[e^{\int_s^u dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(u)=\gamma\}} \mid X(s) = \alpha \right] \times \\ &\quad \times E \left[e^{\int_u^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(u) = \gamma \right] = \\ &= E \left[e^{\int_s^u dr V(r, X(r))} \sum_{\gamma} E \left[e^{\int_u^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(u) = \gamma \right] \mathbb{1}_{\{X(u)=\gamma\}} \mid X(s) = \alpha \right] = \end{aligned}$$

per come è definito il valore aspettato condizionato da una variabile casuale

$$= E \left[e^{\int_s^u dr V(r, X(r))} E \left[e^{\int_u^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(u) \right] \mid X(s) = \alpha \right] =$$

poiché $e^{\int_s^u dr V(r, X(r))}$ è \mathcal{F}_u misurabile si può portare dentro al secondo valore aspettato condizionale

$$= E \left[e^{\int_s^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(s) = \alpha \right] = Q_{s,t}^V(\alpha, \beta)$$

che è proprio ciò che volevamo dimostrare.

Passiamo a dimostrare la prima equazione di Kolmogorov (B.20). Applichiamo il lemma 1 alle funzioni $V(t, \alpha)$ e $F(t, \gamma) = \delta_{\gamma, \beta}$. Risulta che

$$\begin{aligned} M_s(t) &= \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} e^{\int_s^t dr V(r, X(r))} + \\ &\quad - \int_s^t du e^{\int_s^u dr V(r, X(r))} [L(X(u), \beta) + V(u, X(u)) \mathbb{1}_{\{X(u)=\beta\}}] \end{aligned}$$

è una martingala. Per le proprietà delle martingale vale $E[M_s(t) \mid \mathcal{F}_s] = M_s(s)$ ovvero, utilizzando l'espressione esplicita

$$\begin{aligned} E \left[- \int_s^t du e^{\int_s^u dr V(r, X(r))} \{L(X(u), \beta) + V(u, X(u)) \mathbb{1}_{\{X(u)=\beta\}}\} + \right. \\ \left. + e^{\int_s^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(s) \right] = \mathbb{1}_{\{X(s)=\beta\}} \end{aligned}$$

Il primo termine del primo membro è proprio $Q_{s,t}^V(X(s), \beta)$. Derivando ambo i membri rispetto a t abbiamo

$$\partial_t Q_{s,t}^V(X(s), \beta) = E \left[e^{\int_s^t dr V(r, X(r))} \{L(X(t), \beta) + V(t, X(t)) \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}}\} \mid X(s) \right]$$

da cui si ottiene facilmente la relazione desiderata (B.20)

La seconda equazione di Kolmogorov (B.21) si ottiene con un calcolo diretto, scrivendo la derivata ∂_s come limite di rapporto incrementale.

$$(\partial_s Q_{s,t}^V) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} [Q_{s+\Delta,t}^V(\alpha, \beta) - Q_{s,t}^V(\alpha, \beta)] =$$

sfruttando la proprietà di semigruppato (B.19)

$$\begin{aligned} &= -\lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \left\{ \sum_{\gamma} E \left[e^{\int_s^{s+\Delta} dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(s+\Delta)=\gamma\}} \mid X(s) = \alpha \right] \times \right. \\ &\quad \times E \left[e^{\int_{s+\Delta}^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(s+\Delta) = \gamma \right] + \\ &\quad \left. - E \left[e^{\int_s^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(s+\Delta) = \gamma \right] \right\} \quad (\text{B.22}) \end{aligned}$$

Nella somma su γ separiamo il termine con $\gamma = \alpha$ da quello con $\gamma \neq \alpha$. Per $\gamma = \alpha$ possiamo approssimare

$$E \left[e^{\int_s^{s+\Delta} dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(s+\Delta)=\alpha\}} \mid X(s) = \alpha \right] \simeq 1 + [V(s, \alpha) - \lambda(\alpha)]\Delta + O(\Delta^2)$$

Per $\gamma \neq \alpha$ abbiamo invece

$$E \left[e^{\int_s^{s+\Delta} dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(s+\Delta)=\gamma\}} \mid X(s) = \alpha \right] \simeq \lambda(\alpha)p(\alpha, \gamma)\Delta + O(\Delta^2)$$

Sostituendo tali approssimazioni nella relazione (B.22) otteniamo

$$\begin{aligned} \partial_s Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) &= - \left\{ \sum_{\gamma} \lambda(\alpha)p(\alpha, \gamma) E \left[e^{\int_s^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(s) = \gamma \right] + \right. \\ &\quad \left. + (V(s, \alpha) - \lambda(\alpha)) E \left[e^{\int_s^t dr V(r, X(r))} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(s) = \alpha \right] \right\} = \\ &\quad - \sum_{\gamma} [L(\alpha, \gamma) + V(s, \alpha)] Q_{s,t}^V(\gamma, \beta) \end{aligned}$$

e questo conclude la dimostrazione. □

L'ultimo passo da fare prima di costruire una catena di Markov non omogenea consiste nel verificare il seguente

Lemma 3. *Sia $F : \mathbb{R}_+ \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ una funzione regolare e limitata. Allora il processo definito da:*

$$\tilde{M}^F(t) = \exp \left\{ F(t, X(t)) - F(0, X(0)) - \int_0^t ds e^{-F(s, X(s))} (\partial_s + L) e^{F(s, X(s))} \right\} \quad (\text{B.23})$$

è una martingala a media unitaria.

Dim. Per dimostrare che $\tilde{M}^F(t)$ è una martingala basta applicare il lemma1 alle funzioni

$$V(t, \alpha) = -e^{-F(t, \alpha)}(\partial_t + L)e^{F(t, \alpha)} \text{ e } G(t, \alpha) = \exp[F(t, \alpha) - F(0, X(0))]$$

con tale scelta abbiamo

$$\begin{aligned} M_0^{V, G}(t) &= G(t, X(t))e^{\int_0^t ds V(s, X(s))} - \int_0^t ds e^{\int_0^s dr V(r, X(r))} \{(\partial_s + L)G(s, X(s)) + \\ &+ V(s, X(s))G(s, X(s))\} \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Il primo termine del secondo mempro è proprio \tilde{M}^F :

$$\begin{aligned} G(t, X(t)) \exp\left\{\int_0^t ds V(s, X(s))\right\} &= \exp\{F(t, X(t)) - F(0, X(0)) + \\ &- \int_0^t ds e^{-F(s, X(s))}(\partial_s + L)e^{F(s, X(s))}\} = \tilde{M}^F(t) \end{aligned}$$

mentre l'ultimo termine della (B.24) è identicamente nullo

$$\begin{aligned} (\partial_s + L)G(s, X(s)) + V(s, X(s))G(s, X(s)) &= (\partial_s + L) \exp[F(s, X(s)) + \\ -F(0, X(0))] - [e^{-F(s, X(s))}(\partial_s + L)e^{F(s, X(s))}] \exp[F(t, \alpha) - F(0, X(0))] &= 0 \end{aligned}$$

Possiamo quindi concludere che $\tilde{M}^F(t)$ è una martingala. Il fatto che ha media unitaria segue da: $\tilde{M}^F(0) = 1$ *q.o.*

□

A questo punto abbiamo tutti gli elementi per costruire il processo non omogeneo. Dato lo stato iniziale π , il processo omogeneo è stato definito tramite la misura di probabilità P_π sullo spazio dei cammini $D([0, T] \times \mathcal{A})$ rispetto alla σ -algebra \mathcal{F}_T . Poichè la martingala $\tilde{M}^F(t)$ ha media unitaria ed è definita positiva, la possiamo prendere come derivata di Radom-Nikodim tra la probabilità P_π ed una nuova probabilità che indichiamo con P_π^F , rispetto alla filtrazione \mathcal{F}_t :

$$\tilde{M}^F(t) = \frac{dP_\pi^F}{dP_\pi} \Big|_{\mathcal{F}_t} \quad (\text{B.25})$$

o, equivalentemente:

$$E^F[G] = E[\tilde{M}^F(T)G]$$

per ogni funzione G su $D([0, T] \times \mathcal{A})$ misurabile rispetto ad \mathcal{F}_T .

Verifichiamo subito che vale la seguente relazione tra i valori aspettati condizionali

$$E^F[G \mid \mathcal{F}_s] = \frac{1}{\tilde{M}^F(s)} E[GM^F(T) \mid \mathcal{F}_s] \quad (\text{B.26})$$

Dim. Sia A un generico evento in \mathcal{F}_s . Dunque

$$E^F[\mathbb{1}_A E^F[G \mid \mathcal{F}_s]] = E^F[\mathbb{1}_A G] =$$

per come è definita la probabilità P^F

$$= E[\mathbb{1}_A G \tilde{M}^F(T)] =$$

sfruttando le proprietà dei valori aspettati condizionali ed il fatto che \tilde{M}^F è una martingala

$$\begin{aligned} &= E[\mathbb{1}_A \frac{1}{\tilde{M}^F(s)} E[\tilde{M}^F(T)] E[G \tilde{M}^F(T) \mid \mathcal{F}_s]] = \\ &= E[\mathbb{1}_A \frac{1}{\tilde{M}^F(s)} \tilde{M}^F(T) E[G \tilde{M}^F(T) \mid \mathcal{F}_s]] = \\ &= E^F[\mathbb{1}_A \frac{1}{\tilde{M}^F(s)} E[G \tilde{M}^F(T) \mid \mathcal{F}_s]] \end{aligned}$$

da cui abbiamo la tesi (B.26). □

Cerchiamo le probabilità di transizione $\{P_{s,t}^F\}$ del processo non omogeneo definito dalla probabilità P_π^F . Vogliamo verificare che formano un semigruppoo e soddisfano le equazioni di Kolmogorov non omogenee rispetto ad un generatore L_t^F ad esse associato.

La probabilità di transizione dalla configurazione α all'istante s nella configurazione β all'istante t è chiaramente

$$P_{s,t}^F(\alpha, \beta) = P_\pi^F[X(t) = \beta \mid X(s) = \alpha]$$

Cerchiamone l'espressione esplicita

$$\begin{aligned} P_{s,t}^F(\alpha, \beta) \mathbb{1}_{\{X(s)=\alpha\}} &= P_\pi^F[X(t) = \beta \mid X(s) = \alpha] \mathbb{1}_{\{X(s)=\alpha\}} = \\ &= P_\pi^F[X(t) = \beta \mid \mathcal{F}_s] \mathbb{1}_{\{X(s)=\alpha\}} = \end{aligned}$$

sfruttiamo la relazione (B.26) appena dimostrata

$$= \frac{1}{\tilde{M}^F(s)} E[\tilde{M}^F(t) \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid \mathcal{F}_s] \mathbb{1}_{\{X(s)=\alpha\}} =$$

sostituendo l'espressione esplicita (B.23) della martingala $\tilde{M}^F(t)$

$$= \exp[F(t, \beta) - F(t, \alpha)] E[\exp\{\int_s^t V(r, X(r)) dr\} \mathbb{1}_{\{X(t)=\beta\}} \mid X(s) = \alpha] \mathbb{1}_{\{X(s)=\alpha\}}$$

avendo indicato con V la funzione utilizzata nella dimostrazione del lemma3

$$V(t, \alpha) = -e^{-F(t, \alpha)}(\partial_t + L)e^{F(t, \alpha)}$$

A questo punto basta ricordare come è stato definito il semigruppoo $Q_{s,t}^V$ (cf. (B.18)) per ottenere:

$$P_{s,t}^F(\alpha, \beta) = \exp[F(t, \beta) - F(t, \alpha)]Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) \quad (\text{B.27})$$

Chiaramente l'operatore $P_{s,t}^F$ verifica la condizione di normalizzazione

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}} P_{s,t}^F(\alpha, \beta) = 1$$

proprio per come è stato definito. Inoltre dalla relazione (B.27) e sfruttando il fatto che $Q_{s,t}^V$ è un semigruppoo (cf. (B.19)) abbiamo che anche $P_{s,t}^F$ verifica la proprietà di semigruppoo:

$$(P_{s,u}^F \circ P_{u,t}^F)(\alpha, \beta) = P_{s,t}^F(\alpha, \beta) \quad (\text{B.28})$$

Ci resta da trovare il generatore associato a tale semigruppoo. A tale scopo studiamo le derivate temporali $\partial_t P_{s,t}^F(\alpha, \beta)$ e $\partial_s P_{s,t}^F(\alpha, \beta)$ sperando che valgano equazioni di kolmogorov analoghe alle (B.20) e (B.21)

$$\begin{aligned} \partial_t P_{s,t}^F(\alpha, \beta) &= \partial_t \{ \exp[F(t, \beta) - F(t, \alpha)] Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) \} = \\ &= \exp[F(t, \beta) - F(s, \alpha)] \{ \partial_t F(t, \beta) Q_{s,t}^V(\alpha, \beta) + (\partial_t Q_{s,t}^V)(\alpha, \beta) \} = \end{aligned}$$

$Q_{s,t}^V$ verifica l'equazione di Kolmogorov (B.20) con generatore $S_t^V(\alpha, \beta)$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\gamma} \exp[F(t, \beta) - F(s, \alpha)] \{ \partial_t F(t, \gamma) Q_{s,t}^V(\alpha, \gamma) + Q_{s,t}^V(\alpha, \gamma) S_t^V(\gamma, \beta) \} = \\ &\quad \sum_{\gamma} P_{s,t}^V(\alpha, \gamma) \{ [\partial_t F(t, \gamma) + V(t, \gamma)] \delta_{\gamma, \beta} + \exp[F(t, \beta) - F(t, \gamma)] L(\gamma, \beta) \} \end{aligned}$$

Dunque abbiamo verificato la validità della prima equazione di Kolmogorov

$$\partial_t P_{s,t}^F(\alpha, \beta) = (P_{s,t}^F L_t^F)(\alpha, \beta) \quad (\text{B.29})$$

con generatore

$$L_t^F(\alpha, \beta) = \exp[F(t, \beta) - F(t, \alpha)] L(\alpha, \beta) - e^{-F(t, \alpha)} L e^{F(t, \alpha)} \delta_{\alpha, \beta} \quad (\text{B.30})$$

Analogamente si verifica che vale anche la seconda equazione di Kolmogorov

$$\partial_s P_{s,t}^F(\alpha, \beta) = -(L_s^F P_{s,t}^F)(\alpha, \beta) \quad (\text{B.31})$$

L'azione del generatore come operatore su $L_2(\pi)$ è:

$$(L_t^F f)(\alpha) = \sum_{\beta} e^{F(t,\beta) - F(t,\alpha)} \lambda(\alpha) p(\alpha, \beta) [f(\beta) - f(\alpha)] \quad (\text{B.32})$$

Tale espressione ci permette di dare un'interpretazione fisica di L_t^F come generatore associato al processo con campo esterno $F(t, \alpha)$. Infatti i tassi di transizione $\lambda(\alpha) p(\alpha, \beta)$ del processo omogeneo sono modificati dai fattori $\exp[F(t, \beta) - F(t, \alpha)]$ che spingono il sistema verso le configurazioni con più alti valori di F ; cioè il sistema è spinto in direzione di $\vec{\nabla} F$.

Bibliografia

- [1] C. Kipnis e C. Landim, *Hydrodynamic limit of interacting particle systems* (1998) da pubblicare da Springer Verlag, Berlino.
- [2] F. Spitzer, *Interaction of Markov processes* Adv. Math 5 (1970) 246
- [3] F. Spitzer, *Random fields and interacting particle systems* Mathematical associations of America (1971)
- [4] T. M. Liggett, *Interacting Particle Systems* Springer Verlag NY (1985)
- [5] A. De Masi, N. Ianiro, A. Pellegrinotti e E. Presutti, *A survey of the Hydrodynamical Behavior of Many Particle Systems*. In *Nonequilibrium phenomena II: from stochasticity to hydrodynamics*, volume 11 (1984) pag123-294 degli *Studies in Statistical Mechanics*, J. Lebowitz e E. W. Montroll editori, North Holland, Amsterdam.
- [6] A. N. Shiryaev, *Probability*, Springer Verlag NY (1980)
- [7] L. Onsager, *Reciprocal relations in irreversible processes I* Phys. Rev 37 (1931) 405
- [8] L. Onsager, *Reciprocal relations in irreversible processes II* Phys. Rev 38 (1931) 2265
- [9] L. Onsager e S. Machlup, *Fluctuations in irreversible processes* Phys. Rev. 91 (1953) 1512
- [10] S. R. De Groot, *Thermodynamics of irreversible processes* North-Holland publishing company. Amsterdam (1951)
- [11] S. R. De Groot e P. Mazur, *Non-equilibrium thermodynamics* North-Holland publishing company. Amsterdam (1961)

- [12] D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, C. Landim e M. E. Vares, *Microscopic reversibility and thermodynamics fluctuations*. In *Boltzmann's Legacy 150 Years After His Birth*, C. Cercignani, G. Jona-Lasinio, G. Parisi e L. A. Radicati editori, volume 131 (1997) degli *Atti dei convegni Lincei*, pag 79-88, Accademia Nazionale dei Lincei, Roma
- [13] D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio e C. Landim, *Onsager Reciprocity Relations without Microscopic Reversibility*, *Phys. Rev. Letters* 77 (1996) 1202
- [14] D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio e C. Landim, *Onsager symmetry from microscopic TP invariance* (1998) da pubblicare
- [15] A. De Masi e P. A. Ferrari, *A remark on the Hydrodynamics of the Zero-Range Process*, *Journ. of Stat. Phys.* 36 (1984) 81-87
- [16] C. Landim, M. Mourragui e S. Sellami, *Hydrodynamic limit for a non gradient interacting particle system with stochastic reservoirs* (1998) da pubblicare
- [17] G. L. Eyink, J. L. Lebowitz e H. Spohn, *Hydrodynamics of stationary non-equilibrium states for some stochastic lattice gas models* *Mathematical Physics*, Springer-Verlag 132 (1990) 253-283
- [18] G. L. Eyink, J. L. Lebowitz e H. Spohn, *Lattice gas models in contact with stochastic reservoirs: local equilibrium and relaxation to the steady state* *Mathematical Physics*, Springer-Verlag 140 (1991) 119-131
- [19] G. L. Eyink, J. L. Lebowitz e H. Spohn, *Hydrodynamics and fluctuations outside of local equilibrium: driven diffusive systems*, *Journ. of Stat. Phys.* 83 (1996) 385-472