

Università degli Studi di Catania Corso di Laurea Magistrale in Matematica LM-40

Equazioni differenziali della Fisica Matematica

Prof. Orazio Muscato Dipartimento di Matematica e Informatica

12 dicembre 2023

A cura di A. Ferro

Indice

1	Modelli Matematici 1.1 Introduzione	3 . 3
2	Equazioni alle derivate parziali	3
3	Problemi ben posti	6
4	Leggi di conservazione scalari ed equazioni del primo ordin	e 7
	 4.1 Leggi di conservazione	. 7
	stiche)	. 10 . 13
5	Equazione semi-lineari del II ordine in due variabili	16
	5.1 Caso non parabolico	. 17
	5.2 caso parabolico	. 19
	5.3 Teorema di esistenza	. 19
6	Diffusione	21
	6.1 L'equazione di diffusione	. 21
	6.2 La conduzione del calore	. 21
	6.3 Problemi ben posti $(n = 1)$. 24
	6.4 Cenni sulla serie di Fourier	. 26
	6.5 Serie di Fourier e analisi armonica di un segnale periodico .	. 27
	6.6 Il metodo di separazione delle variabili	. 30
	del calore	. 35
	6.8 Il metodo dell'energia ed unicita'	. 38
	6.9 Il problema di Cauchy per l'equazione del calore	. 41
	6.10 Paradosso della velocita'	. 43
	6.11 Diffusione e probabilita': la passeggiata aleatoria	. 44
	6.12 La probabilita' di transizione limite	. 46
7	Equazione della corda vibrante	49
	7.1 Conservazione dell'energia	51
8	L'equazione delle onde unidimensionali	52
	8.1 Condizioni iniziali e al bordo	52
	8.2 Metodo di separazione delle variabili: il problema di Cauchy-	
	Dirichelet	53
	8.2.1 Esistenza della soluzione	53
	8.2.2 Unicita'	. 55

	8.3	La formula di d'Alembert	56
9	L'ec	quazione di Laplace	59
	9.1	Formule di integrazione per parti	60
	9.2	Problemi ai valori al contorno per le equazioni di Laplace e di	
		Poisson	61
	9.3	La funzione di Green per il problema di Dirichlet	62
	9.4	Unicita' del problema interno di Neumann	64
	9.5	Unicita' del problema esterno per l'equazione di Laplace	64
	9.6	Cenni sull'equazione di Poisson	65
10	L'ec	quazione di Boltzmann	66
	10.1	Elementi di teoria cinetica dei gas	66
	10.2	Probabilita' e certezze	66
	10.3	Spazio delle fasi ed equazione di Liouville	68
	10.4	La gerarchia di BBGKY	72
	10.5	L'equazione di Boltzmann	78
	10.6	Libero cammino medio di un sistema di sfere rigide	80
	10.7	Ancora sul limite di Grad	81
	10.8	Collisioni binarie elastiche	82
	10.9	Teoria cinetica dei gas perfetti	86
	10.1	0Invarianti collisionali	90
	10.1	1La distribuzione di Maxwell	93
	10.12	2Critiche all'equazione di Boltzmann	98
		10.12.1 Paradosso della ricorrenza	98
		10.12.2 Paradosso della reversibilita'	99
	10.1	3I momenti dell'equazione di Boltzmann	100
	10.1	4Le equazioni di Eulero	105
	10.1	5Le equazioni di Navier-Stokes-Fourier	106
	10.1	6Il modello BGK (Bhatnagar-Gross-Krook)	107
		$10.16.1$ Caso omogeneo \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	109
		$10.16.2$ Altri modelli BGK $\dots \dots \dots$	111
		10.16.3 Le equazioni di Navier Stokes	111
\mathbf{A}	App	oendice: il modello di Ehrenfest	114
	A.1	il tempo di ritorno	115
	A.2	Approssimazione legge binomiale	116
В	For	mula di calcolo per integrali tripli	117

1 Modelli Matematici

1.1 Introduzione

Nella descrizione di una gran parte di fenomeni nelle scienze applicate e in molteplici aspetti dell'attivita' tecnica e industriale si fa uso di **modelli matematici**.

Per **modello** intendiamo un insieme di equazioni e/o relazioni matematiche in grado di catturare le caratteristiche della situazione in esame e poi di descriverne, prevederne e controllarne lo sviluppo. La modellizzazione matematica seguita dall'analisi e dalla simulazione numerica e poi dal confronto sperimentale e' diventata una procedura diffusa (si evita, in questo modo, di costruire prototipi in laboratorio), essa prende il nome di **simulazione**.

Un modello matematico e' in generale costruito a partire da **leggi generali** (sistema di equazioni a derivate parziali e non, per esempio il covid) e da **relazioni costituitive** (di natura sperimentale, dipendono dalle caratteristiche del fenomeno in esame, per esempio, il tipo di materiale usato). Il risultato della combinazione dei due mattoni e' di solito un' **equazione** o **un sistema di equazioni a derivate parziali**.

2 Equazioni alle derivate parziali

Un'equazione a derivate parziali e' un'equazione del tipo

 $F(x_1, \dots, x_n, u, u_{x_1}, \dots, u_{x_n}, u_{x_1x_1}, u_{x_1x_2}, \dots, u_{x_nx_n}, u_{x_1x_1x_1}, \dots) = 0 \quad (1)$

dove $u = u(x_1, \ldots, x_n)$ e' una funzione di *n* variabili, per noi quasi sempre reali¹.

L'ordine dell'equazione e' il massimo ordine di derivazione che vi appare.

Il **problema** che pone la (1) e' quello di trovare tutte le funzioni $u(x_1, \ldots, x_n)$ definite in $A \subseteq \mathbb{R}^n$ tali che siano derivabili parzialmente rispetto a (x_1, \ldots, x_n) e che soddisfino la (1).

Una distinzione importante e' fra equazioni lineari e non lineari.

L'eq. (1) si dice **lineare** se F e' lineare rispetto ad u e a tutte le sue derivate, altrimenti e' **non-lineare**.

Tra i tipi di non-linearita' distinguiamo:

- Equazioni **semi-lineari**, se *F* e' non lineare solo rispetto ad *u* ma e' lineare rispetto a tutte le sue derivate, con coefficienti dipendenti solo da **x**;
- Equazioni quasi-lineari, se F e' lineare rispetto alle derivate di u di ordine massimo, con coefficienti dipendenti solo da \mathbf{x} , u e dalle derivate di ordine inferiore;

¹L'incognita compare sotto forma delle sue derivate parziali $u_{x_i} = \frac{\partial u}{\partial x_i}, F(\cdot) = 0$ e'un'equazione implicita

• Equazioni completamente non lineari, se *F* e' non-lineare rispetto alle derivate di *u* di ordine massimo.

Negli esempi, **x** rappresenta una variabile spaziale (di solito di dimensione n = 1, 2, 3) e t una variabile temporale. Incominciamo con **equazioni lineari**.

1. Equazione del trasporto (prim'ordine): $u = u(\mathbf{x}, t), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}$,

$$u_t + \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla u = 0,$$

Descrive, per esempio, il trasporto di un inquinante (solido) lungo un canale; qui u e' la concentrazione della sostanza e **v** e' la velocita' della corrente.

(Ricorda: il gradiente ∇ e' un operatore che, data una funzione scalare, mi restituisce un vettore (p.es la pressione).

2. Equazione di diffusione o del calore (second'ordine): $u = u(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}$,

$$u_t - D\Delta u = 0,$$

dove $\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \dots, \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}\right)$ e' l'*operatore di Laplace o laplaciano, u* e' la temperatura o la concentrazione e *D* codifica le proprieta' termiche del materiale.

Descrive, per esempio, la propagazione del calore per diffusione attraverso un mezzo omogeneo ed isotropo.

3. Equazione delle onde (second'ordine): $u = u(\mathbf{x}, t), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}$,

$$u_{tt} - c^2 \Delta u = 0,$$

Descrive la propagazione di onde trasversali di piccola ampiezza in una corda (es. violino) se n = 1, in una membrana elastica (es. tamburo) se n = 2; se n = 3 descrive onde sonore o anche onde elettromagnetiche nel vuoto. Qui u e' legata all'ampiezza delle vibrazioni e c e' la velocita' di propagazione.

4. Equazione del potenziale o di Laplace (second'ordine): $u = u(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,

$$\Delta u = 0,$$

Le equazioni di diffusione e delle onde descrivono fenomeni in evoluzione col tempo; l'equazione di Laplace descrive lo *stato stazionario o a regime* corrispondente, in cui la soluzione non dipende piu' dal tempo. Insieme alla sua versione non omogenea,

$$\Delta u = f,$$

che si chiama **Equazione di Poisson**, e' importante anche in problemi di elettrostatica.

5. Equazione di Black-Scholes (second'ordine): $u = u(x,t), x \ge 0, t \ge 0,$

$$u_t + \frac{1}{2}\sigma^2 x^2 u_{xx} + rxu_x - ru = 0,$$

Fondamentale in finanza matematica, descrive l'evoluzione del prezzo u di un prodotto finanziario derivato (un'*operazione europea*, per esempio), basato su un bene sottostante (un'azione, una valuta, ecc.) il cui prezzo e' x.

6. Equazione di Schrödinger (second'ordine): $u = u(\mathbf{x}, t), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ $(n = 1, 2, 3), t \ge 0, i$ unita' complessa,

$$-iu_t = \Delta u + V(\mathbf{x})u$$

Interviene in meccanica quantistica e descrive l'evoluzione di una particella soggetta al potenziale V. La funzione $\psi = |u|^2$ ha il significato di *densita' di probabilita'*.

Vediamo ora qualche esempio di **sistemi**:

7. Equazioni di Maxwell nel vuoto (sei equazioni lineari scalari del prim'ordine):

$$\mathbf{E}_{t} - rot\mathbf{B} = 0 \quad \text{Legge di Ampère}$$
$$\mathbf{B}_{t} + rot\mathbf{E} = 0 \quad \text{Legge di Faraday} \tag{2}$$
$$div\mathbf{E} = 0 \quad , \quad div\mathbf{B} = 0 \quad \text{Leggi di Gauss}$$

dove \mathbf{E} e' il campo elettrico e \mathbf{B} e' l'induzione magnetica. Le unita' di misura sono quelle naturali dove la velocita' della luce nel vuoto e' c = 1 e la permeabilita' magnetica nel vuoto e' $\mu_0 = 1$.

8. Equazioni di Navier Stockes: $\mathbf{u} = (u_1(\mathbf{x}, t), u_2(\mathbf{x}, t), u_3(\mathbf{x}, t)), p = p(\mathbf{x}, t), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R},$

$$\begin{cases} \mathbf{u}_t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\Delta \mathbf{u}, \\ div\mathbf{u} = 0 \end{cases}$$

questo sistema e' costituito da quattro equazioni, di cui le prime tre quasi-lineari. Descrive il moto di un fluido viscoso, omogeneo e incomprimibile. Qui **u** e' la velocita' del fluido, p la pressione, ρ la densita' (qui costante) e ν e' la viscosita' cinematica, data dal rapporto tra la viscosita' del fluido e la sua densita'.

3 Problemi ben posti

Nella costruzione di un modello, oltre le equazioni intervengono altre informazioni, necessarie per selezionare o predire l'esistenza di una sola soluzione quali le **condizioni iniziali e/o condizioni al bordo** del dominio in esame etc. Tipiche condizioni al bordo prevedeono di assegnare la soluzione o la duaderivata normale. L'analisi teorica del problema si occupa allora di stabilire condizioni sui dati affinche' il problema abbia le seguenti caratteristiche:

- 1. esista almeno una soluzione;
- 2. esista una sola soluzione;
- 3. la soluzione dipende con continuita' dai dati.

In sintesi, la 3. afferma che la corrispondenza

 $dati \rightarrow solutione$

sia continua ossia che un piccolo errore sui dati provochi un piccolo errore sulla soluzione.

Si tratta di una proprieta' chiamata **stabilita' locale della soluzione rispetto ai dati**; pensiamo solo al caso in cui occorra usare un computer per il calcolo della soluzione; automaticamente, l'inserimento dei dati e le procedure di calcolo comportano errori di approssimazione di vario tipo (ad esempio, il troncamento o l'arrotondamento).

Quando un problema possiede le caratteristiche 1., 2., 3. si dice che e' **ben posto** (secondo *Hadamard*). Per chi costruisce modelli matematici e' molto comodo avere a che fare con problemi ben posti: l'esistenza di una soluzione segnala che il modello "sta in piedi", nel senso che ha le potenzialita' per rappresentare un fenomeno osservabile, l'unicita' e la stabilita' aumentano la possibilita' di calcoli numerici accurati. I problemi ben posti sono interessanti per le applicazioni.

Ogni modello matematico restituisce una grandezza fisica che e' da una parte la soluzione dell'equazione costituente il modello, dall'altra la predizione. Concettualmente, mentre il problema diretto si occupa di prevedere gli effetti di un fenomeno conoscendone la causa, il problema inverso sorge quando si vuole scoprire la causa degli effetti osservati. Il problema diretto consiste nel calcolare l'output, dato l'input e il system (nucleo dell'operatore differenziale). Il problema inverso, invece, consiste nel determinare l'input assegnati output e system.

Tuttavia, mentre la difficoltà nei problemi diretti e' avere un system tanto più fedele alla realtà, i problemi inversi sono intrinsecamente mal posti per mancanza di unicita' oppure per mancanza di stabilita', ma di grande importanza per la tecnologia moderna, come per es. il modello matematico che sta alla base della T.A.C. (*Tomografia Assiale Computazionale*).

Leggi di conservazione scalari ed equazioni del 4 primo ordine

Leggi di conservazione 4.1

Consideriamo le equazioni a derivate parziali del prim'ordine quasi lineare del tipo

$$o_t + q(\rho)_x = 0, \ x \in \mathbb{R}, t > 0.$$
 (3)

In generale, $\rho = \rho(x,t)$, $\left(\left[\frac{M}{L}\right],\right)$ rappresenta la densita' o la concentrazione di una quantita' fisica come per esempio la massa per unita' di lunghezza e $q(\rho)$, $\left(\left\lceil \frac{M}{T}\right\rceil\right)$, e' la sua funzione flusso per unita' di tempo, che descrive il flusso entrante o uscente dalla frontiera. Appare in molti fenomeni di fluidodinamica unidimensionali e spesso sta alla base della formazione e propagazione delle cosiddette onde d'urto (shock waves).

L'eq. (3) costituisce una relazione tra densita' e flusso e prende il nome di legge di conservazione, per il seguente motivo.

Consideriamo un intervallo arbitrario $[x_1, x_2]$, l'integrale

$$m(t) = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx$$
 (4)

che rappresenta la quantita' presente tra $x_1 \in x_2$ al tempo t, cioe', la massa presente in $[x_1, x_2]$ al tempo t. Una legge di conservazione esprime il fatto che, in assenza di sorgenti esterne (ossia senza aggiunta o sottrazione di massa), il tasso di variazione della massa all'interno dell'intervallo di $[x_1, x_2]$ e' determinato dal flusso netto attraverso gli estremi dell'intervallo. Se il flusso e' modellato da una funzione $q = q(\rho)$, la legge di conservazione si esprime mediante l'equazione

$$\frac{d}{dt}\int_{x_1}^{x_2}\rho(x,t)dx = -q(\rho(x_2,t)) + q(\rho(x_1,t))$$
(5)

dove assumiamo che q > 0 (q < 0) se il flusso e' entrante (uscente) in $[x_1, x_2]$, vedi figura 1.

Il primo membro esprime $\frac{massa}{\Delta t}$ in $[x_1, x_2]$, cioe', $\frac{dm}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx$, che esprime la variazione della massa all'istante di tempo t, la massa varia perche' per il principio di conservazione varia il flusso. Il secondo membro esprime $\frac{massa}{\Delta t}$ sulla frontiera di $[x_1, x_2]$. Se $q, \rho \in \mathbb{C}^1$, allora per il *Teorema della media integrale*, $\exists c \in]x_1, x_2[$ tale che

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho(x,t) dx = (x_2 - x_1)\rho(c,t)$$
(6)

Dalle (5), (6) si ottiene:

$$\frac{x_2 - x_1}{x_1 - x_2} \frac{d}{dt} \rho(c, t) = \frac{q(\rho(x_1, t)) - q(\rho(x_2, t))}{x_1 - x_2}$$
(7)



Figura 1: sistema di flusso

Calcoliamo il limite per $x_1 \rightarrow x_2$, si ha:

$$-\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial x} \tag{8}$$

Da cui, si ricava la Legge di conservazione della massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \tag{9}$$

che e' un'equazione differenziale con una sola incognita, ρ (densita').

La variabile q dipende dal tipo di materiale utilizzato e per determinarla occorre imporre le condizioni iniziali per t = 0, $\rho(x, 0) = g(x)$.

Il problema cosi' definito e' noto come problema ai valori iniziali:

$$\begin{cases} \rho_t + q(\rho)_x = 0\\ \rho(x, 0) = g(x) \end{cases}$$
(10)

dove $x \in \mathbb{R}$.

4.2 Inquinante in un canale

Applichiamo il modello precedente al caso di una sostanza inquinante (acqua) lungo un canale con corrente che si muove con velocita' v costante, lungo la direzione positiva dell'asse x. Implicitamente stiamo trascurando la profondita' (pensando che l'inquinante galleggi) e la dimensione trasversale del canale (pensando ad un canale molto stretto) (caso 1D).

Vogliamo derivare un modello matematico, capace di descrivere l'evoluzione della concentrazione c = c(x, t) della sostanza. Le dimensioni fisiche di c sono massa \times lunghezza⁻¹ per cui c(x, t)dx rappresenta la massa di inquinante presente al tempo t nell'intervallo [x, x + dx] (di lunghezza infinitesima). Vedi figura 2.

In assenza di sorgenti esogene (cioe' di aggiunta o sottrazione di massa) vige il principio di **conservazione della massa**: il tasso di variazione della massa contenuta in un intervallo [x, x + dx] uguaglia il flusso netto di massa



Figura 2: trasporto di inquinante

attraverso gli estremi.

L'equazione di conservazione precedente ci dara'

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \tag{11}$$

Dobbiamo stabilire una legge costitutiva per q = q(c). Vi sono varie possibilita', tra cui:

• Convenzione o trasporto. Il flusso e' determinato solo dalla corrente d'acqua, come se l'inquinante formasse una macchia che viene trasportata dal fluido, senza deformarsi o espandersi. In tal caso e' ragionevole supporre che

$$q(x,t) = vc(x,t) \tag{12}$$

dove, ricordiamo che v indica la velocita' (costante) della corrente.

• *Diffusione*. Il flusso e' direttamente proporzionale e di segno opposto al gradiente di concentrazione (*Legge di Fick*):

$$q(x,t) = -Dc_x(x,t) \tag{13}$$

dove D e' il *coefficiente di diffusione* (costante) che dipende dalla sostanza ed ha le solite dimensioni $lunghezza^2 \times tempo^{-1}$. L'inquinante si espande in zone da alta a bassa concentrazione, da cui il segno meno nell'espressione di q.

• Trasporto e diffusione. In tal caso sovrapponiamo i due effetti scrivendo

$$q(x,t) = vc(x,t) - Dc_x(x,t)$$
(14)

da cui deduciamo

$$c_t = Dc_{xx} - vc_x \tag{15}$$

 $\operatorname{con} D \in v$ costanti.



Figura 3: Caratteristica per il problema di trasporto lineare

4.2.1 Caso lineare con convenzione (metodo delle caratteristiche)

Dalle eq.(11) e(12) definiamo il problema di Cauchy ai valori iniziali

$$\begin{cases} c_t + vc_x = 0\\ c(x,0) = g(x), \forall x \in \mathbb{R} \end{cases}$$
(16)

Risolviamo il sistema con il **metodo delle caratteristiche**. Sia Γ una curva di equazione x = x(t) tale che $\frac{dx}{dt} = v$, in tal caso l'eq.(16) diventa

$$c_t + \frac{dx}{dt}c_x = 0 \tag{17}$$

allora $\frac{dc}{dt} = 0$, cioe' c e' costante lungo Γ . Ma poiche' v e' costante, le curve Γ sono delle rette parallele a v

$$\frac{dx}{dt} = v = costante \tag{18}$$

da cui

$$x = x_0 + vt$$

dove $x_0 = x(t = 0)$. Tali rette si chiamano **caratteristiche**. Vedi figura 3. Studiamo, adesso, l'evoluzione della concentrazione *c* conoscendone il profilo iniziale

$$c(x,0) = g(x) \tag{19}$$

Il calcolo della soluzione del sistema (16) in un punto generico $(\overline{x}, \overline{t}), \overline{t} > 0$, e' molto semplice.

Sia $x = vt + x_0$ l'equazione della caratteristica che passa per $(\overline{x}, \overline{t})$. Retrocediamo lungo tale retta dal punto $(\overline{x}, \overline{t})$ fino al punto $(x_0, 0)$ nel quale essa interseca l'asse x. Poiche' c e' costante lungo la caratteristica e $x_0 = \overline{x} - v\overline{t}$, deve essere

$$c(\overline{x},\overline{t}) = g(x_0) = g(\overline{x} - v\overline{t})$$

Pertanto, se $g \in \mathbb{C}^1$, la soluzione del Problema di Cauchy (16) e'

$$c(x,t) = g(x - vt) \tag{20}$$



Figura 4: Onda progressiva



Figura 5: Rappresentazione onda progressiva sul piano

La (20) rappresenta un'onda progressiva che si muove con velocita' v, nella direzione positiva dell'asse x.

Esempio 1. Consideriamo un profilo iniziale di concentrazione

$$g(x) = \sin(\pi x) \chi_{[0,1]}(x)$$

dove χ e' la funzione indicatrice

$$\chi_{[0,1]}(x) = \begin{cases} 1 \ se \ x \in [0,1] \\ 0 \ altrimenti \end{cases}$$

che viene trasportato nel piano x, t, lungo le rette x = t + costante, cioe' con velocita' unitaria v = 1, nella direzione positiva dell'asse x. Al tempo t = 0 e t = 1 le soluzioni sono c(x, 0) = g(x) e c(x, 1) = g(x - 1), rispettivamente. Vedi in figure 5 e 4.

Ma cosa succederebbe al sistema (16) se x varia in un intervallo semiinfinito?

$$\begin{cases} c_t + vc_x = 0\\ c(x,0) = g(x), \forall x \in [0, +\infty[\end{cases}$$

$$(21)$$

in questo caso il problema e' un problema nel primo quadrante x > 0, t > 0. Per essere il problema ben posto, oltre al dato iniziale (per t = 0), occorre



Figura 6: Le frecce indicano dove vanno assegnati i dati

aggiungere opportune condizioni al bordo, cioe' $c(x = 0, t) = f(t), \forall t > 0$, in questo modo la soluzione e' univocamente determinata.

Se v > 0, all'aumentare del tempo, tutte le caratteristiche che escono dal bordo trasportano le informazioni (i dati) verso l'interno del quadrante x > 0, t > 0. Si dice che le caratteristiche sono **inflow** rispetto al quadrante.

Le caratteristiche uscenti dal bordo **entrano nel dominio** ed occorre **assegnare i dati su entrambi i semiassi**.

Se v < 0, le caratteristiche che partono dall'asse x entrano nel dominio (inflow characteristics) mentre quelle che partono dall'asse t escono dal dominio (outflow characteristics). In questo caso i dati iniziali sono sufficienti a determinare il valore della soluzione mentre non deve essere assegnato il valore su x = 0, t > 0.

Se ora abbiamo un problema nella striscia $x \in [0, R], t > 0$,

$$\begin{cases} c_t + vc_x = 0\\ c(x,0) = g(x), \forall x \in [0,R], t > 0 \end{cases}$$
(22)

oltre alla condizione iniziale occorre assegnare i dati

$$\begin{cases} c(0,t) = f(t), \forall t > 0 \ se \ v > 0 \\ c(R,t) = f(t), \forall t > 0 \ se \ v < 0 \end{cases}$$

Il problema risulta ben posto, in quanto la soluzione e' determinata univocamente in ogni punto della striscia dai valori lungo le caratteristiche. Si prova anche la stabilita' della soluzione (vedi [5] pag. 186).



Figura 7: Curva caratteristica

4.3 Il caso non lineare

Torniamo al caso generale (10). Per calcolare la densita' ρ nel punto (x, t) proviamo ad utilizzare l'idea che ha funzionato nel caso lineare omogeneo: connettere il punto (x, t) con un punto $(x_0, 0)$ sull'asse x, portante il dato iniziale, mediante una curva lungo la quale ρ sia costante. Una curva di questo tipo prende ancora il nome di **caratteristica**, uscente da $(x_0, 0)$ (vedi figura 7). Posto $q = Q(\rho)$, si ha

$$\frac{\partial q}{\partial x} = \frac{dQ}{d\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} = c(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad , \quad c(\rho) = \frac{dQ}{d\rho} \tag{23}$$

allora il problema ai valori iniziali diventa

$$\begin{cases} \rho_t + c(\rho)\rho_x = 0\\ \rho(x,0) = g(x) \end{cases}$$
(24)

che in generale e' un'equazione non lineare, ma quasi-lineare in quanto lineare rispetto alle derivate di ordine massimo. Introduciamo le caratteristiche

$$\frac{dx}{dt} = c(\rho) \tag{25}$$

e calcoliamo la derivata totale di $\rho(x(t), t)$ lungo le caratteristiche

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho_t + \frac{dx}{dt}\rho_x = \rho_t + c(\rho)\rho_x = 0$$

da cui $\rho = costante$ lungo le curve caratteristiche. Se adesso integriamo la (25) con la condizione iniziale $x(0) = x_0$, essendo ρ costante lungo le caratteristiche si ottiene

$$x = x_0 + c(\rho) t \tag{26}$$

che e' ancora l'equazione di una retta con coefficiente angolare $c(\rho)$ (nel caso lineare con convenzione le rette hanno tutte coefficiente angolare costante). La soluzione generale della (24) dipende dalla costruzione delle linee rette nel piano (x, t), ogni retta con pendenza $c(\rho)$ corrispondente al valore ρ su



Figura 8: Intersezione di caratteristiche

di essa. Con riferimento alla figura (7), preso un punto (x,t), tracciamo la caratteristica (in questo caso una retta) che interseca l'asse delle x nel punto x_0 dove la densita' assume il valore dato dalla condizione iniziale

$$\rho = g(x_0)$$

da cui

$$c(\rho) = c[g(x_0)] = F(x_0) \tag{27}$$

e l'equazione delle caratteristiche (26) diventa

$$x = x_0 + F(x_0) t (28)$$

Si potrebbe avere la non unicita' della soluzione, che si manifesta quando due caratteristiche diverse si incontrano nel punto (x,t), come mostra la figura 8. In questo caso si forma un'*onda d'urto*.

L'idea di base della propagazione ondosa e' che qualche "'disturbo"' si muove con velocita' finita (p.es. l'incresparsi dell'acqua in uno stagno quando lancio un sasso). Ogni curva caratteristica nello spazio (x,t) rappresenta un'ondina che si muove nello spazio. L'eq.(25) ci dice che differenti valori di ρ si propagano con velocita' differenti $c(\rho)$. La soluzione al tempo t si puo' ottenere muovendo ogni punto della curva iniziale $\rho(x,0) = g(x)$ a una distanza $c(\rho)t$ sulla destra. Questa distanza e' differente al variare di ρ . La dipendenza di c da ρ produce il tipico effetto di distorsione non lineare dell'onda. Quando $c'(\rho) > 0$ valori elevati di ρ si propagano con velocita' piu' elevate, viceversa se $c'(\rho) < 0$. Se c' = 0 (caso lineare) il profilo iniziale e' traslato su una distanza ct senza alcun cambio di forma.

La figura (9) mostra il caso in cui $c'(\rho) > 0$: punti con piu' alta densita' si muovono piu' veloci degli altri e si forma l'urto quando la funzione diventa a piu' valori (t_B) . Al tempo t_3 la funzione $\rho(x,t)$ e' addirittura a tre valori.





Possibile tema di approfondimento 1.

• Modello di coda al semaforo (onda di rarefazione)

Possibile tema di approfondimento 2.

• Onde d'urto

5 Equazione semi-lineari del II ordine in due variabili

Una PDE semi-lineare del second'ordine ha la seguente forma:

$$a(x,y)u_{xx} + 2h(x,y)u_{xy} + b(x,y)u_{yy} = F(x,y,u,u_x,u_y)$$
(29)

con a, b, h ed F funzioni regolari di classe $\mathbb{C}^2(\Omega)$, Ω e' un aperto del piano. In analogia con la classificazione delle *coniche*, classifichiamo l'equazione semi-lineare del second'ordine rispetto al segno del determinante della matrice dei coefficienti:

$$d = \det \begin{pmatrix} a & h \\ h & b \end{pmatrix} = ab - h^2$$

distinguiamo i seguenti casi:

- 1. d > 0: equazione ellittica.
- 2. d < 0: equazione iperbolica.

3. d = 0: equazione parabolica.

Nel caso F = 0, con opportuni cambiamenti di variabili si puo' ricondurre l'equazione (29) in *forma canonica* (sempre). Posto

$$\xi = px + qy, \ \eta = rx + sy \tag{30}$$

 $\operatorname{con} p, q, r, s,$ costanti arbitrarie

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = p \frac{\partial u}{\partial \xi} + r \frac{\partial u}{\partial \eta}$$
(31)

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \dots \tag{32}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \dots \tag{33}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \dots \tag{34}$$

si ottiene:

$$(ap^{2} + 2hpq + bq^{2})\frac{\partial^{2}u}{\partial\xi^{2}} + [apr + bsq + h(rq + sp)]\frac{\partial^{2}u}{\partial\xi\eta} + (ar^{2} + 2hrs + bs^{2})\frac{\partial^{2}u}{\partial\eta^{2}}$$
(35)

Scegliamo le costanti in modo che p=r=1e tali che le costanti q,ssiano le due radici λ_1 e λ_2 dell'equazione

$$a + 2h\lambda + b\lambda^2 = 0. \tag{36}$$

Da cui la (35) diventa

$$[a+h(\lambda_1+\lambda_2)+b\lambda_1\lambda_2]\frac{\partial^2 u}{\partial\xi\partial\eta}=0.$$
(37)

Poiche':

$$\lambda_1 + \lambda_2 = -\frac{2h}{b} \quad , \quad \lambda_1 \lambda_2 = \frac{a}{b} \tag{38}$$

la (37) diventa

$$\frac{2}{b}(ab-h^2)\frac{\partial^2 u}{\partial\xi\partial\eta} = 0.$$
(39)

5.1 Caso non parabolico

Se la (39) non e' parabolica (cio
e' $(ab-h^2)\neq 0)$ e $b\neq 0,$ ne segue che

$$u = \mathcal{F}(\xi) + \mathcal{G}(\eta) \tag{40}$$

con $\mathcal{F} \in \mathcal{G}$ funzioni arbitrarie. Poiche'

$$\xi = x + \lambda_1 y \quad , \quad \eta = x + \lambda_2 y \tag{41}$$

la soluzione di (29) con F = 0, nel caso in cui non sia parabolica, e'

$$u = \mathcal{F}(x + \lambda_1 y) + \mathcal{G}(x + \lambda_2 y) \tag{42}$$

con λ_1, λ_2 radici di (36). Consideriamo i seguenti casi:

• Caso 1 : $ab - h^2 < 0$ (iperbolico)

Le radici λ_1, λ_2 sono reali e distinte, e la soluzione (42) e' la somma di due funzioni reali con argomento reale.

Esempio 2 (L'equazione delle onde).

$$u_{xx} - \frac{1}{c^2} u_{tt} = 0 \tag{43}$$

E' un caso particolare di (29) ponendo $F=0,\,a=1,\,h=0,\,b=-1/c^2$ a sostituendo y con t. Ne segue che

$$ab - h^2 < 0$$

l'equazione e' iperbolica. Dalla (36) si ha

$$1 - \frac{\lambda^2}{c^2} = 0$$

da cui le radici sono $\lambda_1=c,\,\lambda_2=-c$ e la soluzione (42) e':

$$u = \mathcal{F}(x + ct) + \mathcal{G}(x - ct) \tag{44}$$

Esercizio 1. Trovare la soluzione di

$$2u_{xx} + 3u_{xy} + u_{yy} = 0 \tag{45}$$

• Caso 2 : $ab - h^2 > 0$ (ellittico)

Le radici λ_1, λ_2 sono complesse coniugate

$$\lambda_1 = p + i\sigma \quad , \quad \lambda_2 = p - i\sigma$$

quindi la (41) diventa:

$$\xi = x + py + i\sigma y \quad , \quad \eta = \xi^{\star} \tag{46}$$

e la (39)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \xi^\star} \tag{47}$$

la cui soluzione e'

$$u = \mathcal{F}(\xi) + \mathcal{G}(\xi^*). \tag{48}$$

Esempio 3 (Equazione di Laplace).

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \tag{49}$$

E' un caso particolare di (29) ponendo $F=0,\,a=b=1,\,h=0.$ Ne segue che

$$ab - h^2 > 0$$

l'equazione e' ellittica. Dalla (36) si ha

$$1 + \lambda^2 = 0$$

da cui le radici sono $\lambda_1 = i, \lambda_2 = -i$ e la soluzione (42) e':

$$u = \mathcal{F}(x + iy) + \mathcal{G}(x - iy) \tag{50}$$

Esercizio 2. Trovare la soluzione di

$$2u_{xx} + u_{xy} + u_{yy} = 0 \tag{51}$$

5.2 caso parabolico

Nel caso in cui l'equazione e' parabolica $ab-h^2 = 0$ e la (39) e' identicamente soddisfatta. Per cui utilizzando ancora la trasformazione (30) scegliendo altri coefficienti, si trova

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} = 0 \tag{52}$$

che, per integrazione dara'

$$u = \mathcal{F}(\xi) + \eta \mathcal{G}(\xi) \tag{53}$$

e tornado alle vecchie variabili x, y si otterra'

$$u = \mathcal{F}(x + \lambda y) + y\mathcal{G}(x + \lambda y) \tag{54}$$

con λ e' la radice doppia di

$$a + 2h\lambda + b\lambda^2 = 0. \tag{55}$$

Esercizio 3. Trovare la soluzione di

$$u_{xx} + 4u_{xy} + 4u_{yy} = 0 \tag{56}$$

5.3 Teorema di esistenza

E' possibile dimostarre un teorema generale di esistenza locale delle soluzioni. A tal fine introduciamo la definizione seguente:

Definizione 1. Una curva γ in forma implicita $\phi(x, y) = 0$ si dice *curva* caratteristica della (29) in (x, y) se

- γ e' regolare;
- vale la relazione

$$a\phi_x^2 - 2b\phi_x\phi_y + c\phi_y^2 = 0$$

Il principale enunciato di esistenza per equazioni alle derivate parziali di forma generale e' senza dubbio il teorema di Cauchy-Kovalevskaya, che stabilisce l'esistenza di una soluzione (locale) analitica quando i coefficienti dell'equazione e i dati ai limiti sono analitici e non caratteristici. Si tratta di un risultato importante, ma non sempre decisivo, nel senso che per molte equazioni alle derivate parziali il problema di Cauchy non e' significativo; del resto non sempre i dati e i coefficienti di un'equazione sono analitici e in tal caso questo teorema non si applica. Inoltre, esso garantisce una soluzione unica nella classe delle funzioni analitiche, ma non e' escluso a priori che vi possano essere altre soluzioni, non analitiche. **Teorema 4.** (di Cauchy-Kovalevskaya) Sia γ una curva non caratteristica per la (29) in nessun punto del suo supporto e le funzioni a, b, c, $F \in \mathbb{C}^2$. Supponiamo di assegnare i dati su γ :

$$u(x,y) = \alpha(x,y), \ \frac{\partial u}{\partial n} = \beta(x,y), \ \forall (x,y) \in \gamma$$
(57)

con $\alpha \ e \ \beta \in \mathbb{C}^2$. Allora $\exists !$ solutione che soddisfa la (57) definita in un intorno della curva γ .

6 Diffusione

6.1 L'equazione di diffusione

L'equazione di *diffusione* o del *calore* per una funzione u = u(x, t), x variabile reale spaziale, t variabile temporale, ha la forma

$$u_t - Du_{xx} = f \tag{58}$$

dove D e' una costante positiva che prende il nome di *coefficiente di diffu*sione. In dimensione spaziale n > 1, cioe' quando $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, l'equazione di diffusione e'

$$u_t - D\Delta u = f \tag{59}$$

dove Δ indica l'operatore di Laplace:

$$\Delta = \sum_{k=1}^{n} \partial_{x_k x_k}$$

La denominazione "equazione di diffusione o del calore" e' dovuta al fatto che essa e' soddisfatta dalla temperatura in un mezzo omogeneo e isotropo rispetto alla propagazione del calore; f rappresenta l'"intensita'" di una sorgente esogena di calore, distribuita nel mezzo.

La (58) e la (59) costituiscono modelli di diffusione molto piu' generali, dove per **diffusione** si intende, il *trasporto di materia dovuto al moto molecolare del mezzo in cui essa e' immersa*. In tal caso la soluzione *u* potrebbe rappresentare la concentrazione di un soluto o di un inquinante oppure anche una densita' di probabilita'.

In condizioni di equilibrio, cioe' quando non c'e' evoluzione nel tempo ($\partial t = 0$), la soluzione dell'equazione di diffusione soddisfa la versione stazionaria

$$-Du_{xx} = f \tag{60}$$

Se D = 1, la (58) si chiama equazione di *Poisson* o *del potenziale*. Se f = 0 si chiama equazione di *Laplace* e le sue soluzioni sono cosi' importanti in cosi' tanti campi da meritarsi il nome di **funzioni armoniche**.

6.2 La conduzione del calore

Il calore e' una forma di energia che frequentemente conviene considerare isolata da altre forme. Come unita' di misura si usa la caloria, che corrisponde a 4.182 *joule*. Vogliamo derivare un modello matematico per la conduzione del calore in un corpo rigido con le seguenti ipotesi:

• il corpo rigido sia omogeno e isotropo



Figura 10: Diagramma di volume

- la densita' sia costante
- possa ricevere energia da una sorgente $esogena\ ^2$, come potrebbe essere in passaggio di una corrente elettrica o da una reazione chimica oppure il calore prodotto per assorbimento o irragiamento dall'esterno.

Indichiamo con r il tasso di calore per unita' di massa fornito al corpo dall'esterno ([r] = $cal \times tempo^{-1} \times massa^{-1}$).

Poiche' il calore e' una forma di energia, vale la relativa legge di conservazione:

Legge di conservazione

Sia V un elemento arbitrario di volume all'interno del corpo rigido. Il tasso di variazione dell'energia interna in V eguaglia il flusso di calore attraverso il bordo ∂V di V, dovuta alla conduzione, piu' quello dovuto alla sorgente esterna.

Attenzione, l'energia interna e' l'energia *microscopica* delle molecole dovuta all'agitazione termica, da non confondere con quella *macroscopica* cinetica e/o potenziale.

Se indichiamo con $e = e(\mathbf{x}, t)$ l'energia interna per unita' di massa, la quantita' di energia interna in V e' data da

$$\int_V e\rho \ d{\bf x}$$

cosicche' il suo tasso di variazione (assumendo di poter derivare sotto il segno di integrale) e'

$$\frac{d}{dt} \int_{V} e\rho \ d\mathbf{x} = \int_{V} e_t \rho \ d\mathbf{x}$$

L'energia interna in V varia sia perche' fluisce da ∂V , sia perche' ci sono delle sorgenti esterne in V.

Indichiamo il vettore flusso di calore con \mathbf{q} ([$|\mathbf{q}|$] = cal × lunghezza⁻¹ × tempo⁻¹). Questo vettore assegna la direzione del flusso di calore e la

²letteralmente "che nasce dal di fuori",

sua velocita' per unita' di area. Precisamente se $d\sigma$ e' un elemento d'area contenuto in ∂V con versore normale esterno $\vec{\nu}$, $\mathbf{q} \cdot \vec{\nu} d\sigma = |\mathbf{q}| \cos \theta d\sigma$ e' la velocita' con la quale l'energia fluisce attraverso $d\sigma$ (vedi figura 10) e quindi il flusso di calore *entrante* attraverso ∂V e' dato da

$$-\int_{\partial V} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma$$

dove il segno "-" indica che il flusso fluisce in verso opposto a $\vec{\nu}$ e dal teorema di Gauss si ottiene

$$-\int_{\partial V} \mathbf{q} \cdot \nu \, d\sigma = -\int_{V} div \mathbf{q} \, d\mathbf{x} \, .$$

Il contributo dovuto alla sorgente esterna e' uguale a

$$\int_V r\rho \ d\mathbf{x}$$

pertanto il bilancio di energia richiede dunque

$$\int_{V} e_{t}\rho \, d\mathbf{x} = -\int_{V} div\mathbf{q} \, \mathbf{dx} + \int_{V} r\rho \, d\mathbf{x}$$
(61)

L'arbitrarieta' di V permette di convertire l'equazione integrale (61) nell'equazione alle derivate parziali

$$\rho e_t = -div\mathbf{q} + \rho \, r \tag{62}$$

che costituisce la legge fondamentale della conduzione del calore. Poiche' e e **q** sono incognite occorrono *leggi costitutive* per queste quantita'. Assumiamo le seguenti:

• Legge di Fourier per la conduzione del calore

In condizioni usuali, il flusso e' proporzionale al gradiente di temperatura (maggiore e' la differenza di temperatura, maggiore e' il flusso di calore):

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla \theta \tag{63}$$

dove θ e' la temperatura assoluta e $\kappa > 0$, conduttivita' termica ($[\kappa] = cal \times temperatura^{-1} \times tempo^{-1} \times lunghezza^{-1}$), e' legata alle proprieta' del materiale. Il segno meno tiene conto del fatto che il calore fluisce verso regioni dove la temperatura e' minore (cioe' dal mezzo piu' caldo al mezzo piu' freddo).

Ad esempio, nel caso 1D se $\frac{d\theta}{dx} > 0$, θ e' crescente con x, ma il calore ha direzione opposta, ovvero il gradiente va verso la direzione crescente (vedi figura 11). Da cui

$$div\mathbf{q} = \nabla \cdot \mathbf{q} = -\kappa \nabla \cdot \nabla \theta = -\kappa \Delta \theta$$

dove $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \in \nabla \cdot \nabla = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = \Delta$



Figura 11: Esempio calore

• L'energia interna e' proporzionale alla temperatura assoluta

$$e = c_v \theta$$

dove c_v e' il calore specifico (a volume costante, $[c_v] = cal \times grado^{-1} \times massa^{-1})$ del materiale. Anche c_v , nei casi concreti piu' comuni, puo' essere considerato costante.

Tenuto conto di queste leggi costitutive, la (62) diventa

$$\theta_t = \frac{\kappa}{c_v \rho} \Delta \theta + \frac{1}{c_v} r \tag{64}$$

che e' l'equazione di diffusione con $D = \frac{\kappa}{c_v \rho}$ e $f = \frac{r}{c_v}$. Nel coefficiente D e' sintetizzata la risposta termica del materiale.

6.3 Problemi ben posti (n = 1)

Quali sono i problemi ben posti per l'equazione di diffusione? Cominciamo in dimensione (spaziale n = 1). Consideriamo l'evoluzione della temperatura $u = \theta$ di una sbarra cilindrica con sezione di area A e di lunghezza L molto superiore al raggio della sezione, isolata termicamente ai lati. Sebbene la sbarra sia tridimensionale, possiamo assumere che il calore fluisca solo lungo l'asse del cilindro e che sia distribuito uniformemente in ogni sezione della sbarra. Possiamo dunque adottare un modello unidimensionale, identificando la sbarra con un segmento del tipo $0 \le x \le L$ e assumere che $e = e(x,t), r = r(x,t), \text{ con } 0 \le x \le L$. Coerentemente, u = u(x,t) e le relazioni costitutive diventano

$$e(x,t) = c_v u(x,t), \ \mathbf{q} = -\kappa u_x \mathbf{i}$$

Scegliendo $V=A\times [x,x+\Delta x]$ nella (61), l'areaA della sezione di semplifica e otteniamo

$$\int_{x}^{x+\Delta x} c_{v}\rho u_{t} \, dx = \int_{x}^{x+\Delta x} \kappa u_{xx} \, dx + \int_{x}^{x+\Delta x} r\rho \, dx$$

che da' per u l'equazione unidimensionale

$$u_t - Du_{xx} = f. ag{65}$$

Vogliamo studiare l'evoluzione della temperatura in un intervallo di tempo, diciamo da t = 0 fino a t = T. Occorre dunque assegnare il **dato iniziale** (*o di Cauchy*) u(x, t = 0) e tenere conto di come la sbarra interagisce con l'ambiente circostante. Delle condizioni sono:

• condizioni di Dirichlet

Partendo da una data configurazione iniziale, potremmo influire sull'evoluzione di u controllando cio' che succede agli estremi della sbarra; un modo per farlo e', per esempio, usando un termostato per mantenere la temperatura al livello desiderato. Cio' equivale ad assegnare

$$u(0,t) = h_1(t), \ u(L,t) = h_2(t), \ t \in (0,T]$$
(66)

• condizioni di Neumann

Anziche' la temperatura, si puo' controllare il flusso di calore uscente/entrante dagli estremi. Adottando sempre la legge di Fourier, si ha:

flusso di calore entrante in
$$x = 0 : -\kappa u_x(0,t)$$

flusso di calore entrante in $x = L : -\kappa u_x(L,t)$

dove $\kappa > 0$ e' la costante di conduttivita' termica. Controllare il flusso agli estremi corrisponde dunque ad assegnare

$$-u_x(0,t) = h_1(t), \ u_x(L,t) = h_2(t), \ t \in (0,T]$$
(67)

• condizione di Robin (o condizione di radiazione)

E' una condizione mista, ad esempio, puo' presentarsi il caso in cui occorra assegnare in un estremo una condizione di Dirichlet, nell'altro una di Neumann. Dalla legge (lineare) di raffreddamento di Newton, la perdita di calore dalla superficie di un corpo e' funzione lineare della differenza di temperatura tra quella dell'ambiente U e quella del corpo u. Supponiamo che il mezzo circostante sia tenuto alla temperatura Ue che il flusso di calore entrante attraverso un estremo, per esempio, x = L, sia proporzionale alla differenza U - u, cioe'

$$\kappa u_x(L,t) = \gamma(U - u(L,t)), \gamma > 0 \ e \ t \in (0,T]$$
(68)

Ponendo $\alpha = \frac{\gamma}{\kappa} > 0$ e $\beta = \frac{\gamma U}{\kappa}$ la condizione di Robin in x = L si scrive

$$u_x(L,t) + \alpha u(L,t) = \beta, \ t \in (0,T].$$
 (69)

In importanti applicazioni, come per esempio alla Finanza Matematica, si presenta il caso in cui x varia in insiemi illimitati, tipicamente intervalli del tipo $[0, +\infty[$ o anche tutto \mathbb{R} , che corrisponde al caso di una sbarra ideale, infinita. In questi casi occorre richiedere che la soluzione non diverga all'infinito troppo rapidamente.

6.4 Cenni sulla serie di Fourier

Sia u(x) una funzione periodica di periodo 2
 $T^{\ 3}$ e integrabile in[-T,T].

Definizione 2. Si definiscono coefficienti di Fourier di u

$$a_n = \frac{1}{T} \int_{-T}^{T} u(x) \cos(n\omega x) \, dx \quad , \quad b_n = \frac{1}{T} \int_{-T}^{T} u(x) \sin(n\omega x) \, dx \quad , \qquad (70)$$

dove $\omega = \pi/T$.

A u possiamo associare la sua Serie di Fourier scrivendo

$$u(x) \simeq \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left[a_k \cos\left(k\omega x\right) + b_k \sin\left(k\omega x\right) \right].$$
(71)

Enunciamo alcune proprieta':

• u(x) e' una funzione dispari, cioe' u(-x) = -u(x) ne segue che $a_k = 0 \forall k \ge 0$ e

$$b_k = \frac{2}{T} \int_0^T u(x) \sin(k\omega x) \, dx \tag{72}$$

e la serie di Fourier e'a soli seni

$$u(x) \simeq \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin\left(k\omega x\right) \tag{73}$$

• u(x) e' una funzione pari, cioe' u(-x) = u(x) ne segue che $b_k = 0 \forall k \ge 1$ e

$$a_k = \frac{2}{T} \int_0^T u(x) \cos(k\omega x) \, dx \quad , \tag{74}$$

e la serie di Fourier e'a soli coseni

$$u(x) \simeq \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos\left(k\omega x\right) \tag{75}$$

• forma complessa

Usando l'identità di Eulero

$$e^{ik\omega x} = \cos(k\omega x) + i\sin(k\omega x) \quad , \quad k \in \mathbb{Z}$$

la serie di Fourier (71) si puo' scrivere

$$u(x) \simeq \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{u}_k e^{ik\omega x}$$
(76)

dove i coefficienti complessi di Fourier \hat{u}_k sono dati da

$$\hat{u}_k = \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} u(x) e^{-ik\omega x} dx$$
(77)

 ${}^{3}u(x+2T) = u(x)$

Teorema 5. Se u e' una funzione a quadrato integrabile ⁴ in [-T, T] allora la serie di Fourier converge in media quadratica a u(x), cioe'

$$\lim_{n \to \infty} \int_{-T}^{T} \left[u(x) - s_n(x) \right]^2 \, dx = 0 \quad , \quad s_n(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{n} \left[a_k \cos\left(k\omega x\right) + b_k \sin\left(k\omega x\right) \right]$$
(78)

Inoltre vale la seguente formula di Bessel

$$\frac{1}{T} \int_{-T}^{T} u^2(x) \, dx = \frac{a_0^2}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k^2 + b_k^2) \tag{79}$$

Poiche' la serie numerica a secondo membro della (79) e' convergente, ne segue il seguente corollario

Corollario 1. (Riemann-Lebesgue)

$$\lim_{k \to +\infty} a_k = \lim_{k \to +\infty} b_k = 0.$$
(80)

Si puo' provare che la serie di Fourier, sotto ulteriori ipotesi converge puntualmente e uniformemente (vedi p. es. [5]).

6.5 Serie di Fourier e analisi armonica di un segnale periodico

L'operazione di scomporre una funzione periodica u di periodo T in somma (finita o infinita) di funzioni periodiche semplici del tipo coseno/seno costituisce l'analisi armonica della funzione u: il termine

$$a_1 \cos \omega x + b_1 \sin \omega x$$

si chiama armonica fondamentale; il termine

$$a_k \cos k\omega x + b_k \sin k\omega x$$
, $k = 2, 3, ...$

si chiama armonica k-esima. Questa terminologia e' derivata dall'acustica. Quando un diapason, colpito, si mette a vibrare, le sue vibrazioni possono essere descritte da una funzione periodica semplice del tempo t come

 $x(t) = a \cos \omega t$ oppure $a \sin \omega t$

dove x(t) misura lo spostamento, al tempo t, di un corno del diapason dalla sua posizione di riposo. Il numero positivo *a* misura l'ampiezza dell'oscillazione e viene percepito dall'orecchio come intensita' o volume del suono;

 $^{{}^4 \}int_{-T}^T u^2(x) \, dx < \infty$

 $1/T = \omega/(2\pi)$ e' la frequenza tipica del diapason: essa viene percepita dall'orecchio come altezza del suono. Il diapason ha la proprietà di emettere suoni puri, cioe' suoni di una determinata frequenza. In generale i suoni emessi dagli strumenti musicali non sono puri, ma risultano dalla sovrapposizione di diverse armoniche. Ciò è dovuto al fatto che una corda fissata agli estremi può oscillare in diversi modi, cioò con diverse frequenze: queste frequenze (teoricamente infinite) sono multipli di una frequenza fondamentale propria della corda. La vibrazione effettiva di un dato punto della corda risulta dalla sovrapposizione delle vibrazioni corrispondenti ai singoli modi: essa è perciò descritta da una somma di funzioni semplici coseno/seno, cioe' da una serie di Fourier.

Utilizzando l'identita' trigonometrica

$$a_k \cos k\omega t + b_k \sin k\omega t = \sqrt{a_k^2 + b_k^2} \cos(k\omega t - \phi_k)$$
(81)

con $\phi_k = \arctan \frac{b_k}{a_k}$, ogni termine della serie di Fourier (71) detto armonica, si scrive come somma di armoniche di tipo cosinusoide, a patto di inserire in essa una fase e con ampiezza $A_k = \sqrt{a_k^2 + b_k^2}$. In altre parole, ogni vibrazione periodica si puo' vedere come sovrapposizione di vibrazioni elementari tutte di tipo cosinusoidale, che hanno frequenze multiple di una frequenza fondamentale, ampiezze diverse e sono inoltre sfasate tra loro. In generale A_k si chiama spettro di ampiezza e ϕ_k spettro di fase.

• Per k = 1 il temine

 $A_1(\cos\omega t - \phi_1)$

si chiama armonica fondamentale, che e' il "suono puro" che oscilla con frequenza fondamentale $\nu = 1/T$.

• per k > 1 i termini

 $A_k(\cos k\omega t - \phi_k)$

rappresentato le armoniche superiori che oscillano con frequanza $k\nu$ cioe' multiple della frequenza fondamentale ν .

La stessa terminologia (ampiezza, frequenza, armoniche. . .) viene utilizzata al di fuori dell'ambito acustico, nell'analisi di segnali (periodici) di vario tipo, per esempio elettromagnetici.

Il fatto che i coefficienti di Fourier tendano a zero per $k \to \infty$ (vedi (80)) corrisponde al fatto che, in pratica, solo le prime armoniche sono rilevanti nella descrizione di un segnale periodico: quelle successive hanno ampiezza talmente piccola da essere praticamente trascurabili. Più numerose sono le armoniche presenti (in modo rilevante) in un segnale, più il segnale potrà avere una forma complicata e irregolare, per la presenza di molte armoniche di alta frequenza, che oscillano rapidamente (vedi figura 12). Viceversa, la presenza di pochi termini nello sviluppo di Fourier significa la presenza delle



Figura 12: Approssimazione della funzione onda quadra attraverso i primi quattro termini della corrispondente serie di Fourier

sole basse frequenze, perciò un segnale lentamente variabile e dalla forma "liscia".

6.6 Il metodo di separazione delle variabili

Dimostreremo che i problemi considerati sopra sono ben posti, cioe' la soluzione esiste, e' unica e dipende con continuita' dai dati. A volte cio' si puo' fare con metodi elementari, come quello di *separazione delle variabili*, che presentiamo servendoci di un semplice esempio di conduzione del calore.

Consideriamo una sbarra (unidimensionale) di lunghezza L tenuta inizialmente a temperatura θ_0 . Successivamente, l'estremo x = 0 e' mantenuto alla stessa temperatura, mentre l'estremo x = L viene mantenuta ad una temperatura $\theta_1 > \theta_0$. Vogliamo sapere come evolve la temperatura.

Proviamo a congetturare che cosa puo' succedere. Dato che $\theta_1 > \theta_0$, dall'estremo *caldo* comincera' a fluire calore causando un aumento della temperatura all'interno e una fuoriuscita di calore dall'estremo *freddo*. All'inizio, il flusso entrante sara' superiore al flusso uscente, ma col tempo, con l'aumento di temperatura all'interno, esso comincera' a diminuire, mentre il flusso uscente aumentera'. Ci si aspetta che prima o poi i due flussi si bilancino e si assesteranno su una situazione stazionaria.

Il modello matematico riprodotto e'

$$\begin{cases} \theta_t - D\theta_{xx} = 0, \ t > 0, 0 < x < L, \\ \theta(x,0) = \theta_0, \ 0 \le x \le L, \\ \theta(0,t) = \theta_0, \ \theta(L,t) = \theta_1, \ t > 0. \end{cases}$$

• Variabili adimensionali. Conviene riformulare il problema passando a variabili adimensionali. A tale scopo, occorre riscalare spazio, tempo e temperatura rispetto a grandezze caratteristiche del problema. Una grandezza caratteristica e' la lunghezza della sbarra. Poniamo quindi

$$y = \frac{x}{L}$$

che e' ovviamente una grandezza adimensionale, essendo rapporto di lunghezze. Notiamo che

$$0 \le y \le 1.$$

Come riscalare il tempo? Osserviamo che le dimensione di D sono

$$lunghezza^2 \times tempo^{-1}$$

La costante $\tau = \frac{L^2}{D}$ ha dunque le dimensioni di un tempo ed e' indubbiamente legata alle caratteristiche del problema. Introduciamo percio' il tempo adimensionale

$$s = \frac{t}{\tau}$$

Poniamo infine

$$u(y,s) = \frac{\theta(Ly,\tau s) - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0}$$

Risulta

$$u(y,0) = \frac{\theta(Ly,0) - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0} = 0, \ 0 \le y \le 1,$$
$$u(0,s) = \frac{\theta(0,\tau s) - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0} = 0,$$
$$u(1,s) = \frac{\theta(L,\tau s) - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0} = 1$$

Inoltre,

$$(\theta_1 - \theta_0)u_s = \frac{\partial t}{\partial s}\theta_t = \tau\theta_t = \frac{L^2}{D}\theta_t$$
$$(\theta_1 - \theta_0)u_{yy} = \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)^2\theta_{xx} = L^2\theta_{xx}$$

Per cui essendo $\theta_t = D\theta_{xx}$,

$$(\theta_1 - \theta_0)(u_s - u_{yy}) = \frac{L^2}{D}\theta_t - L^2\theta_{xx} = \frac{L^2}{D}D\theta_{xx} - L^2\theta_{xx} = 0.$$

Riassumendo, si ha

$$u_s - u_{yy} = 0 \tag{82}$$

con le condizioni u(y,0) = 0 e

$$u(0,s) = 0, \ u(1,s) = 1.$$
 (83)

Osserviamo che nella formulazione adimensionale i parametri $L \in D$ non compaiono, evidenziandone la struttura matematica del problema.

• La soluzione stazionaria. Cominciamo a determinare la soluzione stazionaria. Dato che $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$, segue che $u_s = 0$. Inoltre, $u_{yy} = 0$ e $u_y = c$, quindi integrando si ottiene $u^{St}(y) = cy + u(y = 0)$, dalla validita' delle condizioni (32), si ha la soluzione stazionaria

$$u^{St}(y) = y$$

Tornando alle variabili originali, la soluzione stazionaria e'

$$\theta^{St}(x) = \theta_0 + (\theta_1 - \theta_0)\frac{x}{L}$$

che corrisponde ad un flusso uniforme di calore lungo la sbarra, dato dalla legge di Fourier:

flusso di calore =
$$-\kappa \theta_x = -\kappa \frac{(\theta_1 - \theta_0)}{L}$$

• *Regime transitorio*. Conviene a questo punto porre

$$U(y,s) = u^{St}(y,s) - u(y,s) = y - u(y,s)$$

U rappresenta il *regime transitorio* che ci aspettiamo tenda a zero per $s \to +\infty$. La velocita' di convergenza a zero di U da' informazioni sul tempo che la temperatura impiega ad assestarsi sulla posizione di equilibrio u^{St} . U soddisfa l'equazione (82) con la condizione iniziale

$$U(y,0) = y, \ 0 < y < 1$$

e le condizioni di Dirichlet omogenee

$$U(0,s) = 0 \ e \ U(1,s) = 0, \ s > 0$$

• Separazione delle variabili. Cerchiamo ora una formula esplicita per U. L'idea e' di sfruttare la natura lineare del problema costruendo la soluzione mediante sovrapposizione di soluzioni della forma w(s)v(y) in cui le variabili $s \in y$ si presentano separate. Sottolineiamo che e' essenziale avere condizioni agli estremi omogenee.

Passo 1. Si comincia a cercare soluzioni della (82) della forma

$$U(y,s) = w(s)v(y)$$

 $\operatorname{con} v(0) = v(1) = 0$. Sostituendo, si trova

$$0 = U_s - U_{yy} = w'(s)v(y) - w(s)v''(y)$$

da cui, separando le variabili,

$$\frac{w'(s)}{w(s)} = \frac{v''(y)}{v(y)}, \ \forall s > 0, \forall y \in (0,1).$$
(84)

Essendo il primo membro funzione *solo* della variabile *s* ed il secondo funzione *solo* della variabile *y*, l'identita' e' possibile unicamente nel caso in cui entrambi i membri siano uguali ad una costante comune, diciamo λ . Abbiamo, dunque,

$$v''(y) - \lambda v(y) = 0 \tag{85}$$

 \cos

$$v(0) = v(1) = 0 \tag{86}$$

е

$$w'(s) - \lambda w(s) = 0. \tag{87}$$

Passo 2. Risolviamo il problema (85), (86). Vi sono tre possibili forme dell'integrale generale di (85).

1. se $\lambda > 0$, diciamo $\lambda = \mu^2 > 0$, allora

$$v(y) = Ae^{-\mu y} + Be^{\mu y}$$

e ancora le condizioni (86) implicano A = B = 0.

- 2. se $\lambda = 0$, v(y) = A + By (A, B costanti arbitrarie) e le condizioni (85) implicano A = B = 0.
- 3. se $\lambda < 0$, diciamo $\lambda = -\mu^2 < 0$, allora

$$v(y) = A\sin\mu y + B\cos\mu y$$

Imponendo le condizioni (85) si trova

$$v(0) = B = 0$$
$$v(1) = A \sin \mu + B \cos \mu = 0$$

da cui

A arbitrario,
$$B = 0, \ \mu = m\pi, \ m = 1, 2, ...$$

Solo il terzo caso produce soluzioni non nulle del tipo

$$v_m(y) = A\sin m\pi y.$$

Con i valori $\lambda = -\mu^2 = -m^2\pi^2$, la (87) ha come integrale,

$$w_m(s) = Ce^{-m^2\pi^2 s}, \ (C \ costante \ arbitraria)$$

Otteniamo cosi' soluzioni della forma

$$U_m(y,s) = A_m e^{-m^2 \pi^2 s} \sin m\pi y$$

Passo 3. Nessuna tra le soluzioni U_m soddisfa la condizione iniziale U(y,0) = y, infatti U(y,0) = 0. Come abbiamo gia' accennato, cerchiamo di costruire la soluzione desiderata sovrapponendo le infinite soluzioni U_m mediante la formula

$$U(y,s) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m e^{-m^2 \pi^2 s} \sin m\pi y$$

Il problema e' quello di determinare le costanti A_m tale che

$$U(y,0) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \sin m\pi y = y, \ 0 \le y \le 1.$$
 (88)

Per via delle condizioni di Dirichlet omogenee agli estremi e' naturale sviluppare la funzione f(y) = y dispari, periodica di periodo 2, che coincide con y nell'intervallo [0,1]. I coefficienti di Fourier si calcolano con la formula

$$A_k = 2 \int_0^1 y \sin k\pi y \, dy =$$
$$= -\frac{2}{k\pi} [y \cos k\pi y]_0^1 + \frac{2}{k\pi} \int_0^1 \cos k\pi y \, dy =$$
$$= -2 \frac{\cos k\pi}{k\pi} = (-1)^{k+1} \frac{2}{k\pi}$$

Lo sviluppo di f(y) = y e', dunque:

$$y = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \sin m\pi y = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m+1} \frac{2}{m\pi} \sin m\pi y \qquad (89)$$

Si vede subito che lo sviluppo non puo' essere vero in y = 1 in quanto $\sin m\pi = 0$ per ogni m e si otterrebbe 1 = 0.

La teoria della serie di Fourier implica che lo sviluppo (89) e' valido nell'intervallo (-1, 1), mentre agli estremi la serie e' ovviamente nulla. Inoltre, la serie converge uniformemente in ogni intervallo $[a, b] \subset (-1, 1)$. In conclusione, la soluzione e'

$$U(y,s) = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m+1} \frac{2}{m\pi} e^{-m^2 \pi^2 s} \sin m\pi y$$
(90)

Altre cose da provare:

- i dato che ogni singola funzione U_m e' soluzione dell'equazione del calore, anche U lo sara'?
- ii Anche supponendo che tutto vada bene, siamo sicuri che U sia l'unica soluzione del problema e quindi descriva senza ombra di dubbio l'evoluzione della temperatura?
- *Riassumendo*. Ritornando al problema di partenza, la soluzione nelle variabili originali risulta

$$\theta(x,t) = \theta_0 + (\theta_1 - \theta_0) \frac{x}{L} - (\theta_1 - \theta_0) \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m+1} \frac{2}{m\pi} e^{\frac{-m^2 \pi^2 D}{L^2} t} \sin \frac{m\pi}{L} x$$

Dalla formula per la soluzione troviamo conferma della congettura sull'evoluzione della temperatura, fatta all'inizio. Infatti, tutti i termini della serie convergono a zero esponenzialmente per $t \to \infty$ e quindi e' facile dimostrare che, a regime, la temperatura si assesta sulla soluzione stazionaria:

$$\theta(x,t) \to \theta_0 + (\theta_1 - \theta_0) \frac{x}{L}, \ t \to \infty$$

Dai vari termini della serie, il primo (m = 1) e' quello che decade piu' lentamente e percio', coll'andar del tempo, e' quello che determina la deviazione dell'equilibrio, indipendentemente dalla condizione inziale. Questo termine e'

$$\frac{2}{\pi}e^{\frac{-\pi^2 D}{L^2}t}\sin\frac{\pi}{L}a$$

e ha un andamento sinusoidale smorzato, di ampiezza $\frac{2}{\pi}e^{\frac{-\pi^2 D}{L^2}t}$. In un tempo t dell'ordine di $\frac{L^2}{4D}$ tale ampiezza e' minore di $e^{\frac{-\pi^2}{4}}$, circa l'8% del suo valore iniziale. Questo semplice calcolo fornisce l'importante informazione che, per raggiungere lo stato di equilibrio, ci vuole un tempo dell'ordine di grandezza di $\frac{L^2}{D}$. Non a caso, il fattore di scala del tempo adimensionale τ era esattamente $\frac{L^2}{D}$.

6.7 Primo problema ai valori iniziali e al contorno per l'equazione del calore

Supponiamo di volere determinare l'evoluzione della temperatura in un corpo conduttore del calore, che occupi nello spazio un dominio $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ limitato, nell'intervallo di tempo [0, T]. Sotto le ipotesi che

- la funzione u = u(x, y, z, t) soddisfi l'equazione del calore $u_t D\Delta u = f$ nel *cilindro spazio-temporale* $Q = \Omega \times (0, +\infty)$, dove la base e' Ω e le generatrici sono parallele a t;
- sia Q_T il cilindro ottenuto da Q con $t \in [0, T]$;
- sia \overline{Q}_T la chiusura di Q (cioe', Q con i suoi punti di accumulazione);
- sia Γ la parte inferiore della frontiera di \overline{Q}_T che consiste nella base inferiore (t = 0) e della superficie laterale, cioe' $\Gamma = \Omega \cup \{\partial \Omega \times [0, T[\}$ (bicchiere).

Il problema (detto primo problema ai valori iniziali e al contorno) consiste nel trovare nel cilindro \overline{Q}_T la soluzione dell'equazione del calore che soddisfa le seguenti

- condizioni iniziali $u_{|t=0} = \phi(x, y, z), (x, y, z) \in \overline{\Omega}$
- condizioni a contorno $u_{|S} = \psi(P, t), t \in [0, T], \text{ dove } S = \partial \Omega, P \in S$

Supponiamo inoltre che $\psi(P,0) = \phi(x,y,z)_{|\partial\Omega}$ e che ψ , ϕ siamo funzioni continue.

Il fatto che il calore fluisca sempre verso regioni dove la temperatura e' piu' bassa ha come conseguenza che una soluzione dell'equazione omogenea del calore assume massimi e minimi globali sulla frontiera di Q. Questo risultato
e' noto come principio di massimo. Inoltre, l'equazione risente dell'irreversibilita' temporale nel senso che il futuro e' influenzato dal passato ma non viceversa (principio di causalita'). In altri termini, il valore di una soluzione u al tempo t e' indipendente da ogni cambiamento nei dati dopo t.

Teorema 6. (del massimo) Sia $u(x, y, z, t) \in C^2(Q) \cap C^0(\partial Q)$ una soluzione dell'equazione del calore nel cilindro Q, allora la sua restrizione a \overline{Q}_T assume il suo massimo (rispettivamente minimo) valore su Γ , cioe' sulla base inferiore del cilindro (t = 0) oppure sulla superficie laterale, cioe'

$$\max_{\overline{Q_T}} u = \max_{\Gamma} u \ (rispettivamente \ \min_{\overline{Q_T}} u = \min_{\Gamma} u)$$

Ci limitiamo a dimostrare solo il caso in cui assume valore massimo (per dimostrare il caso in cui assume valore minimo e' sufficiente considerare la funzione -u.

Dimostrazione. Siano

$$M = \max_{\overline{Q}_T} u(x, y, z, t), \ m = \max_{\Gamma} u(x, y, z, t)$$

dove Γ e' la frontiera parabolica di Q_T , e' costituita dai punti sulla base del cilindro Q_T e da quelli sulla superficie laterale.

Se la funzione u e' costante, allora M = m ed il teorema e' vero.

Supponiamo che u non sia costante ed inoltre, supponiamo per assurdo che M > m. Sia $(x_0, y_0, z_0, t_0) \in \Omega \times [0, T[$ un punto tale che

$$u(x_0, y_0, z_0, t_0) = M \tag{91}$$

Consideriamo la funzione

$$v(x, y, z, t) = u(x, y, z, t) + \frac{M - m}{6d^2} [(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2]$$
(92)

con $d = diam\Omega = \max_{(x,y,z)\in\Omega} \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}$. Ne segue che

$$d^{2} \ge (x - x_{0})^{2} + (y - y_{0})^{2} + (z - z_{0})^{2}$$

sulla frontiera del cilindro (t = 0). Inoltre,

$$m = \max_{\Gamma} u(x,y,z,t) \geq u(x,y,z,t), \; \forall (x,y,z,t) \in \Gamma,$$

Quindi ne segue che $u \leq m, \forall (x, y, z, t) \in \Gamma$, pertanto

$$v(x, y, z, t) \le m + \frac{M - m}{6d^2}d^2 = m + \frac{M - m}{6} = \frac{M}{6} + \frac{5}{6}m < M, \ \forall (x, y, z, t) \in \Gamma$$

Inoltre per la (91) si ha

$$u(x_0, y_0, z_0, t_0) = M, \ (x_0, y_0, z_0, t_0) \in \Omega \times [0, T[$$

e per la (92) si ha

$$v(x_0, y_0, z_0, t_0) = u(x_0, y_0, z_0, t_0) = M$$

Ne segue che sia u che v assumono il massimo in un punto diverso da Γ . Supponiamo che v assume il suo massimo in

$$(x_1, y_1, z_1, t_1) \in \Omega \times]0, T]$$

pertanto in tale punto le sue derivate seconde pure risulteranno non positive $(H > 0, f_{xx} < 0, f_{yy} < 0)$, mentre in tale punto risulta $v_t \ge 0$. Infatti, se $t_1 < T$ (intervallo aperto $]0, T[) v_t(x_1, y_1, z_1, t_1) = 0$, il massimo e' tale che $v_t = v_x = v_y = v_z$ (Fermat). Se $t_1 = T$ (intervallo chiuso [0, T]), $v_t(x_1, y_1, z_1, t_1) \ge 0$. Allora in (x_1, y_1, z_1, t_1) si ha

$$v_t - a^2 \Delta v \ge 0 \tag{93}$$

dato che $v_t \ge 0$ e $\Delta v \le 0$. Ma essendo

$$\begin{aligned} v(x, y, z, t) &= u(x, y, z, t) + \frac{M - m}{6d^2} [(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2] \\ v_t &= u_t \\ v_x &= u_x + \frac{M - m}{6d^2} 2(x - x_0) \\ v_{xx} &= u_{xx} + \frac{M - m}{6d^2} 2 = u_{xx} + \frac{M - m}{3d^2} \\ v_y &= u_y + \frac{M - m}{6d^2} 2(y - y_0) \\ v_{yy} &= u_{yy} + \frac{M - m}{6d^2} 2 = u_{yy} + \frac{M - m}{3d^2} \\ v_z &= u_z + \frac{M - m}{6d^2} 2(z - z_0) \\ v_{zz} &= u_{zz} + \frac{M - m}{6d^2} 2 = u_{zz} + \frac{M - m}{3d^2} \end{aligned}$$
cui $\Delta v = v_{xx} + v_{yy}$ Allora si ha

da cui $\Delta v = v_{xx} + v_{yy} + v_{zz}$. Allora si ha

$$v_t - a^2 \Delta v = u_t - a^2 \left[\Delta u + \frac{M - m}{d^2} \right] =$$
$$= u_t - a^2 \Delta u - a^2 \frac{M - m}{d^2} = -a^2 \frac{M - m}{d^2} < 0$$

Quest'ultima e' in contrasto con la (93). Pertanto m = M.

Corollario 2. La soluzione del primo problema ai valori iniziali e al contorno e' unica in Q_T .

Dimostrazione. Supponiamo per assurdo che esistano due soluzioni u_1, u_2 , poniamo

$$w = u_1 - u_2$$

anche w e' soluzione dell'equazione del calore e soddisfa le condizioni al contorno, infatti, dato che

$$\begin{split} u_{1|S} &= \psi(P,t), \ \forall t \in [0,T[\\ u_{2|S} &= \psi(P,t), \ \forall P \in S, \ S = \partial \Omega \end{split}$$

si ha

$$w_{|S} = (u_1 - u_2)_{|S} = 0, \ \forall P \in S = \partial \Omega, \ \forall t \in [0, T[$$

Per il teorema del massimo w assume il massimo e minimo su Γ , ma $w_{|\Gamma} = 0$, allora $w = 0, \forall P, t$, pertanto $u_1 = u_2$.

6.8 Il metodo dell'energia ed unicita'

Supponiamo per assurdo che esistano due soluzioni $u,\,v$ differenti per l'equazione del calore

$$u_t - a^2 \Delta u = 0, \ \forall (x, y, z) \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^3$$

$$v_t - a^2 \Delta v = 0, \ \forall (x, y, z) \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^3$$

(94)

con le stesse condizioni iniziali

$$u(x, y, z, t = 0) = v(x, y, z, t = 0) = g(x, y, z), \ \forall (x, y, z) \in \Omega$$

e che valgono le stesse condizioni al contorno:

• Dirichlet.

$$u(x, y, z, t) = v(x, y, z, t) = h_1(t), \ \forall (x, y, z) \in \partial\Omega, \ \forall t > 0$$

• Neumann. Sia σ un punto di $\partial \Omega$ ed $\hat{n} = \hat{n}(\sigma)$ il versore normale al piano tangente a $\partial \Omega$ in σ . In tal caso si assume la derivata normale

$$\nabla_{\hat{n}} u = \nabla u \cdot \hat{n}, \ \forall \sigma \in \partial \Omega, \ \forall t \ge 0$$

cioe',

$$\nabla_{\hat{n}}\hat{v} = \nabla v \cdot \hat{n} = h_2(\sigma, t)$$

• Robin (o radiazione) in tal caso

$$\nabla_{\hat{n}}u + \alpha u = \beta, \ \nabla_{\hat{n}}v + \alpha v = \beta, \ \alpha > 0, \ \sigma \in \partial\Omega, \ \forall t > 0$$

Consideriamo adesso w = u - v che soddisfa ancora la (94) con

• Dirichlet.

$$w(x,y,z,t=0)=0,\;\forall (x,y,z,t)\in \Omega$$

• Neumann.

$$\nabla_{\hat{n}}w = 0, \ \forall (x, y, z) \in \partial\Omega, \ \forall t > 0$$

• Robin.

$$\nabla_{\hat{n}}(u-v) + \alpha(u-v) = 0$$

da cui

$$\nabla_{\hat{n}}w + \alpha w = 0$$

Moltiplichiamo la (94), scritta in termini di ω ed integriamo su Ω , si ha

$$\int_{\Omega} ww_t \ d\mathbf{x} = a^2 \int_{\Omega} w\Delta w \ d\mathbf{x} \tag{95}$$

Analizziamo il primo membro della (95) 5

$$I = \int_{\Omega} ww_t \ d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} w^2 \ d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} w^2 \ d\mathbf{x}$$

Definiamo energia la quantita' positiva

$$E(t) = \int_{\Omega} w^2 d\mathbf{x}$$

da cui avremo

$$I = \int_{\Omega} w w_t \, d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \frac{dE}{dt}$$

Analizziamo il secondo membro della (95). Da una formula di calcolo vettoriale ricaviamo che

$$\nabla \cdot (f\bar{v}) = \nabla f \cdot \bar{v} + f \,\nabla \cdot \bar{v} \tag{96}$$

con f=f(x,y,z) e $\bar{v}=\bar{v}(x,y,z)$ 6. Adesso nella (96) sostituiamo

$$f \to w, \ \bar{v} \to \nabla f = \nabla w$$

da cui si ottiene

$$\nabla \cdot (w\nabla w) = \nabla w \cdot \nabla w + w\nabla \cdot \nabla w \tag{97}$$

dove

$$\nabla w \cdot \nabla w = \left(\frac{\partial w}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial w}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial w}{\partial z}\hat{k}\right) \cdot \left(\frac{\partial w}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial w}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial w}{\partial z}\hat{k}\right) =$$

⁵possiamo passare fuori dall'integrale $\frac{d}{dt}$ perche' l'integrale e' in dxdydz⁶ $\nabla f = \frac{\partial f}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\hat{k}$ e' il gradiente, mentre $\nabla \cdot \bar{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$ e' la divergenza)

$$= \left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 = |\nabla w|^2$$

inoltre

$$\nabla \cdot \nabla w = \nabla \cdot \left(\frac{\partial w}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial w}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial w}{\partial z}\hat{k}\right) = \frac{\partial w^2}{\partial x^2} + \frac{\partial w^2}{\partial y^2} + \frac{\partial w^2}{\partial z^2} = \Delta w$$

da cui la (97) diventa

$$\nabla \cdot (w\nabla w) = |\nabla w|^2 + w\Delta w$$

da cui il secondo membro della (95) diventa

$$\int_{\Omega} w\Delta w \ d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \nabla \cdot (w\nabla w) \ d\mathbf{x} - \int_{\Omega} |\nabla w|^2 \ d\mathbf{x}$$
(98)

adesso applichiamo il teorema di Gauss (sulla divergenza)

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (w \nabla w) \, d\mathbf{x} = \int_{\partial \Omega} (w \nabla w) \cdot \hat{n} \, d\sigma = \int_{\partial \Omega} w \nabla_{\hat{n}} w \, d\sigma$$

da cui la (98) diventa

$$\int_{\Omega} w \Delta w \, d\mathbf{x} = \int_{\partial \Omega} w \nabla_{\hat{n}} w \, d\sigma - \int_{\Omega} |\nabla w|^2 \, d\mathbf{x}$$

In definitiva l'equazione dell'energia diventa

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}E(t) = a^2 \int_{\Omega} w \nabla_{\hat{n}} w \, d\sigma - a^2 \int_{\Omega} |\Delta w|^2 \, d\mathbf{x} \le a^2 \int_{\partial \Omega} w \nabla_{\hat{n}} w \, d\sigma$$

poiche' nel caso di

- Dirichlet, $w = 0, \forall \sigma \in \partial \Omega;$
- Neumann, $\nabla_{\hat{n}} w = 0, \forall \sigma \in \partial \Omega;$
- Robin, $\nabla_{\hat{n}} w + \alpha w = 0$ e $\nabla_{\hat{n}} w = -\alpha w < 0$

allora si ha che

$$\frac{1}{2}\frac{dE}{dt} \le 0$$

quindi l'energia e' un funzionale decrescente rispetto al tempo e si ha che

$$E(t) \le E(0) = \int_{\Omega} [w(x, y, z, t=0)]^2 d\mathbf{x}$$

ma per la condizione iniziale w(x, y, z, t = 0) = 0, si ha che

$$E(t) \le 0, \ \forall t \ge 0$$

ma essendo la funzione integranda w^2 non negativa ne segue che

$$E(t) = 0, \ \forall t \ge 0$$

allora, $w(x,y,z,t)=0, \forall (x,y,z)\in \Omega, \forall t\geq 0,$ da cuiu(x,y,z,t)=v(x,y,z,t),cioe' la soluzione e'unica.

6.9 Il problema di Cauchy per l'equazione del calore

Vogliamo trovare la soluzione del problema dell'equazione del calore

$$\begin{cases} u_t - a^2 u_{xx} = 0, \ t \ge 0, \ x \in \mathbb{R} \\ u(x, 0) = \phi(x) \in C^1 \ limitata \end{cases}$$

- Si prova l'unicita' della soluzione (sfruttando il Teorema del massimo)
- Proviamo l'esistenza della soluzione. Cerchiamo la soluzione sfruttando il metodo di separazione delle variabili, cerchiamo soluzioni del tipo u(x,t) = X(x)T(t), sostituendo nella prima equazione del sistema si ottiene

$$X(x)T'(t) - a^{2}X''(x)T(t) = 0$$

da cui

$$\frac{T'(t)}{a^2T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda^2 = costante$$

Dalla relazione precedente si ricava che

$$T' + a^2 \lambda^2 T = 0 \Rightarrow T(t) = \exp[-a^2 \lambda^2 t]$$

infatti,

$$\int \frac{T'}{T} dt = -\int a^2 \lambda^2 dt$$

 $\Rightarrow \log |T(t)| = -a^2 \lambda^2 t + C_1 \Rightarrow |T(t)| = e^{-a^2 \lambda^2 t} e^{C_1} \Rightarrow T(t) = C \exp[-a^2 \lambda^2 t]$ $X'' + \lambda^2 X = 0 \Rightarrow X(x) = A \cos \lambda x + B \sin \lambda x$

con A, B, C costanti arbitrarie che possono differire λ . Si ha

$$u(x,t) = \exp[-a^2\lambda^2 t][A(\lambda)\cos\lambda x + B(\lambda)\sin\lambda x]$$

Poiche' λ e' arbitrario e non abbiamo alcuna condizione limite, possiamo considerare l'integrale

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-a^2 \lambda^2 t] [A(\lambda) \cos \lambda x + B(\lambda) \sin \lambda x] \, d\lambda \qquad (99)$$

Perche' l'integrale converga uniformemente e si possa derivare sotto il segno di integrale, scegliamo $A(\lambda)$, $B(\lambda)$ in modo da soddisfare la condizione iniziale $u(x, 0) = \phi(x)$,

$$\phi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} [A(\lambda)\cos\lambda x + B(\lambda)\sin\lambda x] \, dx \tag{100}$$

Supponiamo inoltre che la $\phi(x)$ sia tale che

- qualunque intervallo limitato sia decomponibile in un numero finito di intervalli in cui $\phi(x)$ vari periodicamente;
- $-\phi(x)$ sia assolutamente integrabile in $]-\infty, +\infty[$, cioe' $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)| dx < \infty.$

Allora vale la seguente formula integrale di Fourier

$$\phi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\xi) \cos\left[\lambda(\xi - x)\right] d\xi =$$

dato che cos $[\lambda(\xi - x)] = \cos \lambda \xi \cos \lambda x + \sin \lambda \xi \sin \lambda x$, possiamo riscrivere la relazione precedente come

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \cos \lambda x \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\xi) \cos \lambda \xi \, d\xi + \sin \lambda x \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\xi) \sin \lambda \xi \, d\xi \right\} d\lambda$$

da cui considerando la (100) si ottiene

$$A(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\xi) \cos \lambda \xi \ d\xi$$
$$B(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\xi) \sin \lambda \xi \ d\xi$$

e sostituendo in (100) si ottiene

$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\xi) \exp\left[-a^2 \lambda^2 t\right] \cos\left[\lambda(\xi - x)\right] d\xi =$$
$$= \frac{1}{\pi} \int_{0}^{+\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\xi) \exp\left[-a^2 \lambda^2 t\right] \cos\left[\lambda(\xi - x)\right] d\xi =$$
$$= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\xi) d\xi \int_{0}^{+\infty} \exp\left[-a^2 \lambda^2 t\right] \cos\left[\lambda(\xi - x)\right] d\lambda$$

dalla formula

$$\int_{0}^{+\infty} \exp\left[-a^{2}\lambda^{2}\right] \cos\beta\lambda \ d\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2a} \exp\left\{-\frac{\beta^{2}}{4a^{2}}\right\}, \ a > 0$$

Si ottiene

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\xi) \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \exp\left\{-\frac{(\xi-x)^2}{4a^2t}\right\} d\xi \qquad (101)$$

La funzione

$$F(x,t,\xi) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \exp\left\{-\frac{(\xi-x)^2}{4a^2t}\right\}$$
(102)

come funzione di x e t e' soluzione dell'equazione del calore che si chiama soluzione fondamentale.

Risulta piu' complicato provare che la (101) e' soluzione dell'equazione del calore e la dipendenza continua dei dati.

Possibile tema di approfondimento 3.

• Produrre un filmato (utilizzando per es. MATLAB o Python) in cui si grafichi la soluzione(101), assegnando opportune condizioni iniziali.

6.10 Paradosso della velocita'

Dalla (101) ne segue che il calore si propaga istantaneamente con velocita' infinita lungo una sbarra infinita.

Infatti, supponiamo che al tempo iniziale $\phi(x)$ sia positiva per $x \in [\alpha, \beta]$ e nulla al di fuori di questo intervallo. La distribuzione di temperatura per t > 0 e' data dalla (101)

$$u(x,t) = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\phi(\xi)}{2a\sqrt{\pi t}} \exp\left\{-\frac{(x-\xi)^2}{4a^2t}\right\} d\xi$$

da cui e' evidente che per t > 0 (piccolo quanto si voglia) e per x grande a piacere si ha che u(x,t) > 0, cioe', il calore si propaga con velocita' infinita che e' in contrasto con la velocita' della luce! (equazioni di Maxwell).



Figura 13: Passeggiata aleatoria simmetrica

6.11 Diffusione e probabilita': la passeggiata aleatoria

Vedremo che relazione esiste tra l'equazione di diffusione del calore e i processi di diffusione nel moto delle particelle in un corpo ⁷. Supponiamo di considerare una particella che si muove lungo x e che essa parte da x = 0, muovendosi a caso lungo l'asse delle x.

La particella puo' occupare posizioni multiple intere di un passo fissato Δx , e che i cambiamenti di posizione avvengano sempre e solo ogni intervallo di tempo fissato Δt . Se il moto non e' influenzato da nessuna causa strana la particella ad ogni istante $k\Delta t$ ha una probabilita' pari a $\frac{1}{2}$ di muoversi verso destra e $\frac{1}{2}$ di muoversi verso sinistra, in modo indipendente dal passo precedente (processo markoviano). Vedi figura 13.

Dopo un tempo $N\Delta t$, la particella si puo' trovare ovunque tra $-N\Delta x$ e $N\Delta x$.

Ovviamente dopo un tempo grande $N\Delta t$ la probabilita' che si trovi vicino a x = 0 e' maggiore della probabilita' che si trovi molto lontano (*passeggiata aleatoria*).

Ci poniamo il problema di calcolare p(m,n), ovvero la probabilita' che si trovi nella posizione $m\Delta x$ all'istante $n\Delta t$.

Per raggiungere la posizione $x = m\Delta x$ al tempo $t = n\Delta t$ (quindi dopo n passi), la particella segue un certo numero di passi a destra pari ad a, mentre il numero di passi a sinistra e' pari a b. Allora

$$m = a - b, \ n = a + b, \ a = \frac{n + m}{2}, \ b = n - a = \frac{n - m}{2}$$

Ne segue che

$$p(m,n) = p_a = \frac{numero\ di\ cammini\ con\ k\ passi\ destra\ su\ n}{numero\ di\ cammini\ con\ n\ passi}$$

Un cammino con n passi e' una successione di lettere ripetute $D \in S(DSDDSS...)$ dove D indica destra e S indica sinistra.

• Il numero totale di cammini con n passi e' pari alla disposizione con ripetizione (n volte) di 2 elementi $(D \in S)$, cioe'

 2^n

 $^{^7 \}rm Ricordiamo$ che la temperatura e' una misura dell'energia interna di un corpo, che e' legato all'oscillazione delle molecole di cui esso e' formato

• Il numero di cammini con a passi a destra su n e' pari al numero di permutazioni con ripetizione degli elementi D (a volte) e degli elementi S ((n - a) volte), cioe'

$$\frac{n!}{a!(n-a)!} = \binom{n}{a}$$

In definitiva,

$$p(m,n) = \frac{1}{2^n} \frac{n!}{a!(n-a)!}$$

per n molto grande si consideri l'approssimazione di Stirling

$$n! \sim (2\pi n)^{(\frac{1}{2})} \left(\frac{n}{e}\right)^n, \ n >> 1$$

da cui

$$p(m,n) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{n}{a(n-a)}} \left(\frac{n}{2a}\right)^a \left[\frac{n}{2(n-a)}\right]^{n-a}$$

da cui con opportuni sviluppi di Taylor si ha

$$p(m,n) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi n}} e^{-\frac{m^2}{2n}}$$

poniamo $x = m\Delta x$ e $t = n\Delta t$ ed effettuiamo il cosiddetto passaggio dal discreto al continuo per cui

 $m,n \rightarrow \infty ~e~ \Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ in modo che x e t siano finiti

Consideriamo la densita' di probabilita'

$$u = \frac{p}{2\Delta x} = \lim_{\Delta x, \Delta t \to 0} \frac{p\left(\frac{x}{\Delta x}, \frac{t}{\Delta t}\right)}{2\Delta x} =$$
$$= \lim_{\Delta x, \Delta t \to 0} \left[\frac{\Delta t}{2\pi t (\Delta x)^2}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2t}\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}}$$

Supposto che

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \to 0} \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} = D > 0$$

Si ottiene

$$u(x,t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$
(103)

che coincide esattamente con la soluzione fondamentale dell'equazione del calore (102) dove D e' il coefficiente di diffusione.

6.12 La probabilita' di transizione limite

Nel valutare p(x, t), teniamo presente che la nostra particella si muove ad ogni passo in modo *indipendente dal cammino percorso precedentemente*. Se essa si trova in x al tempo $t + \tau$, significa che, al tempo t, si trova in x - hoppure in x + h, con ugual probabilita'. Il teorema delle probabilita' totali fornisce allora la relazione

$$p(x,t+\tau) = \frac{1}{2}p(x-h,t) + \frac{1}{2}p(x+h,t)$$
(104)

con le condizioni iniziali

$$p(0,0) = 1 \ e \ p(x,0) = 0 \ se \ x \neq 0$$

Fissati $x \in t$, vogliamo ora esaminare cosa succede se passiamo al limite per $h \to 0, \tau \to 0$. Intanto, conviene pensare che p(x,t) sia una funzione definita su tutto $\mathbb{R} \times (0, \infty)$, dopo il passaggio al limite ci troveremo con una distribuzione continua di probabilita' e quindi p(x,t) dovrebbe essere nulla in ogni punto. Ma se interpretiamo p come densita' di probabilita' l'anomalia scompare. Supponendo p differenziabile quanto occorre, possiamo scrivere

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) + p_t(x, t)\tau + o(\tau)$$
$$p(x \pm h, t) = p(x, t) \pm p_x(x, t)h + \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)h^2 + o(h^2)$$

Sostituendo nella (104), dopo alcune semplificazioni, si trova

$$p_t \tau + o(\tau) = \frac{1}{2} p_{xx} h^2 + o(h^2)$$

e dividendo per τ ,

$$p_t + o(1) = \frac{1}{2} \frac{h^2}{\tau} p_{xx} + o\left(\frac{h^2}{\tau}\right)$$
(105)

Siamo ad un punto cruciale: nell'ultima equazione ritroviamo la combinazione $\frac{h^2}{\tau}!$

Se vogliamo ottenere qualcosa di sensato quando, $h, \tau \to 0$, occorre che il rapporto $\frac{h^2}{\tau}$ si mantenga finito e positivo. Assumiamo dunque che

$$\frac{h^2}{\tau} = 2D, \ (D > 0) \tag{106}$$

(l'inserimento del 2 ha ragioni puramente estetiche). Passando al limite nella (105) si ottiene per p l'equazione del calore

$$p_t = Dp_{xx}$$

e le condizioni iniziali diventano

$$\lim_{t \to 0^+} p(x,t) = \delta$$

Abbiamo gia' constatato che l'unica soluzione del problema precedente e' data dalla soluzione fondamentale dell'equazione di diffusione

$$p(x,t) = \Gamma_D(x,t)$$

essendo

$$\int_{\mathbb{R}} p(x,t) \, dx = 1$$

La costante D e' dunque il *coefficiente di diffusione*. La nostra costruzione rivela che il nome e' appropriato. Infatti, la media (o il valore atteso) di x dopo N passi e'

$$\mathbb{E}(x) = < x > = \sum_{i} x_i p_i = < m > \Delta x$$

dato che $x = m\Delta x$, con m = 2a - N, quindi $\langle m \rangle = 2 \langle a \rangle - N$.

$$< a >= \mathbb{E}(a) = \sum_{a=1}^{N} p_a a = \frac{1}{2^N} \sum_{a=1}^{N} \binom{N}{a} = \frac{1}{2^N} \sum_{a=1}^{N} \binom$$

dato che $p_a = \frac{\binom{N}{a}}{2^N}$. In
oltre sviluppando il binomio all'interno della sommatoria, si ha

$$=\frac{1}{2^{N}}\sum_{a=1}^{N}\frac{N!}{a!(N-a)!}a = \frac{1}{2^{N}}\sum_{a=1}^{N}\frac{N(N-1)!}{(a-1)!(N-a)!} = \frac{1}{2^{N}}N\sum_{a=1}^{N}\binom{N-1}{a-1} = \frac{1}{2^{N}}2^{N-1}N = \frac{N}{2}$$

La varianza di x e'

$$var(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \ge 0$$

Dato che < x >²= 0, si ha che $var(x) = \langle x^2 \rangle = \langle m^2 \Delta^2 x \rangle = \langle m^2 \rangle \Delta^2 x$. Ricordando che $m^2 = (2a - N)^2$ segue che

$$< m^2 > = < 4a^2 - 4aN + N^2 > = 4 < a^2 > -4 < a > N + N^2$$

Posto $\langle a \rangle = \frac{N}{2}$ e $\langle a^2 \rangle = \sum_{a=1}^{N} p_a a^2 = \cdots = \frac{N(N+1)}{4}$. Da cui segue che

$$< m^2 >= 4 \frac{N(N+1)}{4} - 4 \frac{N}{2}N + N^2 = N^2 + N - 2N^2 + N^2 = N$$

allora

$$\langle x^2 \rangle = \langle m^2 \rangle \Delta^2 x = N \Delta^2 x \Rightarrow \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{N} \Delta x$$

Ricaviamo la deviazione standard

$$\sqrt{varx} = \sqrt{N}\Delta x$$

e quindi

$$\frac{\langle x^2 \rangle}{t} = \frac{\Delta^2 x}{\Delta t} = 2D$$

che significa: nell'unita' di tempo, la particella diffonde ad una distanza media di $\sqrt{2D}$. É questa la caratteristica della passeggiata aleatoria che si conserva nel passaggio al limite. Dalla (106) ricaviamo che

$$\frac{\Delta x}{\tau} = \frac{2D}{\Delta x} \to \infty$$

e cioe' che la velocita' $\frac{\Delta x}{\tau}$, con la quale la particella effettua ogni passo, diventa infinita. Il fatto, quindi, che la particella diffonda ad una distanza media finita nell'unita' di tempo e' dovuto alle continue fluttuazioni del suo moto.

Possibile tema di approfondimento 4.

• Scrivere un codice che simuli la passeggiata aleatoria

7 Equazione della corda vibrante

Una corda e' un filo flessibile sottile. Supponiamo che:

- sia soggetta ad una forte tensione Φ e che, in equilibrio, sia descritta lungo l'asse delle x;
- la tensione sia molto piu' grande della forza peso e trascuriamo quest'ultima;
- il moto sia piano e che tutti i punti della corda si muovano perpendicolari all'asse delle x (vibrazioni trasversali);
- indicato con u(x,t) lo spostamento al tempo t delle posizioni di equilibrio $x \in [a,b], u \in C^1([a,b] \times [0,\infty])$, supponiamo che $u \in \frac{\partial u}{\partial x}$ siano cosi' piccoli da poter trascurare il loro prodotto e/o quadrati;
- i cambiamenti di tensione durante il moto siano trascurabili in confronto delle tensioni all'equilibrio;

Consideriamo un arbitrario segmento $[x_1, x_2]$ della corda in equilibrio e supponiamo che esso si sia deformato in $\widehat{M_1M_2}$ e con se' delle vibrazioni. La lunghezza dell'arco $\widehat{M_1M_2}$ e'

$$\widehat{M_1 M_2} = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + u_x^2} \, dx \simeq \int_{x_1}^{x_2} dx = x_2 - x_1$$

in quanto si puo' trascurare u_x^2 .

Supponiamo che la tensione Φ in ciascun punto della corda non dipenda esplicitamente dal tempo.

Teorema 7. Sotto le ipotesi precedenti risulta che $|\bar{\Phi}(x)| = \Phi_0 = costante$.

Dimostrazione. Le forze agenti su $\widehat{M_1M_2}$ sono le tensioni $\overline{\Phi}(x_1)$ e $\overline{\Phi}(x_2)$ in M_1, M_2 , le forze esterne (se ci sono) e le forze di inerzia.

Se la corda e' composta di un materiale elastico, le forze interne tengono insieme il materiale e la loro somma e' nulla.

Poiche' il moto e' verticale, le componenti orizzontali delle forze si devono bilanciare, si ha $|\bar{\Phi}| = \Phi$.

$$\bar{\Phi}(x_1) = -|\bar{\Phi}(x_1)| \cos \alpha_1 \hat{i} - |\bar{\Phi}(x_1)| \sin \alpha_1 \hat{j}$$
$$\bar{\Phi}(x_2) = |\bar{\Phi}(x_2)| \cos \alpha_2 \hat{i} + |\bar{\Phi}(x_2)| \sin \alpha_2 \hat{j}$$

Stiamo supponendo che le oscillazioni siano verticali, pertanto le componenti orizzontali, lungo \hat{i} , sono uguali e opposte.

Secondo la condizioni di equilibrio si ha che $\overline{\Phi}(x_1) + \overline{\Phi}(x_2) = 0$, quindi si ha

$$-|\Phi(x_1)|\cos\alpha(x_1) + |\Phi(x_2)|\cos\alpha(x_2) = 0$$

dalla relazione $\cos \alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 \alpha(x)}}, \alpha \in \left[\frac{-\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right], e \text{ dal fatto che } \tan^2 \alpha(x) = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \simeq 0 \text{ si ricava che}$ $\cos \alpha(x) = 1$

quindi si ha che

$$|\bar{\Phi}(x_1)| = |\bar{\Phi}(x_2)|, \forall x_1, x_2 \in [a, b]$$

da cui $\Phi(x) = costante$.

Vogliamo adesso trovare l'equazione del moto. Calcoliamo la componente verticale della tensione che chiameremo y.

$$y = \Phi_0[\sin\alpha(x_2) - \sin\alpha(x_1)]$$

poiche'

$$\sin \alpha(x) = \frac{\tan \alpha(x)}{\sqrt{1 + \tan^2 \alpha(x)}} = \frac{\frac{\partial u}{\partial x}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2}} \simeq \frac{\partial u}{\partial x}$$

allora si ha

$$y = \Phi_0 \left[\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_2} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_1} \right] = \Phi_0 \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx$$

D'altra parte, poiche' la prima equazione cardinale della dinamica si ha che

$$\sum_{i=1}^{N} m_i \vec{a}_i = \vec{R}^{est}$$
$$\int \rho \vec{a} \ dc = \vec{R}^{(e)}$$

nel nostro caso $dc \to dx$, $\rho(x) \in a_y \to \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$, pertanto lungo y, l'equazione diventa

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho(x) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \, dx = y = \Phi_0 \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \, dx, \ \forall x_1, x_2$$

da cui si ricava che

$$\rho(x)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Phi_0 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

se $\rho = \rho_0 = costante$, allora

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Rightarrow a^2 = \frac{\Phi_0}{\rho_0}$$

L'equazione del moto e' data da

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

7.1 Conservazione dell'energia

Supponiamo che al tempo t = 0, una corda perfettamente flessibile ed elastica sia a riposo in posizione orizzontale, ed occupi un segmento [0, L] sull'asse x. Poiche' $u_t(x, t)$ e' la velocita' di vibrazione verticale della particella di corda localizzata in x, l'**energia cinetica totale** durante la vibrazione e'

$$E_{cin}(t) = \frac{1}{2} \int_0^L \rho_0 u_t^2 \, dx$$

La corda immagazzina anche energia potenziale dovuta al lavoro delle forze elastiche. Poiche' stiamo trattando piccole vibrazioni, abbiamo visto che la tensione Φ non dipende da x. In un elemento di corda con lunghezza a riposo Δx , queste forze provocano un allungamento pari a

$$\int_{x}^{x+\Delta x} \sqrt{1+u_x^2} \, dx - \int_{x}^{x+\Delta x} dx =$$
$$= \int_{x}^{x+\Delta x} (\sqrt{1+u_x^2} - 1) \, dx \approx \frac{1}{2} u_x^2 \Delta x$$

poiche' $\sqrt{1+u_x^2}-1\simeq 1+\frac{1}{2}u_x^2$, con $u_x<<1$. Pertanto, il lavoro compiuto dalle forze elastiche su questo elemento di corda e'

$$dL = \frac{1}{2}\Phi_0 u_x^2 \Delta x$$

Sommando i contributi di tutti gli elementi di corda si ottiene per l'**energia potenziale** totale l'espressione

$$E_{pot}(t) = \frac{1}{2} \int_0^L \Phi_0 u_x^2 \, dx$$

In conclusione, l'energia meccanica totale della corda e'

$$E(t) = E_{cin}(t) + E_{pot}(t) = \frac{1}{2} \int_0^L [\rho_0 u_t^2 + \Phi_0 u_x^2] dx$$

Calcoliamo la variazione di energia. Si ha, derivando sotto il segno di integrale (ricordando che $\rho_0 = \rho_0(t)$ e Φ_0 e' costante),

$$\frac{dE}{dt} = \int_0^L [\rho_0 u_t u_{tt} + \Phi_0 u_x u_{xt}] dx$$

Integrando per parti il secondo termine si trova

$$\int_0^L \Phi_0 u_x u_{xt} \, dx = \Phi_0 [u_x(L,t)u_t(L,t) - u_x(0,t)u_t(0,t)] - \Phi_0 \int_0^L u_t u_{xx} \, dx$$

per cui

$$\frac{dE}{dt} = \int_0^L [\rho_0 u_{tt} - \Phi_0 u_{xx}] u_t \, dx + \Phi_0 [u_x(L,t)u_t(L,t) - u_x(0,t)u_t(0,t)]$$

In particolare, se u e' costante agli estremi, quindi $u_t(L,t) = u_t(0,t) = 0$, si deduce che $\frac{dE}{dt} = 0$ da cui

$$E(t) = E(0)$$

che esprime la conservazione dell'energia.

8 L'equazione delle onde unidimensionali

8.1 Condizioni iniziali e al bordo

Per l'equazione del calore, nella quale appare una derivata rispetto al tempo, e' appropriato assegnare una condizione che descriva la distribuzione di temperatura al tempo t = 0. Nell'equazione della corda vibrante appare una derivata seconda rispetto al tempo ed e' quindi appropriato (ricordando il problema di Cauchy per le equazioni ordinarie del secondo ordine) assegnare oltre alla posizione della corda, anche la sua velocita' iniziale. Supponiamo, per esempio, di pizzicare una corda di violino e di lasciarla vibrare un paio di secondi. Poi, all'istante t = 0, fotografiamo la situazione "iniziale" che prevede posizione e velocita' istantanea della corda. Questi sono i dati iniziali. In formule, se la corda occupa a riposo il segmento [0, L] dell'asse x, le condizioni iniziali sono:

$$u(x,0) = g(x), \ u_t(x,0) = h(x), \ \forall x \in [0,L].$$

Vediamo adesso le condizioni agli estremi della corda (al contorno) che sono formalmente dello stesso tipo di quelle considerate per l'equazione del calore.

• Condizioni di Dirichlet. Si bloccano gli estremi della corda

$$u(0,t) = u(L,t) = 0, \ \forall t > 0$$

oppure si puo' descrivere come gli estremi si muovano verticalmente:

$$u(0,t) = a(t), \ u(L,t) = b(t), \ \forall t > 0.$$

• Condizioni di Neumann. La condizione di Neumann descrive la tensione (verticale) esercitata agli estremi della corda, che possiamo modellare con $\Phi_0 u_x$, per esempio

$$\Phi_0 u_x(0,t) = a(t), \ -\Phi_0 u_x(L,t) = b(t), \ \forall t > 0$$

indica che la tensione applicata agli estremi varia nel tempo secondo le funzioni $a \in b$. Nel caso molto speciale a(t) = b(t) = 0, entrambi gli estremi della corda sono fissati ad una guida e sono liberi di muoversi verticalmente senza attrito. • Condizioni di Robin. Descrivono un tipo di attacco elastico agli estremi che si puo' realizzare, per esempio, fissando gli estremi ad una molla (lineare) di costante elastica k > 0. Analiticamente, cio' si traduce nelle condizioni

$$\Phi_0 u_x(0,t) = k u(0,t), \ \Phi_0 u_x(L,t) = -k u(L,t), \ \forall t > 0$$

• *Problema di Cauchy globale*. Si puo' idealmente pensare ad una corda di lunghezza infinita ed assegnare solo i dati iniziali

 $u(x,0) = g(x), \ u_t(x,0) = h(x), \ \forall x \in \mathbb{R}.$

8.2 Metodo di separazione delle variabili: il problema di Cauchy-Dirichelet

Supponiamo che le vibrazioni di una corda di violino siano governate dal problema di Cauchy-Dirichlet,

$$\begin{cases} u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0, \ 0 < x < L, t > 0, \\ u(x,0) = g(x), \ u_t(x,0) = h(x), \ 0 \le x \le L \\ u(0,t) = u(L,t) = 0, \ t \ge 0 \end{cases}$$

dove $c^2 = \frac{\Phi_0}{\rho_0}$ e' costante. Vogliamo verificare se il problema e' *ben posto*, se cioe' una soluzione esiste, e' unica e se dipende con continuita' dai dati iniziali g ed h.

8.2.1 Esistenza della soluzione

Poiche' le condizioni di Dirichlet sono omogenee (questa condizione e' essenziale per usare il metodo di separazione delle variabili), proviamo a trovare una soluzione usando il metodo di separazione delle variabili.

Passo 1. Si comincia a cercare soluzioni della forma

$$U(x,t) = w(t)v(x)$$

 $\operatorname{con} v(0) = v(L) = 0$. Sostituendo U nell'equazione delle onde, si trova

$$0 = U_{tt} - c^2 U_{xx} = w''(t)v(x) - c^2 w(t)v''(x)$$

da cui, separando le variabili,

$$\frac{1}{c^2}\frac{w''(t)}{w(t)} = \frac{v''(x)}{v(x)}$$
(107)

e' un'identita' tra la funzione della sola variabile t ed una della sola variabile x. Cio' e' possibile unicamente nel caso in cui entrambi i membri siano uguali ad una costante comune, diciamo λ . Abbiamo, dunque, l'equazione

$$w''(t) - \lambda c^2 w(t) = 0$$
 (108)

e il problema agli autovalori

$$v''(x) - \lambda v(x) = 0, \tag{109}$$

$$v(0) = v(L) = 0. \tag{110}$$

Passo 2. Soluzioni del problema agli autovalori. Vi sono tre possibili forme dell'integrale generale della (109):

- 1. Se $\lambda = 0$, v(x) = A + Bx e le condizioni (57) implicano A = B = 0.
- 2. Se $\lambda = \mu^2 > 0$, $v(x) = Ae^{-\mu x} + Be^{\mu x}$ e ancora le condizioni (110) implicano A = B = 0.
- 3. Se $\lambda = -\mu^2 < 0$, $v(x) = A \sin \mu x + B \cos \mu x$. Imponendo le condizioni (110) si trova

$$v(0) = B = 0$$
$$v(L) = A \sin \mu L + B \cos \mu L = 0$$

da cui

A arbitrario,
$$B = 0$$
, $\mu L = m\pi$, $m = 1, 2, ...$

Solo il terzo caso produce soluzioni non nulle, del tipo

$$v_m(x) = A_m \sin \mu_m x, \ \mu_m = \frac{m\pi}{L}.$$
 (111)

Passo 3. Con i valori $\lambda = -\mu_m^2 = -\frac{m^2 \pi^2}{L^2}$, la (108) ha come integrale generale,

$$w_m(t) = C_m \cos\left(\mu_m c t\right) + D_m \sin\left(\mu_m c t\right) \tag{112}$$

Da (111) e (112) otteniamo la famiglia di soluzioni

$$U_m(x,t) = [a_m \cos{(\mu_m ct)} + b_m \sin{(\mu_m ct)}] \sin{(\mu_m x)}, \ m = 1, 2, \dots$$

con a_m , b_m costanti arbitrarie.

Ciascuna delle U_m rappresenta un possibile moto della corda, noto come *m*esimo modo di vibrazione o *m*-armonica, e rappresenta un'onda stazionaria di frequenza $\frac{mc}{2L}$. La prima armonica e la sua frequenza $\frac{c}{2L}$, la piu' bassa, si dicono fondamentali, mentre le altre frequenza sono multipli interi di quella fondamentale.

Passo 4. Se le condizioni iniziali sono del tipo

$$u(x,0) = a_m \sin \mu_m x, \ u_t(x,0) = c b_m \mu_m \sin \mu_m x$$

allora la soluzione del nostro problema e' esattamente U_m e la corda vibra nel suo *m-esimo* modo. In generale, l'idea e' di costruire la soluzione sovrapponendo le infinite armoniche U_m mediante la formula

$$u(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} [a_m \cos(\mu_m ct) + b_m \sin(\mu_m ct)] \sin(\mu_m x)$$
(113)

dove i coefficienti a_m e b_m devono essere scelti in modo che le condizioni iniziali

$$\begin{cases} u(x,0) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \sin(\mu_m x) = g(x) \\ u_t(x,0) = \sum_{m=1}^{\infty} c b_m \mu_m \sin(\mu_m x) = h(x) \end{cases}$$
(114)

siano soddisfatte per $0 \le x \le L$.

Le (114) indicano che e' naturale assumere che le funzioni $g \in h$ siano sviluppabili in serie di Fourier di soli seni nell'intervallo [0, L]. Siano dunque

$$\hat{g}_m = \frac{2}{L} \int_0^L g(x) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \, dx, \ e \ \hat{h}_m = \frac{2}{L} \int_0^L h(x) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \, dx$$

i coefficienti di Fourier di $g \in h$. Se scegliamo

$$a_m = \hat{g}_m, \ b_m = \frac{h_m}{c\mu_m},$$

allora la (113) diventa

$$u(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} [\hat{g}_m \cos(\mu_m ct) + \frac{\hat{h}_m}{c\mu_m} \sin(\mu_m ct) \sin\mu_m x$$
(115)

e soddisfa le (114).

Sebbene ogni U_m sia una soluzione regolare dell'equazione delle onde, in linea di principio la (115) e' solo una soluzione formale, a meno che si possa derivare termine a termine due volte rispetto a $x \in t$.

La formula (113) dice che la vibrazione di una corda e' costituita dalla sovrapposizione di quelle armoniche la cui ampiezza corrisponde ai coefficienti di Fourier non nulli dei dati iniziali. La presenza o meno di varie armoniche conferisce al suono emesso da una corda una particolare caratteristica nota come timbro.

Un altro aspetto riguarda le ipotesi sui dati iniziali $g \in h$. Quando si pizzica la corda di un violino, il profilo iniziale ha un punto angoloso (continuo ma non derivabile). Abbiamo pertanto bisogno di una teoria diversa, che pero' non tratteremo.

8.2.2 Unicita'

Vogliamo provare che l'equazione delle onde ammette soluzione unica. Supponiamo che

$$u(0,t) = u(L,t) = 0, \ \forall t \ge 0, (conditione \ al \ bordo)$$

 $u(x,0) = g(x), \ (conditione \ initiale)$

Siano $u \in v$ soluzioni del problema, allora w = u - v e' soluzione dello stesso problema con dati iniziali e di Dirichlet nulli, cioe'

$$w(0,t) = w(L,t) = 0, \ \forall t \ge 0,$$

$$w(x,0) = 0, \ 0 \le x \le L,$$

Vogliamo provare che $w\equiv 0.$ Ricordiamo che l'energia meccanica totale e' data dalla formula

$$E(t) = E_{cin}(t) + E_{pot}(t) = \frac{1}{2} \int_0^L [\rho_0 w_t^2 + \tau w_x^2] dx$$

Poiche' $w_t(x,0) = 0$ e $w_x(x,0) = 0$ deduciamo

$$E(0) = 0$$

e dalla conservazione dell'energia, si ha

$$E(t) = E(0) = 0, \ \forall t > 0$$

D'altra parte, poiche' $E_{cin}(t) \ge 0, E_{pot}(t) \ge 0$, deve essere

$$E_{cin}(t) = 0, \ E_{pot}(t) = 0$$

che implicano che $w_t = w_x = 0$ e cioe' che w e' costante. Essendo w(x, 0) = 0, deve essere w(x, t) = 0, per ogni $t \ge 0$, che significa u = v. La soluzione trovata e' quindi unica.

8.3 La formula di d'Alembert

Consideriamo il Problema di Cauchy globale

$$\begin{cases} u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0, \ x \in \mathbb{R}, t > 0\\ u(x,0) = g(x) \quad , \quad u_t(x,0) = h(x), \ x \in \mathbb{R} \end{cases}$$
(116)

Consideriamo il seguente cambiamento di variabili

$$\xi = x - at$$
$$\eta = x + at$$

La (116) diventa

$$u_{\xi\eta} = 0$$

che integrata da' la soluzione di d'Alambert

$$u(x,t) = \theta_1(x-at) + \theta_2(x+at)$$
(117)

con $\theta_1,\,\theta_2$ funzioni arbitrarie e derivabili due volte. Per determinarle utilizziamo le condizioni iniziali

$$u(x,0) = \theta_1(x) + \theta_2(x) = g(x)$$
(118)

$$u_t(x,0) = a[-\theta'_1(x) + \theta'_2(x)] = h(x)$$

integrando la seconda equazione si ottiene

$$\begin{cases} \theta_1(x) + \theta_2(x) = g(x) \\ \theta_1(x) - \theta_2(x) = -\frac{1}{a} \int_0^x h(z) \, dz + c \end{cases}$$

Risolvendo il sistema si ottiene

$$\begin{cases} \theta_1(x) = \frac{1}{2}g(x) - \frac{1}{2a}\int_0^x h(z) \, dz + \frac{c}{2} \\ \theta_2(x) = \frac{1}{2}g(x) + \frac{1}{2a}\int_0^x h(z) \, dz - \frac{c}{2} \end{cases}$$
(119)

Sostituendo nella (117) si ottiene l'importante Formula di d'Alambert

$$u(x,t) = \frac{g(x-at) + g(x+at)}{2} + \frac{1}{2a} \int_{x-at}^{x+at} h(z) dz$$
(120)

Se g(x), $h(x) \in C^2$, allora anche $u(x,t) \in C^2$ e questa soluzione si chiama anche *classica* o *forte*. Si dimostra che tale soluzione e' *unica* e dipende con continuita' dai dati g(x), h(x).

Possibile tema di approfondimento 5.

• Produrre un filmato (utilizzando per es. MATLAB o Python) in cui si grafichi la soluzione(120), assegnando opportune condizioni iniziali.

Osservazione 1. La soluzione (117) da'

$$u(x,t) = \theta_1(x+at) + \theta_2(x-at)$$
(121)

e' una sovrapposizione di un'onda progressiva che si muove verso destro con velocita' a e di un'onda regressiva che si muove verso sinistra con la stessa velocita'. La (121) indica che le famiglie di rette γ^+ e γ^- di equazione

$$\gamma^+: x + at = costante$$

 $\gamma^-: x - at = costante$

trasportano i dati iniziali e si chiamano caratteristiche.

Osservazione 2. Consideriamo il parallelogramma caratteristico con vertici nei punti A, B, C, D in figura 14, ottenuto dalle rette caratteristiche:

$$\gamma^{+}: \begin{cases} x = at + \xi_{1} \\ x = at + \xi_{2} \end{cases} \quad \xi_{2} > \xi_{1}$$
$$\gamma^{-}: \begin{cases} x = -at + \xi_{3} \\ x = -at + \xi_{4} \end{cases} \quad \xi_{4} > \xi_{3} > \xi_{2} > \xi_{1}$$



Figura 14: Parallelogramma caratteristico

dalla (68) si ha

$$\theta_1(A) = \theta_1(C), \ \theta_2(A) = \theta_2(B)$$

$$\theta_1(D) = \theta_1(B), \ \theta_2(D) = \theta_2(C)$$

Sommando queste relazioni si ottiene

$$[\theta_1(A) + \theta_2(A)] + [\theta_1(D) + \theta_2(D)] = [\theta_1(C) + \theta_2(C)] + [\theta_1(B) + \theta_2(B)]$$

Ponendo

$$U(A) = \theta_1(A) + \theta_2(A), \ U(D) = \theta_1(D) + \theta_2(D),$$
$$U(C) = \theta_1(C) + \theta_2(C), \ U(B) = \theta_1(B) + \theta_2(B),$$

si ha

$$U(A) + U(D) = U(C) + U(B)$$

Conoscendo tre dei valori nei vertici del parallelogramma caratteristico si determina il quarto vertice.

9 L'equazione di Laplace

Molti fenomeni fisici (ad esempio il moto di un fluido incomprimibile, la distribuzione di temperatura di un solido omogeneo ed isotropo, il potenziale gravitazionale di una distribuzione di massa/carica) sono descritti da equazioni ellittiche. Le piu' semplici sono l'equazione di Poisson e l'equazione di Laplace.

L'equazione di Poisson, $\Delta u = f$ svolge un ruolo importante nella teoria dei campi conservativi dove il vettore campo e' gradiente di un potenziale.

L'equazione di Laplace e' l'equazione di Poisson nella versione omogenea, $\Delta u = 0.$

Esempio 8. Sia **E** un campo elettrostatico generato da una distribuzione di cariche in un dominio $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$, allora, in unita' standard il teorema di Gauss ci dice che $div \mathbf{E} = \frac{4\pi\rho}{\epsilon}$, dove ρ e' la densita' di carica ed ϵ e' la costante dielettrica del mezzo. Quando esiste un potenziale u tale che $\mathbf{E} = -\nabla u$, allora $\Delta u = div \nabla u = -\frac{4\pi\rho}{\epsilon}$, che e' l'equazione di Poisson.

Definizione 3. Una funzione u(x, y, z) e' **armonica in un dominio limi**tato $D \subseteq \mathbb{R}^3$ se

$$u \in C^2(D) \ e \ \Delta u = 0 \ \forall (x, y, z) \in D,$$

Definizione 4. Una funzione u(x, y, z) e' armonica in un dominio illimitato $D \subseteq \mathbb{R}^3$ se

$$u \in C^2(D) \ e \ \Delta u = 0 \ \forall (x, y, z) \in D,$$

ed inoltre,

$$\lim_{P \to \infty} u(P) = 0, \ P \equiv (x, y, z)$$

Lemma 9. La funzione

$$u = \frac{1}{r} = \frac{1}{D(P, P_0)} = \frac{1}{\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}}$$

e' armonica in ogni dominio D che non contiene il punto $P_0 \equiv (x_0, y_0, z_0)$. Tale soluzione e' detta fondamentale. In modo analogo la funzione

$$u = \log \frac{1}{r} = \log \frac{1}{\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}}$$

e' detta soluzione fondamentale dell'equazione di Laplace bidimensionale u_{xx} + $u_{yy} = 0$ per ogni dominio limitato di \mathbb{R}^2 non contenente $P_0 \equiv (x_0, y_0)$.

9.1 Formule di integrazione per parti

Presentiamo alcune forme integrali che ci serviranno in seguito.

Teorema 10. (di Gauss) Sia $D \subset \mathbb{R}^3$ un dominio limitato e sia $S = \partial D$ una superficie regolare, siano $P, Q, R \in C^1(D) \cap C^0(\overline{D})$, allora

$$\int_{D} (P_x + Q_y + R_z) \, dD = \int_{S} [P\cos(\hat{n}, \hat{i}) + Q\cos(\hat{n}, \hat{j}) + R\cos(\hat{n}, \hat{k})] \, dS$$

dove \hat{n} e' il versore della normale stessa a S.

Teorema 11. (*Prima Formula di Green*) Siano $u, v \in C^1(\overline{D}) \cap C^2(D)$, allora

$$\int_{D} [u_x v_x + u_y v_y + u_z v_z] \ dD = \int_{S} u \frac{\partial v}{\partial n} \ dS - \int_{D} u \Delta v \ dD$$

Teorema 12. (Seconda Formula di Green) Siano $u, v \in C^1(\overline{D}) \cap C^2(D)$, allora

$$\int_{D} \left[u\Delta v - v\Delta u \right] \, dD = \int_{S} \left[u\frac{\partial v}{\partial n} - v\frac{\partial u}{\partial n} \right] \, dS$$

Possiamo applicare questi teoremi alle funzioni armoniche

Corollario 3. Sia $u \in C^2(\overline{D})$ una funzione armonica, con D limitato e sia $S = \partial D$, allora

$$\int_S u \frac{\partial u}{\partial n} \ dS \geq 0$$

Dimostrazione. Dalla prima formula di Green, ponendo u = v, si ha

$$\int_{S} (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2) \ dD = \int_{S} u \frac{\partial u}{\partial n} \ dS - \int_{D} u \Delta u \ dD$$

per ipotesi la funzione e' armonica, $\Delta u = 0$, allora si ha

$$\int_{S} u \frac{\partial u}{\partial n} \, dS = \int_{S} (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2) \, dD \ge 0$$

Corollario 4. Sia $u \in C^2(\overline{D})$ una funzione armonica, con D limitato e sia $S = \partial D$, allora

$$\int_{S} \frac{\partial u}{\partial n} \, dS = 0$$

Dimostrazione. É sufficiente applicare la seconda formula di Green alle funzioni armoniche ponendo v = 1. **Corollario 5.** Sia $u \in C^2(\overline{D})$ una funzione armonica, con D limitato e sia $S = \partial D$, allora si prova che

$$u(x_0, y_0, z_0) = \frac{1}{4\pi} \int_S \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{r} \right) \right] \, dS$$

Cioe' il valore di una funzione armonica in un qualsiasi punto di un dominio $P_0(x_0, y_0, z_0)$ si puo' esprimere in termini dei suoi valori e i valori delle sue derivate normali sulla superficie del dominio.

Corollario 6. Una funzione armonica in D ha derivate di qualunque ordine in D.

Dimostrazione. Sia (x_0, y_0, z_0) un punto interno a D. Allora esiste un sotto dominio D' in D con la sua frontiera S' contenuta in D. Poiche' u e' armonica in D, allora e' anche armonica in D' e $u \in C^2(\overline{D}')$. Per il corollario 5 si ha

$$u(x_0, y_0, z_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{S'} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{r} \right) \right] \, dS'$$

Poiche' $(x_0, y_0, z_0) \notin S' \in \frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}}$ e' continua in (x_0, y_0, z_0) con le derivate di qualunque ordine mentre la u e' calcolata in S' (e non in (x_0, y_0, z_0)) e quindi la funzione integranda e' C^2 rispetto alle variabili (x_0, y_0, z_0) . Allora derivando sotto il segno di integrale si ottiene che $u(x_0, y_0, z_0)$ ha derivate di qualunque ordine rispetto alle variabili (x_0, y_0, z_0) .

Teorema 13. (del Massimo) Sia u una funzione armonica in un dominio limitato D e continua in \overline{D} . Se u non e' costante in \overline{D} allora assume il suo massimo e minimo valore sulla frontiera.

Teorema 14. Una funzione armonica in D (dominio limitato) non puo' avere massimo e minimi relativi in D.

9.2 Problemi ai valori al contorno per le equazioni di Laplace e di Poisson

Formuliamo i problemi fondamentali ai valori al contorno per l'equazione di Laplace e di Poisson in un dominio D. Questi problemi sono sostanzialmente uguali a quelli per l'equazione di diffusione del calore (dove $u_t = 0$) senza naturalmente la condizione iniziale. Distinguiamo due problemi

• Problema interno. Sia S una superficie chiusa, D_i il dominio limitato da S, cioe' D_i interno a S.

Se D_i e' un dominio tale che $S = \partial D_i$, allora sulla frontiera possiamo assegnare:

1. una condizione di Dirichlet. Si assegnano i valori di u:

$$u(x, y, z) = g(x, y, z), \ \forall (x, y, z) \in \partial D$$

2. una condizione di Neumann. Si assegna la derivata normale di u:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = h(x,y,z), \; \forall (x,y,z) \in \partial D$$

3. una condizione di Robin. Si assegna

$$\frac{\partial u}{\partial n} + \alpha u = h(x,y,z), \; \forall (x,y,z) \in \partial D$$

• **Problema esterno**. Sia *S* una superficie chiusa, D_e un dominio esterno di *S* (ovviamente $\partial D_i = \partial D_e = S$). In tal caso bisogna importe che $u(P) \to 0$, per $P \to \infty$.

Teorema 15. (*di unicita'*) Le soluzioni del problema interno di Dirichlet per l'equazione di Laplace o di Poisson sono uniche.

Dimostrazione. Supponiamo che esistano due soluzioni u_1 , u_2 , del problema interno, allora, anche $u = u_1 - u_2$ e' soluzione del problema interno, cioe', e' una funzione armonica. Infatti

$$\Delta u_1 = f, \ \Delta u_2 = f, \ \Delta (u_1 - u_2) = 0$$

allora $u = u_1 - u_2$ e' una funzione armonica. Inoltre per le condizioni di Dirichlet si ha

$$u_1 = g, \ u_2 = g \Rightarrow u = u_1 - u_2 = 0, \ \forall (x, y, z) \in \partial D$$

Per il teorema del massimo, siccome u assume il suo valore massimo (minimo) sulla frontiera in cui u = 0, allora u(x, y, z) = 0, $\forall (x, y, z) \in D$, da cui segue che $u_1 = u_2$, $\forall (x, y, z) \in D$.

Il teorema vale ancora nel caso del problema esterno ma bisogna modificare la dimostrazione.

9.3 La funzione di Green per il problema di Dirichlet

Sia D un dominio limitato e u(M) una funzione armonica con $S = \partial D$. Se $u(M) \in C^1(\overline{D})$ abbiamo provato (corollario 5) che vale

$$u(M_0) = \frac{1}{4\pi} \int_S \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{r} \right) \right] dS \tag{122}$$

dove $M_0 \equiv (x_0, y_0, z_0), r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} e(x, y, z)$ un punto sulla superficie S.

Supponiamo di avere una funzione $g(M, M_0)$ che abbia le seguenti proprieta':

- sia una funzione armonica per le variabili M in D, con derivate prime continue fino alla frontiera;
- sulla frontiera S assume il valore $-\frac{1}{4\pi r}$.

Applicando la seconda formula di Green alle funzioni armoniche $u \in g$ si ottiene

$$\int_{S} \left[u(M) \frac{\partial g(M, M_0)}{\partial n} - g(M, M_0) \frac{\partial u(M)}{\partial n} \right] \, dS = 0$$

poiche' su S, la funzione g vale $-\frac{1}{4\pi r},$ avremo che

$$\int_{S} \left[u(M) \frac{\partial g(M, M_0)}{\partial n} + \frac{1}{4\pi r} \frac{\partial u(M)}{\partial n} \right] dS = 0$$
(123)

Sottraendo la (123) nella (122) si ottiene

$$u(M_0) = -\int_S u(M) \frac{\partial}{\partial n} \left[\frac{1}{4\pi r} + g(M, M_0) \right] dS$$
(124)

La funzione

$$G(M, M_0) = \frac{1}{4\pi r} + g(M, M_0)$$
(125)

si chiama *formula di Green* del problema di Dirichlet per l'equazione di Laplace. In definitiva,

Definizione 5. Una funzione di Green del problema di Dirichlet per l'equazione di Laplace e' una funzione $G(M, M_0)$ tale che

- 1. sia una funzione armonica nella variabile M in tutti i punti di M, tranne in M_0 dove e' singolare;
- 2. verifichi la condizione al contorno

$$G(M, M_0) = 0, \ \forall M \in S$$

3. nel dominio D, la G e' data dalla (125)

$$G(M, M_0) = \frac{1}{4\pi r} + g(M, M_0)$$

con $r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}$ e $g(M, M_0)$ funzione armonica in D.

Per determinare la funzione di Green e' sufficiente determinare nella (125) la funzione $g(M, M_0)$, per cui

$$\Delta g(M, M_0) = 0, \ g(M, M_0)_{|_S} = -\frac{1}{4\pi r}, \ M_0 \in D$$

La soluzione del problema di Dirichlet (se esiste) puo' essere espressa con la formula di Green (124)

$$u(M_0) = -\int_S f_1(M) \frac{\partial G(M, M_0)}{\partial n} \, dS$$

 $\operatorname{con} u(M)_{|_S} = f_1(M).$

9.4 Unicita' del problema interno di Neumann

Consideriamo il problema interno di Neumann per l'equazione di Poisson

$$\begin{cases} \Delta u(M) = f(M), \ \forall M \in D_i, \ S = \partial D_i, f \in C^0\\ \frac{\partial u}{\partial n}\Big|_S = f_2(N), \ \forall N \in S, \ f_2 \in C^0 \end{cases}$$
(126)

Teorema 16. Il problema interno di Neumann ammette unicita' a meno di una costante.

Dimostrazione. Siano $u_1(M)$ e $u_2(M)$ due soluzioni di (126), allora $w = u_1 - u_2$ e' una funzione armonica in D con la condizione al bordo

$$\left.\frac{\partial w}{\partial n}\right|_S = 0$$

usando la prima formula di Green per le funzioni armoniche si ha

$$\int_{S} w \frac{\partial w}{\partial n} \ dS = \int_{D_i} |\nabla w|^2 \ dD$$

poiche' $\left.\frac{\partial w}{\partial n}\right|_S=0$ allora l'integrale e'0,da cui

$$\int_{D_i} |\nabla w|^2 \ dD = 0 \ \Rightarrow |\nabla w|^2 = 0$$

da cui

$$\left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 = 0 \iff \frac{\partial w}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial y} = \frac{\partial w}{\partial z}$$

cioe' w(M) = costante, $\forall M$, se il dominio e' connesso. Dato che $w = u_1 - u_2 = costante$, si ha l'unicita' della soluzione.

Definizione 6. Una soluzione per una PDE si dice *classica* se e' continua insieme alle sue derivate parziali prime e seconde.

Osservazione 3. Il problema interno di Neumann per l'equazione di Laplace non ammette sempre soluzioni classiche. Infatti, condizione necessaria per l'esistenza di soluzioni classiche e' che

$$\int_{S} \frac{\partial u}{\partial n} \, dS \, \Rightarrow \int_{S} f_2(N) \, dS = 0$$

9.5 Unicita' del problema esterno per l'equazione di Laplace

Consideriamo il problema esterno di Neumann per l'equazione di Laplace

$$\begin{cases} \Delta u(M) = 0, \ \forall M \in D_e \\ \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_S = f_2(N), \ \forall N \in S \end{cases}$$

si prova l'unicita'. I teoremi di unicita' valgono anche per il problema di Robin.

9.6 Cenni sull'equazione di Poisson

Consideriamo l'equazione di Poisson

$$\Delta u = f(x, y, z), \ \forall (x, y, z) \in D$$
(127)

L'integrale generale e' dato dalla somma di una funzione armonica ($\Delta u = 0$) e da un integrale particolare della (127). Si prova che un integrale particolare di (127) e'

$$u(x,y,z) = -\frac{1}{4\pi} \int_D \frac{f(\xi,\eta,z)}{r} \ dD$$

supposto che $f \in C^1(D)$.

10 L'equazione di Boltzmann

10.1 Elementi di teoria cinetica dei gas

Alla luce della moderna teoria atomica, la schematizzazione di un corpo con un numero finito di punti materiali e' la piu' realistica ma, a temperatura ambiente, alla pressione di 1 atm, in una mole di gas sono presenti $N \simeq 10^{19}$ atomi in 1 cm^3 (schema microscopico).

Supponiamo che le leggi della meccanica classica siano valide, allora avremo un sistema di N molecole che si muovono secondo le leggi della dinamica di Newton

$$\begin{cases} m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{x}_i, \dot{\mathbf{x}}_i, t), \ i = 1, \dots, N, \ \mathbf{x}_i \equiv (x_i, y_i, z_i) \\ \mathbf{x}_i(0) = \mathbf{x}_i^0, \ \dot{\mathbf{x}}_i(0) = \mathbf{v}_i^0 \end{cases}$$
(128)

che e' un sistema di N equazioni differenziali ordinarie del secondo ordine in 3N incognite $\mathbf{x}_i(t)$ che, sotto le ipotesi del teorema di Cauchy ($\mathbf{F}_i \in C^1$), ammette una soluzione unica.

Risolvere questo sistema con i piu' moderni computer (supposto di conoscere le forze \mathbf{F}_i) e' impossibile. Inoltre

- 1. anche se fossimo capaci di risolvere il sistema (128) dovremmo assegnare 6N condizioni iniziali e dovremmo quindi misurare simultaneamente posizione e velocita' iniziali di N molecole senza disturbare il loro stato.
- 2. anche se fossimo capici di conoscere le condizioni iniziali e calcolare il moto del sistema, questa informazione dettagliata sarebbe inutile perche' le conoscenze delle posizioni e velocita' delle singole molecole non dice nulla di cio' che realmente vogliamo sapere, per esempio, la pressione esercitata su una parete, la temperatura,

Per questo motivo ci viene di aiuto la *teoria cinematica dei gas* (parte della meccanica statistica).

Scopo della meccanica statistica e' di spiegare il comportamento macroscopico della materia in termini del moto e delle interazioni di un numero elevato di particelle. L'idea di base della meccanica statistica e' di fare delle medie, per esempio, assegniamo delle condizioni iniziali alle particelle di una distribuzione per un certo valore medio (velocita', temperatura, ...) con una certa variazione. Il risultato pratico di fare delle medie sara' quello di parlare di probabilita' invece di certezze. In questa descrizione una particella non avra' una posizione e una velocita' definita, ma sono differenti probabilita' di avere differenti posizioni e velocita'.

10.2 Probabilita' e certezze

In meccanica statistica useremo delle misure di probabilita' continue. Sia $\mathbf{z} = (z_1, \ldots, z_n)$ il vettore di tutte le variabili continue che caratterizzano

il nostro insieme (per esempio, $z_1 = \mathbf{x}_1, z_2 = \mathbf{x}_2, \ldots$). Introduciamo la densita' di probabilita' $P(\mathbf{z})$ in modo che

$$P(\mathbf{z})d^{n}\mathbf{z}$$

rappresenti la probabilita' che $\mathbf{z} \in [\mathbf{z}, \mathbf{z} + d\mathbf{z}]$, dove $d^n \mathbf{z}$ e' il volume della cella infinitesimale uguale al prodotto

$$dz_1 dz_2 \dots dz_n$$

Se \mathbf{z} varia nella regione Z dello spazio N-dimensionale, allora

$$\int_{Z} P(\mathbf{z}) \, d\mathbf{z} = 1, \ (ometto \ n) \quad . \tag{129}$$

Se consideriamo la densita' di probabilita' $P(\mathbf{z})$ possiamo calcolare i valori medi (o di aspettazione). Sia $\Phi(\mathbf{z})$ un'assegnata funzione di \mathbf{z} , allora il suo valore medio e'

$$\langle \Phi(\mathbf{z}) \rangle = \overline{\Phi(\mathbf{z})} = \int_{Z} P(\mathbf{z}) \Phi(\mathbf{z}) \, d\mathbf{z}$$
 (130)

Ma che succede se conosco le variabili con completa certezza? Ovvero, se \mathbf{z} assume con certezza il valore \mathbf{z}_0 , la densita' di probabilita' per $\mathbf{z} \neq \mathbf{z}_0$ sara' ovviamente 0. Ma d'altra parte la (129) deve essere soddisfatta. Ne segue che, per considerare il caso di certezza, la densita' di probabilita' non puo' essere una funzione ordinaria. Per questo motivo abbiamo bisogno di funzioni generalizzate o *distribuzioni*.

L'esempio piu' semplice e' la *delta di Dirac*, e' una funzione generalizzata che dipende da un parametro reale in modo tale che sia nulla per tutti i valori del parametro ad eccezione dello zero, ed il suo integrale sul parametro tra $-\infty$ e $+\infty$ sia uguale a 1. Introduciamo la delta di Dirac come

$$\delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0) = \lim_{\sigma \to 0} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}\right)^n \exp\left[-\frac{(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0)^2}{2\sigma^2}\right]$$
(131)

Poniamo n = 1, $\mathbf{z} = x$, $\mathbf{z}_0 = 0$, allora si ha

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right]$$

• se $x \neq 0$, allora

$$\lim_{\sigma \to 0} f(x) = 0$$

• se x = 0, allora

$$\lim_{\sigma\to 0} f(x) = +\infty$$

(la gaussiana diventa piu' piccata, perche' l'area deve valere 1)

in generale, si ha

$$\delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0) = \begin{cases} 0 \ se \ \mathbf{z} \neq \mathbf{z}_0 \\ \infty \ se \ \mathbf{z} = \mathbf{z}_0 \end{cases}$$

Sia $\Phi(\mathbf{z})$ una funzione continua in \mathbf{z}_0 allora, usando la (131), si prova che:

$$\int_{Z} \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_{0}) \Phi(\mathbf{z}) \, d\mathbf{z} = \Phi(\mathbf{z}_{0}) \tag{132}$$

Si noti che, pur utilizzando il simbolo di integrale, l'operazione non e' di integrazione ma di applicazione di un funzionale (δ) ad una funzione test (Φ), la delta di Dirac e' dunque una funzione generalizzata che trasforma la funzione test $\Phi(\mathbf{z})$ nel numero $\Phi(\mathbf{z}_0)$. In particolare,

- se $\Phi(\mathbf{z}) = 1$, allora $\int_{Z} \delta(\mathbf{z} \mathbf{z}_0) d\mathbf{z} = 1$;
- se $\Phi(\mathbf{z}) = \mathbf{z}$, allora $\int_Z \delta(\mathbf{z} \mathbf{z}_0) \mathbf{z} \, d\mathbf{z} = \mathbf{z}_0$;

Quindi $\delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0)$ e' la densita' di probabilita' che descrive la situazione in cui il valore medio di \mathbf{z} e' uguale a \mathbf{z}_0 . Inoltre, $\delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0)$ e' la densita' di probabilita' che descrive il fatto che la variabile \mathbf{z} assume *solo* il valore \mathbf{z}_0 .

10.3 Spazio delle fasi ed equazione di Liouville

Il sistema (128) di ODE puo' essere scritto sotto forma di 6N equazioni differenziali ordinarie del primo ordine sotto forma normale

$$\begin{cases} m_i \dot{\mathbf{v}}_i = \mathbf{F}_i \\ \dot{\mathbf{x}}_i = \mathbf{v}_i \\ \mathbf{x}_i(0) = \mathbf{x}_i^0, \ \mathbf{v}_i(0) = \mathbf{v}_i^0 \end{cases}$$
(133)

 $i = 1, \ldots, N$, nelle incognite $(\mathbf{x}_i(t), \mathbf{v}_i(t))$ (spazio delle fasi).

Supponiamo di conoscere le condizioni iniziali e in corrispondenza la soluzione del sistema (128), ovvero $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i(t)$, $\mathbf{v}_i = \dot{\mathbf{x}}_i(t)$, i = 1, ..., N, dove $\mathbf{x}_i(t)$ e le sue derivate sono funzioni note del tempo.

Ci chiediamo qual e' la densita' di probabilita' congiunta di trovare simultaneamente al tempo t la prima molecola sulla posizione \mathbf{x}_1 con velocita' \mathbf{v}_1 , la seconda molecola sulla posizione \mathbf{x}_2 con velocita' $\mathbf{v}_2, \ldots, l'N$ -esima molecola sulla posizione \mathbf{x}_N con velocita' \mathbf{v}_N . Ovviamente, "nella posizione \mathbf{x}_i con velocita' \mathbf{v}_i " significa che \mathbf{x}_i sta in $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i$, e \mathbf{v}_i , in $\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i + d\mathbf{v}_i$. Poiche' supponiamo di conoscere la traiettoria delle particelle, in questo caso la probabilita' si riduce alla certezza, che indichiamo con C

$$C(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, t) = C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N, t)$$

e quindi

$$C(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, t) = \prod_{k=1}^N \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k(t)) \delta(\mathbf{v}_k - \dot{\mathbf{x}}_k(t)) \quad .$$
(134)

Attenzione, la quantita' \mathbf{x}_k denota due cose:

- $\mathbf{x}_k(t)$ denota una costante al tempo t, come \mathbf{z}_0 in $\delta(\mathbf{z} \mathbf{z}_0)$;
- \mathbf{x}_k e' una variabile indipendente, che varia nel volume occupato come \mathbf{z} in $(\mathbf{z} \mathbf{z}_0)$.

La densita' di certezza C e' una funzione di 6N + 1 variabili che contiene le informazioni della (133). Infatti, per n = 1,

$$C(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, t) = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1(t))\delta(\mathbf{v}_1 - \dot{\mathbf{x}}_1(t))$$

moltiplicando per \mathbf{x}_1 ed integrando si ottiene

$$\int \mathbf{x}_1 C(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, t) \, d\mathbf{x}_1 \, d\mathbf{v}_1 = \int \mathbf{x}_1 \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1(t)) \, d\mathbf{x}_1 \int \delta(\mathbf{v}_1 - \dot{\mathbf{x}}_1(t)) \, d\mathbf{v}_1 = \mathbf{x}_1(t)$$

ovvero il valore medio coincide con $\mathbf{x}_1(t)$. Inoltre, la deviazione da $\mathbf{x}_1(t)$ e' nulla, infatti

$$\int (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1(t)) C(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, t) \ d\mathbf{x}_1 \ d\mathbf{v}_1 =$$
$$= \int (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1(t)) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1(t)) \ d\mathbf{x}_1 \int \delta(\mathbf{v}_1 - \dot{\mathbf{x}}_1(t)) \ d\mathbf{v}_1 = (\mathbf{x}_1(t) - \mathbf{x}_1(t)) = 0$$

Ma quali sono i vantaggi o svantaggi di usare la sola funzione certezza di 6N + 1 variabili, $C(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, t)$, con $\mathbf{x}_k = (x_k, y_k, z_k)$, invece di 6N funzioni di una variabile del tipo $\mathbf{x}_i(t)$, $\mathbf{v}_i(t)$?

• da un punto di vista intuitivo e' piu' facile immaginare uno sciame di particelle con assegnata posizione e velocita' al tempo t secondo la (133), mentre e' piu' difficile visualizzare un punto nello spazio a 6Ndimensioni, dove le coordinate sono

$$(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$$
, spazio delle fasi

- il vantaggio dello spazio delle fasi (e quindi della C) e' che uno stato del sistema (definito dalla posizione e dalla velocita' di tutte le particelle) e' un punto nello spazio delle fasi;
- se abbiamo delle incertezze sulla definizione della posizione e/o della velocita' delle particelle, allora lo schema basato sulla traiettoria (133) perde di significato, mentre la stessa incertezza puo' essere facilmente tenuta in conto nella descrizione basata sullo spazio delle fasi, semplicemente ampliando la densita' di probabilita' presente nella (134) in modo che solamente le posizioni e le velocita' medie abbiano un senso, e le deviazioni dai valori medi non siano zero.

Vogliamo adesso derivare un'equazione per la C che prende il nome di *equazione di Liouville*, in modo da rendere la descrizione nello spazio delle fasi indipendente dalla (133). Ricordiamo che

$$\frac{d}{dx}\prod_{j=1}^{N}f_j(x) = \sum_{j=1}^{N}\frac{df_j(x)}{dx}\prod_{k=1,k\neq j}^{N}f_k(x)$$

 posto

$$f_j(t) = \delta(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_j(t))\delta(\mathbf{v}_j - \dot{\mathbf{x}}_j(t))$$

possiamo esprimere la funzione certezza come

$$C = \prod_{j=1}^{N} f_j(t).$$

Vogliamo adesso costruire l'*equazione di Liouville* per la funzione certezza, pertanto calcoliamo

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N} \frac{df_j(t)}{dt} \prod_{k=1, k \neq j}^{N} f_k(t) =$$

$$= \sum_{j=1}^{N} \frac{d}{dt} \left[\delta(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_j(t)) \delta(\mathbf{v}_j - \dot{\mathbf{x}}_j(t)) \right] \prod_{k=1, k \neq j}^{N} f_k(t)$$

$$= \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\partial \delta(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_j(t))}{\partial \mathbf{x}_j} (-\dot{\mathbf{x}}_j) \delta(\mathbf{v}_j - \dot{\mathbf{x}}_j(t)) + \delta(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_j(t)) \frac{\partial \delta(\mathbf{v}_j - \dot{\mathbf{x}}_j(t))}{\partial \mathbf{v}_j} (-\ddot{\mathbf{x}}_j) \right] \prod_{k=1, k \neq j}^{N} f_k(t)$$
(135)

poiche' $\ddot{\mathbf{x}}_j = \frac{\mathbf{F}_j}{m}$ ed inoltre

$$\begin{aligned} (\mathbf{z} - \mathbf{z}_0)\delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0) &= 0 \ \Rightarrow \ (\mathbf{v}_j - \dot{\mathbf{x}}_j(t))\delta(\mathbf{v}_j - \dot{\mathbf{x}}_j(t)) = 0 \\ &\Rightarrow \ \dot{\mathbf{x}}_j(t)\delta(\mathbf{v}_j - \dot{\mathbf{x}}_j(t)) = \mathbf{v}_j\delta(\mathbf{v}_j - \dot{\mathbf{x}}_j(t)) \end{aligned}$$

Tornando alla (135) e sostituendo la relazione appena ottenuta, si ha

$$\sum_{j=1}^{N} -\frac{\partial \delta(\mathbf{x}_{j} - \mathbf{x}_{j}(t))}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{v}_{j} \delta(\mathbf{v}_{j} - \dot{\mathbf{x}}_{j}(t)) \prod_{k=1, k \neq j}^{N} f_{k}(t) + \\ -\sum_{j=1}^{N} \frac{\mathbf{F}_{j}}{m} \delta(\mathbf{x}_{j} - \mathbf{x}_{j}(t)) \frac{\partial \delta(\mathbf{v}_{j} - \dot{\mathbf{x}}_{j}(t))}{\partial \mathbf{v}_{j}} \prod_{k=1, k \neq j}^{N} f_{k}(t)$$

e' facile vedere che il fattore che moltiplica v_j e' $\frac{\partial C}{\partial \mathbf{x}_j}$ e il fattore che moltiplica $\frac{\mathbf{F}_j}{m}$ e' $\frac{\partial C}{\partial \mathbf{v}_j}$. Riscrivendo opportunamente l'equazione iniziale, si ottiene l'equazione di Liouville per la funzione certezza

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sum_{j=1}^{N} \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial C}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \sum_{j=1}^{N} \frac{\mathbf{F}_{j}}{m} \cdot \frac{\partial C}{\partial \mathbf{v}_{j}} = 0.$$
(136)

Ricordiamo che, $\mathbf{x}_j = (x_j, y_j, z_j)$ e $\mathbf{v}_j = (v_{xj}, v_{yj}, v_{zj})$. Da cui

$$\sum_{j=1}^{N} \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial C}{\partial \mathbf{x}_{j}} = \sum_{j=1}^{N} \left(v_{xj} \frac{\partial C}{\partial x} + v_{yj} \frac{\partial C}{\partial y} + v_{zj} \frac{\partial C}{\partial z} \right)$$

La (136) e' un'equazione differenziale alle derivate parziali del primo ordine lineare nelle variabili $\mathbf{x}_j \in \mathbf{v}_j$ che variano nello spazio delle fasi, t e' il tempo, \mathbf{F}_j e' la forza che assumiamo sia assegnata. Quindi se la condizione iniziale e' assegnata, cioe',

$$C(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, 0)$$

possiamo trovare la soluzione $C(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, t)$. Se conosciamo le condizioni iniziali per il sistema di particelle (133), allora

$$C(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, 0) = \sum_{k=1}^N \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^0) \delta(\mathbf{v}_k - \dot{\mathbf{x}}_k^0)$$

e inoltre la soluzione dell'equazione di Liouville (136) e'

$$C(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, t) = \sum_{k=1}^{N} \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k(t)) \delta(\mathbf{v}_k - \dot{\mathbf{x}}_k(t))$$

dove $\mathbf{x}_k(t)$ e $\dot{\mathbf{x}}_k(t)$ sono ottenute risolvendo il sistema (133). Inoltre la funzione C e' costante lungo le caratteristiche

$$\frac{d\mathbf{x}_j}{dt} = \mathbf{v}_j, \ \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = \frac{\mathbf{F}_j}{m}$$

quindi ad ogni istante la C e' una delta centrata in un punto dello spazio delle fasi che si muove lungo le caratteristiche $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_j(t)$, $\mathbf{v}_j = \mathbf{v}_j(t)$. Quindi i due schemi (133) e (136) sono completamente equivalenti.

Come gia' detto in precedenza, lo schema nello spazio delle fasi diventa importante se ho delle incertezze sulla definizione di posizione e velocita' delle particelle (come di solito e') e se si comincia a ragionare in termini di medie e probabilita'. In tal caso la funzione $C(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, t)$ viene rimpiazzata da $P(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, t)$ che e' una densita' di probabilita', ovvero

$$P(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, t) = P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N, t)$$
$Pd\mathbf{x}_k d\mathbf{v}_k$ rappresenta la probabilita' che nel sistema di particelle la particella 1 sia in $x_1, x_1 + dx_1$ con velocita' $v_1, v_1 + dv_1, \ldots$

Siccome noi considereremo tutte particelle identiche, la funzione P risultera' invariante per lo scambio di particelle; inoltre la P soddisfa l'equazione di Liouville

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \sum_{j=1}^{N} \mathbf{v}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_j} + \sum_{j=1}^{N} \frac{\mathbf{F}_j}{m} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_j} = 0$$
(137)

di conseguenza

- la densita' di probabilita' *P* rimane costante lungo lo spazio delle fasi (ovvero lungo le traiettorie nello spazio delle fasi);
- se consideriamo un volume centrato nello spazio delle fasi $\mathbf{z} = (\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$ di superficie $S(\mathbf{z})$ allora quando \mathbf{z} si muove, la superficie degenerera' ma il volume in esso racchiuso restera' lo stesso.

L'equazione di Louville non puo' essere utilizzata per calcoli pratici perche' la funzione P dipende da 6N + 1 variabili con $N \sim 10^{23}$, per questo motivo occorrono delle approssimazioni.

10.4 La gerarchia di BBGKY

Sia $\mathbf{z}_k = (\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$ punto dello spazio delle fasi, con $\mathbf{x}_k = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ e $\mathbf{v}_k = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$, dove

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= (x_1, y_1, z_1), \mathbf{v}_1 = (v_{x1}, v_{y1}, v_{z1}), \ 1 \to particella \ 1 \\ \mathbf{x}_2 &= (x_2, y_2, z_2), \mathbf{v}_2 = (v_{x2}, v_{y2}, v_{z2}), \ 2 \to particella \ 2 \\ \mathbf{x}_N &= (x_N, y_N, z_N), \mathbf{v}_N = (v_{xN}, v_{yN}, v_{zN}), \ N \to particella \ N \end{aligned}$$

quindi $\mathbf{z}_k = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$. Definiamo la densita' di probabilita' ridotta (o marginale) a 1 particella

$$P^{1}(\mathbf{z}_{1}) = \int P(\mathbf{z}_{1}, \mathbf{z}_{2}, \dots, \mathbf{z}_{N}) \, d\mathbf{z}_{2} d\mathbf{z}_{3} \dots d\mathbf{z}_{N}$$
$$P^{2}(\mathbf{z}_{1}, \mathbf{z}_{2}) = \int P(\mathbf{z}_{1}, \mathbf{z}_{2}, \dots, \mathbf{z}_{N}) \, d\mathbf{z}_{3} d\mathbf{z}_{4} \dots d\mathbf{z}_{N}$$

allora $P^1(\mathbf{z}_1)d\mathbf{z}_1$ e' la probabilita' di trovare la particella 1, in un volume $d\mathbf{z}_1$ centrato in \mathbf{z}_1 al tempo t, mentre $P^2(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2)d\mathbf{z}_1d\mathbf{z}_2$ e' la probabilita' di trovare la particella 1, in un volume $d\mathbf{z}_1$ centrato in \mathbf{z}_1 al tempo t e contemporaneamente la particella 2 in un volume $d\mathbf{z}_2$ centrato in \mathbf{z}_2 .

Facciamo la seguente ipotesi: le molecole sono delle sfere rigide di diametro σ , ne segue che due molecole sono impenetrabili e la loro distanza da centro a centro, non puo' essere minore di σ .

La funzione di distribuzione ridotta a 1 particella deve essere ottenuta integrando la funzione a N particelle su uno spazio delle fasi ridotto, cioe', privato della regione in cui le due sfere sono sovrapposte.

$$P^{(1)}(\mathbf{z}_1) = \int_{\Omega} P(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_N) \, d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N$$
$$P^{(2)}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) = \int_{\Omega'} P(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_N) \, d\mathbf{z}_3 d\mathbf{z}_4 \dots d\mathbf{z}_N$$

 con

$$\Omega = \{ |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| > \sigma, |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3| > \sigma, \dots, |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_N| > \sigma \}$$
(138)

se definiamo

$$\Omega_r = \{\mathbf{x}_r : |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_r| > \sigma\}$$
(139)

allora

$$\Omega = \Omega_2 \times \Omega_3 \times \dots \times \Omega_N \tag{140}$$

 \mathbf{e}

$$\Omega' = \Omega_3 \times \Omega_4 \times \dots \times \Omega_N. \tag{141}$$

Condizioni al contorno. Per la velocita', l'integrale viene fatto su tutto lo spazio delle velocita' e quindi la funzione densita' di probabilita' e' nulla sul contorno $(v \to \infty)$ in quanto la probabilita' di trovare una particella con velocita' $\pm \infty$ e' nulla.

Per quanto riguarda la posizione, l'integrale si puo' estendere ad un volume maggiore di quello occupato dalla particella e quindi la funzione densita' di probabilita' risulta ancora nulla su questo contorno superiore.

Riscriviamo l'equazione di Liouville

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \sum_{j=1}^{N} \mathbf{v}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_j} + \sum_{j=1}^{N} \frac{\mathbf{F}_j}{m} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_j} = 0$$
(142)

Supponiamo che il sistema sia isolato, ovvero le forze sono solo interne. Quindi \mathbf{F}_1 e' la forza esercitata sulla molecola 1 da tutte le altre. Si assume che le forze tra particelle siano derivabili da un potenziale a 2 particelle, in modo che la forza esercitata sulla molecola *i* da quella *j* e' data dal potenziale

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)$$
$$\mathbf{F}_i = -\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i}$$

Integriamo l'equazione di Liouville in $d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial P}{\partial t} d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N + \sum_{j=1}^N \int_{\Omega} \mathbf{v}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_j} d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N + \sum_{j=1}^N \int_{\Omega} \frac{\mathbf{F}_j}{m} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_j} d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N = 0$$
(143)

Analizziamo i singoli contributi:

• il primo addendo della (143) dara' facilmente:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial P}{\partial t} \, d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N = \frac{\partial P^1}{\partial t} (\mathbf{z}_1) \tag{144}$$

• il terzo addendo della (143) lo possiamo riscrivere come

$$\int_{\Omega} \frac{\mathbf{F}_1}{m} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_1} d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N + \sum_{j=2}^N \int_{\Omega} \frac{\mathbf{F}_j}{m} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_j} d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N \quad (145)$$

Il primo addendo di (145) lo possiamo riscrivere come

$$-\frac{1}{m}\int_{\Omega}\frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_{1}}\cdot\left(\frac{\partial\Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_{1}}+\frac{\partial\Phi_{13}}{\partial \mathbf{x}_{1}}+\cdots+\frac{\partial\Phi_{1N}}{\partial \mathbf{x}_{1}}\right)d\mathbf{z}_{2}d\mathbf{z}_{3}\ldots d\mathbf{z}_{N}$$

analizziamo il termine

$$\int_{\Omega} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \frac{\partial \Phi_{13}}{\partial \mathbf{x}_1} \ d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N =$$

scambiando $\mathbf{x}_3 \rightarrow \mathbf{x}_2, \, \mathbf{x}_2 \rightarrow \mathbf{x}_3$, si ha

$$= \int_{\Omega} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_1}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_2, \dots) \cdot \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_1} d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N$$

ma $P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_2, ...) = P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, ...)$ perche' le particelle sono indistinguibili, quindi (sfruttando anche lo scambio effettutato) il primo termine della (145) diventa

$$= -\frac{2}{m} \int_{\Omega} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_{1}} \cdot \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_{1}} d\mathbf{z}_{2} d\mathbf{z}_{3} \dots d\mathbf{z}_{N} - \frac{1}{m} \int_{\Omega} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_{1}} \cdot \left(\frac{\partial \Phi_{14}}{\partial \mathbf{x}_{1}} + \dots + \frac{\partial \Phi_{1N}}{\partial \mathbf{x}_{1}}\right) d\mathbf{z}_{2} d\mathbf{z}_{3} \dots d\mathbf{z}_{N} =$$

scambiando $\mathbf{x}_4 \to \mathbf{x}_2,\, \mathbf{x}_2 \to \mathbf{x}_4$ e cosi' via fino ad ottenere

$$= -\frac{N-1}{m} \int_{\Omega} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_1} \, d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N =$$
$$= -\frac{N-1}{m} \int_{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| > \sigma} \int_{\Omega'} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_1} \, d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N =$$

poiche' l'integrale su Ω' non dipende dal vettore \mathbf{v}_1 (vedi (141), possiamo uscire dall'integrale $\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1}$, si ha

$$= -\frac{N-1}{m} \int_{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| > \sigma} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} \left(\int_{\Omega'} P d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N \right) \cdot \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_1} d\mathbf{z}_2 =$$
$$= -\frac{N-1}{m} \int_{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| > \sigma} \frac{\partial P^{(2)}}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_1} d\mathbf{z}_2 \quad . \tag{146}$$

il secondo addendo della (145) lo possiamo riscrivere come

$$\sum_{j=2}^{N} \int_{\Omega} \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_{j}} \cdot (P\mathbf{F}_{j}) d\mathbf{z}_{2} d\mathbf{z}_{3} \dots d\mathbf{z}_{N}$$

ma per il teorema della divergenza si ha

$$\int_{\Omega} \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_j} \cdot (P\mathbf{F}_j) d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N = \int_{\partial \Omega} \frac{1}{m} (P\mathbf{F}_j) \cdot \hat{n}_j \ dS$$

poiche' sulla frontiera di ΩP e' nulla (poiche' la probabilita' di avere velocita' $\pm \infty$ e' zero), questo termine vale zero. In definitiva, il terzo addendo di (143) e'

$$\sum_{j=1}^{N} \int_{\Omega} \frac{\mathbf{F}_{j}}{m} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_{j}} = -\frac{N-1}{m} \int_{|\mathbf{x}_{1}-\mathbf{x}_{2}| > \sigma} \frac{\partial P^{(2)}}{\partial \mathbf{v}_{1}} \cdot \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_{1}} d\mathbf{z}_{2} \quad . \tag{147}$$

• il secondo addendo di (143) lo possiamo riscrivere

$$\int_{\Omega} \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_1} \, d\mathbf{z}_2 \dots d\mathbf{z}_N + \sum_{j=2}^N \int_{\Omega} \mathbf{v}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_j} \, d\mathbf{z}_2 \dots d\mathbf{z}_N \tag{148}$$

Indichiamo

$$(I) = \int_{\Omega} \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_1} \, d\mathbf{z}_2 \dots d\mathbf{z}_N \tag{149}$$

$$(II) = \sum_{j=2}^{N} \int_{\Omega} \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_{j}} \, d\mathbf{z}_{2} \dots d\mathbf{z}_{N}$$
(150)

1. Analizziamo termine (I)

l'obiettivo e' di uscire dall'integrale il termine $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1}$, in modo da ottenere $P^{(1)}$ per integrazione. Questo non si puo' fare banalmente poiche' il dominio di integrazione Ω (vedi (139), (140)) e' il prodotto dei volumi

$$\Omega_r = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_r| > \sigma \quad r = 2, .., N$$

che dipendono da \mathbf{x}_1 . Bisogna applicare il teorema di derivazione sotto il segno di integrale che, nel caso piu' semplice r = 2, per una $\mathbf{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ ci dara':

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{1}} \cdot \int_{\Omega_{2}} \mathbf{F}(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}) d\mathbf{x}_{2} = \int_{\Omega_{2}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{1}} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}) d\mathbf{x}_{2} - \int_{S_{2}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S}_{2}$$
(151)

dove

$$S_r = \{\mathbf{x}_r : |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_r| = \sigma\}$$
, $r = 2, ...N$ (152)

e $d\mathbf{S}_r$ e ' il vettore elemento di superficie.

Ora il nostro caso e' ancora piu' complicato perche' la funzione $\mathbf{F} = \mathbf{v}_1 P$ e noi abbiamo un integrale su N-1 variabili $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, ..., \mathbf{x}_N$ e rispettive velocita' e le superfici sono N-1. Quindi avremo:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{1}} \cdot (\mathbf{v}_{1}P) \right) d\mathbf{x}_{2} d\mathbf{x}_{3} ... d\mathbf{x}_{N} d\mathbf{v}_{2} ... d\mathbf{v}_{N} =$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{1}} \cdot (\mathbf{v}_{1}P^{(1)}) + \int_{S_{2}} \mathbf{v}_{1}P \cdot d\mathbf{S}_{2} d\mathbf{x}_{3} ... d\mathbf{x}_{N} d\mathbf{v}_{2} ... d\mathbf{v}_{N} +$$

$$+ \int_{S_{3}} \mathbf{v}_{1}P \cdot d\mathbf{S}_{3} d\mathbf{x}_{2} d\mathbf{x}_{4} ... d\mathbf{x}_{N} d\mathbf{v}_{2} ... d\mathbf{v}_{N} + ... +$$

$$+ \int_{S_{N}} \mathbf{v}_{1}P \cdot d\mathbf{S}_{N} d\mathbf{x}_{2} d\mathbf{x}_{3} ... d\mathbf{x}_{N-1} d\mathbf{v}_{2} ... d\mathbf{v}_{N} =$$

$$= \mathbf{v}_{1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{1}} P^{(1)} + \sum_{i=2}^{N} \int_{S_{i}} \mathbf{v}_{1} P^{(2)} \cdot d\mathbf{S}_{i} d\mathbf{v}_{i} \quad (153)$$

dove

per
$$i = 2 \Rightarrow P^{(2)} = P^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t)$$

per $i = 3 \Rightarrow P^{(2)} = P^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3, t)$

Poiche' le probabilita' sono indistinguibili, possiamo rinominare la particella 3 come 2 e cosi' via, e ottenere cosi' che tutti gli (N - 1) integrali danno lo stesso contributo e quindi si ha che

$$\sum_{i=2}^{N} \int_{S_i} \mathbf{v}_1 P^{(2)} \cdot d\mathbf{S}_i d\mathbf{v}_i = (N-1) \int_{S_2} \mathbf{v}_1 P^{(2)} \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{v}_2 \qquad (154)$$

In definitiva il termine (I) si scrive :

$$(I) = \mathbf{v}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} P^{(1)} - (N-1) \int_{S_2} \mathbf{v}_1 P^{(2)} \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{v}_2$$
(155)

2. Analizziamo il termine (II)

Osserviamo che per j = 2, si ha

$$\int_{\Omega} \mathbf{v}_2 \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_2} \, d\mathbf{z}_2 \dots d\mathbf{z}_N = \int_{\Omega} \frac{\partial (P \mathbf{v}_2)}{\partial \mathbf{x}_2} \, d\mathbf{z}_2 \dots d\mathbf{z}_N =$$

Per il teorema della divergenza si ha

$$= \int_{S_2} P \mathbf{v}_2 \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{v}_2 \ d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N = \int_{S_2} P^{(2)} \mathbf{v}_2 \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{v}_2 =$$

e siccome tutte le molecole sono identiche

$$(II) = (N-1) \int_{S_2} P^{(2)} \mathbf{v}_2 \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{v}_2$$

In definitiva la (148) diventa

$$(N-1)\int_{S_2} P^{(2)}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial P^{(1)}}{\partial \mathbf{x}_1} \quad . \tag{156}$$

Conclusione

Abbiamo integrato l'equazione di Liouville (137) in $d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N$. Usando le (147), (156) l'equazione (143) diventa

$$\frac{\partial P^{(1)}}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial P^{(1)}}{\partial \mathbf{x}_1} + (N-1) \int \int_{S_2} P^{(2)}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{v}_2 + \frac{N-1}{m} \int_{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| > \sigma} \frac{\partial P^{(2)}}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}_1} d\mathbf{x}_2 d\mathbf{v}_2 = 0$$
(157)

cosi' facendo (integrando) abbiamo ottenuto un'equazione nelle due incognite $P^{(1)} \in P^{(2)}$. Per determinare la $P^{(2)}$ si dovrebbe integrare l'equazione di Liouville in $d\mathbf{z}_3 \dots d\mathbf{z}_N$, ma cosi' facendo si otterrebbe un'altra equazione integrale che conterrebbe la densita' di probabilita' a tre particelle $P^{(3)}$.

Si trova una gerarchia di equazioni *non chiuse* in cui ogni equazione dipende dalla successiva, che prende il nome di *Bogoliubov - Born - Green - Kirkwood - Yvon* (BBGKY).

Nel caso di sfere rigide si suppone che il potenziale sia nullo per $|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| > \sigma$ e quindi nella (157) l'ultimo termine e' nullo, mentre il termine

$$Q = (N-1) \int \int_{S_2} P^{(2)}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{v}_2$$

dara' un contributo non nullo su S_2 ovvero quando $|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| = \sigma$, cioe' nel caso di urto e per questo si chiama **termine/integrale collisionale**.

10.5 L'equazione di Boltzmann

Abbiamo ricavato l'equazione di BBGKY ma dobbiamo fare ulteriori ipotesi per ottenere un'equazione chiusa

$$\frac{\partial P^{(1)}}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial P^{(1)}}{\partial \mathbf{x}_1} + (N-1) \int \int_{S_2} P^{(2)}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot d\mathbf{S}_2 d\mathbf{V}_2 = 0 \quad (158)$$

dobbiamo valutare l'integrale sulla superficie $S_2 = \{\mathbf{x}_2 : |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| = \sigma\}$. Definiamo la velocita' relativa alla particella $\mathbf{V} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$, inoltre, per semplicita' ci poniamo nel sistema di riferimento solidale con la particella 1 (in cui $\mathbf{v}_1 = 0$). Siccome tutte le particelle hanno diametro σ , l'integrale su S_2 dara' un contributo quando avverra' un urto tra la particella 1 e 2. Per questo motivo l'integrale su S_2 si chiama **termine collisionale** (il versore \hat{n}_2 e' uscente dalla superficie S_2). Distinguiamo due situazioni

- 1. Se l'urto sta per iniziare, allora $\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S}_2 = \mathbf{V} \cdot \hat{n}_2 d\mathbf{S}_2 < 0$
- 2. Se l'urto e' appena avvenuto, allora $\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S}_2 = \mathbf{V} \cdot \hat{n}_2 d\mathbf{S}_2 > 0$

Quindi l'integrale su S_2 puo' essere suddiviso in due contributi

- 1. S_2^- punti della superficie S_2 con $\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S}_2 < 0$, prima dell'urto;
- 2. S_2^+ punti della superficie S_2 con $\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S}_2 > 0$, dopo l'urto;

il termine collisionale diventa

$$(N-1) \left[\int \int_{S_2^+} P^{(2)} |\mathbf{V} \cdot \hat{n}| dS_2 d\mathbf{V}_2 - \int \int_{S_2^-} P^{(2)} |\mathbf{V} \cdot \hat{n}| dS_2 d\mathbf{V}_2 \right]$$
(159)

con $P^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_2, t)$. Indichiamo con

1. \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 le velocita' prima dell'urto;

2. \mathbf{v}'_1 , \mathbf{v}'_2 le velocita' dopo l'urto

Su S_2^+ (dopo l'urto), abbiamo $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \sigma \hat{n}$, quindi

$$P^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) = P^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1', \mathbf{x}_1 + \sigma \hat{n}, \mathbf{v}_2', t)$$

con $\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + g_1(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2), \ \mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_2 + g_2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2),$ quindi

$$P^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) = P^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1', \mathbf{x}_1 + \sigma \hat{n}, \mathbf{v}_2', t) = P^{'(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1', \mathbf{v}_1',$$

La (158) e la (159) diventano

$$\frac{\partial P^{(1)}}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial P^{(1)}}{\partial \mathbf{x}_1} + (N-1) \left[\int \int_{S_2^+} P^{(2)} |\mathbf{V} \cdot \hat{n}| dS_2 d\mathbf{V}_2 - \int \int_{S_2^-} P^{(2)} |\mathbf{V} \cdot \hat{n}| dS_2 d\mathbf{V}_2 \right] = 0$$
(160)

A questo punto dobbiamo fare alcune ipotesi fisiche

 Caos molecolare (Stosszahlansatz-Boltzmann). Se il potenziale di interazione tra 2 particelle e' a corto raggio, allora le 2 particelle prima di collidere non hanno nessuna correlazione, ovvero ciascuna non conosce l'esistenza dell'altra. In tal caso le densita' di probabilita' a 2 particelle si puo' scrivere come il prodotto di due densita' di probabilita' a 1 particella. L'ipotesi di caos molecolare e' ⁸

$$P^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_2, t) = P^{(1)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, t)P^{(2)}(\mathbf{x}_2, \mathbf{v}_2, t)$$
(161)

- 2. Supponiamo che $\sigma \to 0$, (diametro delle sfere rigide tende a zero), allora $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \sigma \hat{n} \to \mathbf{x}_1$ e le due superfici S_2^+ e S_2^- si ricombinano;
- 3. Limite di Grad. Supponiamo che $N \to \infty$ con $N\sigma^2 = finito$, in tal caso $N 1 \sim N$ ed inoltre,

$$N \int \int_{S_2^+} \dots$$

e' finito perche' l'integrale su una superficie sferica e' $\sim \sigma^2.$

L'ipotesi di caos molecolare ci dice che l'unica incognita che rimane nella (160) e' la $P^{(1)}$, definendo $P = P^{(1)}$ e sfruttando le altre ipotesi, l'equazione (160) diventa:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_1} = N \int \int_{S_2^+} [P'(1)P'(2) - P(1)P(2)] (\mathbf{V} \cdot \hat{n}) dS_2 d\mathbf{V}_2 \quad (162)$$

con $P(1) = P(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, t), P(2) = P(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_2, t), P'(1) = P(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}'_1, t), P'(2) = P(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}'_2, t).$

Solitamente e' utilizzata un'altra funzione integrante fche e' correlata aPda

$$f = NmP$$

dove N e' il numero di molecole, m e' la massa molecolare. La condizione di normalizzazione

$$\int P d\mathbf{x} d\mathbf{v} = 1$$

diventa

$$\int f d\mathbf{x} d\mathbf{v} = Nm = M \tag{163}$$

dove M e' la massa totale del gas. L'equazione di Boltzmann si scrive

$$\frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial \mathbf{x}_1} = Q(f, f)$$
(164)

⁸Invece il teorema della probabilita' composta dice che $\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(B)\mathbb{P}(B|A)$



Figura 15: Sfera di protezione e libero cammino medio

$$Q(f,f) = \frac{1}{m} \int_{S_2^+} [f(\mathbf{v}_1')f(\mathbf{v}_2') - f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2)] |(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \hat{n}| \, dS_2 d\mathbf{v}_2 \quad (165)$$

dove \mathbf{v}_1 e' la velocita' della particella 1 prima dell'urto, \mathbf{v}_2 e' la velocita' della particella 2 prima dell'urto, \mathbf{v}'_1 e' la velocita' della particella 1 dopo l'urto, \mathbf{v}'_2 e' la velocita' della particella 2 dopo l'urto e Q(f, f) e' l'operatore collisionale. Storicamente questa equazione fu ricavata da Ludwing Boltzmann (1884 - 1906 [3]).

10.6 Libero cammino medio di un sistema di sfere rigide

Definizione 7. Il libero cammino medio l e' la distanza media percorsa da una sfera S_1 tra due collisioni consecutive.

Supponiamo di avere un sistema formato da S_i , i = 1, ..., N sfere rigide, tutte di diametro σ , inoltre, assumiamo che S_1 si muova rispetto a tutte le altre sfere S_i , $i \neq 1$, che sono ferme. L'urto avviene quando la distanza tra i centri delle due sfere e' pari a σ . Possiamo introdurre la sfera di protezione di raggio σ e centro 2, e considerare la sfera 1 puntiforme. Quindi l'urto tra S_2 e S_1 , avviene quando il punto S_1 tocca la sfera di protezione (di centro S_2 e raggio σ) (vedi figura 15). Se il punto S_1 percorre una distanza media tra due collisioni pari a l, vuol dire che nel cilindro di base $\pi\sigma^2$ e altezza lc'e' una sola molecola, cioe' S_1 . Se n e' il numero di molecole per unita' di volume V, $n = \frac{N}{V}$, allora

$$n\pi\sigma^2 l \simeq 1 \quad \Rightarrow \quad l \simeq \frac{1}{n\pi\sigma^2} = \frac{V}{N\pi\sigma^2}$$
 (166)

10.7 Ancora sul limite di Grad

L'equazione di Boltzmann e' stata ricavata facendo il cosiddetto *limite di Grad* (1943).

$$N \to \infty, \ \sigma \to 0, \ con \ N\sigma^2 \to finito$$

Qual'e' il significato di questo limite? Definiamo

- V_0 , volume occupato dal gas;
- σ , diametro delle molecole;
- N, numero totale di molecole;
- $N\sigma^3$, volume occupato dal gas;
- $n = \frac{N}{V_0}$, densita' particellare del gas;
- $\frac{1}{n} = \frac{V_0}{N}$, volume disponibile per molecole del gas.

Il gas e' rarefatto se $N\sigma^3 \ll V_0$, ovvero occupa una piccola porzione del volume disponibile. Quindi, $N\sigma^3 \rightarrow 0$. Ma puo' accadere che:

- i) $N\sigma^2 \rightarrow b > 0$ (utilizzato per ricavare l'equazione di Boltzmann), in tal caso il $l.c.m. = \frac{V_0}{\pi N \sigma^2}$ e' finito, cioe' ci sono un numero significativo di collisioni;
- ii) $N\sigma^2 \to 0$, in tal caso il $l.c.m. \to \infty$, siamo in assenza di collisioni.

Tra i due casi, il piu' significativo e' il caso i). Se il gas e' rarefatto, si ha

$$N\sigma^3 << V_0 \Rightarrow \frac{1}{n} = \frac{V_0}{N} >> \sigma^3$$

il volume disponibile per molecole $\left(\frac{1}{n}\right)$ e' molto piu' grande del volume delle singole molecole. Quindi, in tal caso, le collisioni binarie sono le piu' probabili (per questo ha senso la $P^{(2)}$) come pure e' pensabile l'ipotesi di caos molecolare. Per gas molto *densi* allora ha senso studiare funzioni di distribuzione a piu' particelle.

Si puo' dimostrare che per un gas *ideale in equilibrio termico* (pressione e temperatura), per $N \to \infty$ vale l'ipotesi di caos molecolare ([2] pag.21).

Se il gas non e' in equilibrio termico (come nel caso di un flusso in un canale o nel caso di un gas che contiene un aereo in volo) non ci sono distribuzioni certe e l'unico modo di descrivere un gas rarefatto e' con l'equazione di Boltzmann. Quindi l'equazione di Boltzmann descrive i gas rarefatti (anche al di fuori dell'equazione di equilibrio termico), come accade



Figura 16: Limiti del numero di Knudsen per modelli matematici

- nell'atmosfera ad alta quota (applicazioni aereo spaziali);
- nei micro electro mechanical system (MEMS) con dimensioni $10^{-6} \div 10^{-3} m$;
- nello studio di aereosol con particelle di dimensioni $0,001\mu m \div 50\mu m$ che si muovono nell'aria (particolari inquinanti, polveri sottili, ...) Ad esempio, un volume $V_0 = 1 \ cm^3$ di aria al livello del mare contiene $N \simeq 10^{20}$ molecole, con diametro $\sigma \simeq 10^{-8} \ cm$

$$N\sigma^2 = 10^4 cm^2$$
, $N\sigma^3 = 10^{-4} cm^3 << V_0$

I casi limite dell'equazione di Boltzmann che si ottengono sono

- 1. gas estremamente rarefatto $l.c.m. \rightarrow \infty$, non si hanno collisioni;
- 2. gas denso, descrizione del continuo (equazione di Navier-Stokes-Fourier)

Se L e' la lunghezza caratteristica del sisteam, definiamo il numero di Knudsen

$$K = \frac{l.c.m}{L}$$

la tabella (16) riassume schematicamente i regimi di applicazione di vari modelli matematici.

10.8 Collisioni binarie elastiche

Consideriamo l'urto tra due sfere rigide di uguale massa, chiamiamo

- $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ le velocita' prima dell'urto tra le particelle 1 e 2;
- $\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2$ le velocita' dopo l'urto tra le particelle 1 e 2;

Nel caso di urto elastico si conserva la quantita' di moto e l'energia cinetica

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_1' + \mathbf{v}_2' \\ \mathbf{v}_1^2 + \mathbf{v}_2^2 = \mathbf{v}_1'^2 + \mathbf{v}_{2}'^2 \end{cases}$$
(167)

e' un sistema di 4 equazioni in 6 incognit
e $\mathbf{v}_1',\mathbf{v}_2'.$ La prima equazione (167)₁ e' soddisfatta ponendo

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 + C\hat{n} \\ \mathbf{v}_2' = \mathbf{v}_2 - C\hat{n} \end{cases}$$
(168)

dove $\hat{n} \in C$ sono da determinare. Se inseriamo queste equazioni nella $(167)_2$ si ottiene

$$C\hat{n}\cdot(\mathbf{v}_1-\mathbf{v}_2)+C^2=0$$

se $C \neq 0$ (che e' vero se l'urto avviene realmente)

$$C = -\hat{n} \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) = -\hat{n} \cdot \mathbf{V}$$

dove $\mathbf{V}=\mathbf{v}_1-\mathbf{v}_2$ velocita' relativa prima dell'urto che inserita nella (168) dara'

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 - \hat{n}(\hat{n} \cdot \mathbf{V}) \\ \mathbf{v}_2' = \mathbf{v}_2 + \hat{n}(\hat{n} \cdot \mathbf{v}) \end{cases}$$
(169)

che sono proprio le relazioni cercate

$$\mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 + g_1(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$$
$$\mathbf{v}_2' = \mathbf{v}_2 + g_2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$$

Per trovare il significato di \hat{n} calcoliamo

$$\mathbf{V}' = \mathbf{v}_1' - \mathbf{v}_2'$$

la velocita' relativa dopo l'urto ed utilizzando la (168)

$$\mathbf{V}' = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 - 2\hat{n}(\hat{n} \cdot \mathbf{V}) = \mathbf{V} - 2\hat{n}(\hat{n} \cdot \mathbf{V})$$
(170)

moltiplichiamo la (170) scalarmente per \vec{n}

$$\mathbf{V}' \cdot \hat{n} = \mathbf{V} \cdot \hat{n} - 2(\hat{n} \cdot \mathbf{V}) = -\hat{n} \cdot \mathbf{V}$$
(171)

quindi le componente di ${\bf V}$ e' ${\bf V}'$ lungo \hat{n} sono opposte, infatti

$$\mathbf{V} \cdot \hat{n} = |\mathbf{V}| |\hat{n}| \cos \theta = |\mathbf{V}| \cos \theta$$
$$\overline{AH} = \overline{AB} \cos \theta = |\mathbf{V}| \cos \theta$$

ovvero

$$AH = \mathbf{V} \cdot \hat{n} \ (componente \ di \ \mathbf{V} \ lungo \ \hat{n})$$

le componenti di $\mathbf{V} \in \mathbf{V}'$ perpendicolari a \hat{n} sono ottenute dalla (170) moltiplicando per \hat{t} (con $\hat{n} \cdot \hat{t} = 0$), ovvero

$$\mathbf{V}' \cdot \hat{t} = \mathbf{V} \cdot \hat{t} - 2\hat{n} \cdot \hat{t}(\hat{n} \cdot \mathbf{V})$$
$$\mathbf{V}' \cdot \hat{t} = \mathbf{V} \cdot \hat{t}$$
(172)

quindi si ricava che le componenti di ${\bf V}$ e di ${\bf V}'$ lungo \hat{t} sono uguali. Proviamo che

$$|\mathbf{V}| = |\mathbf{V}'| \tag{173}$$

Infatti,

$$\mathbf{V} = V_n \hat{n} + V_t \hat{t}$$

~

dove $V_n = \hat{n} \cdot \mathbf{V} \in V_t = \hat{t} \cdot \mathbf{V}$

$$|\mathbf{V}|^2 = V_n^2 + V_t^2 = (\hat{n} \cdot \mathbf{V})^2 + (\hat{t} \cdot \mathbf{V})^2$$

Analogamente

$$\mathbf{V}' = V_n'\hat{n} + V_t'\hat{t}$$

dove $V'_n = \hat{n} \cdot \mathbf{V}' \in V'_t = \hat{t} \cdot \mathbf{V}'$

$$|\mathbf{V}'|^2 = V_n'^2 + V_t'^2 = (\hat{n} \cdot \mathbf{V}')^2 + (\hat{t} \cdot \mathbf{V}')^2$$

Dalla (172) e (173), ricaviamo

$$|\mathbf{V}'|^2 = (\hat{n} \cdot \mathbf{V})^2 + (\hat{t} \cdot \mathbf{V})^2 = |\mathbf{V}|^2$$

In definitiva ho un urto speculare, \hat{n} biseca le linee rette dirette con $-\mathbf{V} \in \mathbf{V}'$. L'angolo θ determina completamente le componenti lungo \hat{n} . Ma per trovare θ occorre considerare le leggi di interazione tre le 2 sfere. In definitiva,

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 - \hat{n}[\hat{n} \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)] \\ \mathbf{v}_2' = \mathbf{v}_2 - \hat{n}[\hat{n} \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)] \end{cases}$$
(174)

che definisce una trasformazione lineare T da $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \to (\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2)$. Infatti, se

 $\hat{n} = (\alpha, \beta, \gamma)$

$$\hat{n} \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) = \alpha (v_{1x} - v_{2x}) + \beta (v_{1y} - v_{2y}) + \gamma (v_{1z} - v_{2z})$$

da cui

$$\begin{pmatrix} v'_{1x} \\ v'_{1y} \\ v'_{1z} \\ v'_{2x} \\ v'_{2y} \\ v'_{2z} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} v_{1x} \\ v_{1y} \\ v_{1z} \\ v_{2x} \\ v_{2y} \\ v_{2z} \end{pmatrix}, \quad \mathbb{R}^{6 \times 6}$$
(175)

Definiamo la trasformazione inversa T^{-1} da $(\mathbf{v}_1',\mathbf{v}_2')\to (\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2),$ si ottiene scambiando

$$\mathbf{v}_1 \longleftrightarrow \mathbf{v}_1', \mathbf{v}_2 \longleftrightarrow \mathbf{v}_2'$$

ottenendo

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1' - \hat{n}[\hat{n} \cdot (\mathbf{v}_1' - \mathbf{v}_2')] \\ \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_2' + \hat{n}[\hat{n} \cdot (\mathbf{v}_1' - \mathbf{v}_2')] \end{cases}$$
(176)

si vede subito che Te T^{-1} hanno stessi coefficienti e quindi $T^{-1}=T,$ da cui

$$T^2 = TT = TT^{-1} = I$$

dal teorema di Binet

$$(\det T)^2 = 1 \Rightarrow |\det T| = 1$$

Ma si puo' provare che

$$T = \frac{\partial(\mathbf{v}_1', \mathbf{v}_2')}{\partial(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = J$$

dove Je' la matrice Jacobiana, con de
t $T=\det J,$ da cui

$$d\mathbf{v}_1' d\mathbf{v}_2' = |J| d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 = d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \tag{177}$$



Figura 17: Urto tra sfere rigide

Possibile tema di approfondimento 6.

• Urto tra 2 sfere rigide([1] pag. 146)

Se le due sfere hanno uguale raggio R, il potenziale di interazione tra le due sfere e':

$$U(\rho) = \begin{cases} 0 \quad \rho > 2R \\ \\ \infty \quad \rho \le 2R \end{cases}$$
(178)

dove ρ e' la distanza tra i due centri delle sfere. Poiche' la sfera non puo' penetrare nell'altra, la traiettoria consiste in due rette simmetriche rispetto al raggio passante per il punto di contatto tra le due sfere, dove l'angolo di incidenza α e' uguale a quello di riflessione (vedi figura 17).

10.9 Teoria cinetica dei gas perfetti

La teoria cinetica dei gas descrive un gas come un gran numero di piccole particelle (atomi o molecole) che sono in costante movimento casuale. Le particelle muovendosi urtano tra di loro e con le pareti del contenitore. La teoria cinetica dei gas spiega le principali proprieta' macroscopiche dei gas quali *pressione* e *temperatura*.

Il gas non ha un volume proprio, la densita' dipende dalle forze tra le particelle. Ricordiamo che l'energia totale del sistema e' data dalla somma dell'energia cinetica e quella potenziale, ovvero:

$$E = E_c + E_p$$

Nel caso di un gas ideale o perfetto l'energia di interazione tra le particelle e' trascurabile rispetto a quella cinetica

$$E = E_c + E_p \simeq E_c$$

il che significa che le particelle si muovono di moto rettilineo uniforme, con una probabilita' di urto tra particelle quasi nulla, fino a quando urtano le



Figura 18: Le molecole di un gas perfetto monoatomico si muovono di moto rettilineo uniforme fino a quando rimbalzano elasticamente su una delle pareti.

pareti del contenitore (vedi fig. (18) a)). In pratica un gas reale si comporta come ideale quando e' abbastanza rarefatto (poco denso). Supponiamo che il gas sia monoatomico e il contenitore sia un cubo di lato l. Calcoliamo la pressione d'urto, spiegata dalla teoria cinetica dei gas come conseguenza delle forze esercitate dalle collisioni delle molecole del gas con le pareti del recipiente. Consideriamo una molecola di massa m che parte dalla faccia Adel cubo (x=0) arriva nella faccia opposta B (x = l) dove avviene un urto elastico in cui si conservano l'energia cinetica e la quantita' di moto (vedi (167)). In un urto elastico la componente della quantita' di moto ortogonale alla parete (in questo caso v_x) si inverte di segno, mentre quella parallela (v_t) rimane invariata (vedi (171), (172)), quindi

$$mv_t = mv'_t, \ mv_x = -mv'_x$$

e la variazione della quantita' di moto per una particella e'

$$\Delta Q_x = (Q_x)_{finale} - (Q_x)_{iniziale} = -mv_x - mv_x = -2mv_x$$

Per il principio di azione e reazione la parete riceve una variazione di quantita' di moto uguale e opposta pari a

$$\Delta Q'_x = 2mv_x$$

Supponiamo che la nostra molecola rimbalza in B e torna indietro fino ad arrivare in A, dove rimbalza di nuovo etc. Il tempo che intercorre tra un urto e il successivo con la faccia B, supposte che non ci siano urti tra particelle, e' pari al tempo che la particella impiega per andare dalla faccia A a quella B e ritorno, ovvero

$$\Delta t = \frac{2l}{v_x}$$

e il numero di urti nell'unita' di tempo e' dato da

$$\frac{1}{\Delta t} = \frac{v_x}{2l}$$

.

.

La forza risultante esercitata dalla particella sulla parete:

$$F_x = ma_x = m\frac{dv_x}{dt} = \frac{dQ'_x}{dt}$$
$$F_x = \frac{\Delta Q'_x}{\Delta t} = 2mv_x\frac{v_x}{2l} = \frac{mv_x^2}{l}$$

Per avere l'intensita' della forza ${\cal F}$ esercitata da N particelle sulla faccia ${\cal B}$ basta sommare

$$F_x = \sum_{i=1}^N \frac{m v_{ix}^2}{l} \quad .$$

La pressione lungo la direzione \boldsymbol{x} e' allora

$$p = \frac{F_x}{S} = \frac{F_x}{l^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{mv_{ix}^2}{l^3}$$

da cui

$$pV = \sum_{i=1}^{N} m(v_{ix})^2 \quad .$$

Se si ripete lo stesso ragionamento per le facce $C \in D$ (perpendicolari all'asse delle y) e per le altre due facce (perpendicolari all'asse delle z) si ottengono espressioni analoghe

$$pV = \sum_{i=1}^{N} m(v_{iy})^2$$
$$pV = \sum_{i=1}^{N} m(v_{iz})^2$$

allora, sommando i tre contributi, si ottiene

$$3pV = \sum_{i=1}^{N} m |\mathbf{v_i}|^2$$

dove il modulo della velocita' della particella i-esima e'

$$|{\bf v}_i|^2 = ({\bf v}_{i{\bf x}})^2 + ({\bf v}_{i{\bf y}})^2 + ({\bf v}_{i{\bf z}})^2$$

Inoltre

$$pV = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{N} m |\mathbf{v}_i|^2 = \frac{2N}{3} \frac{\sum_{i=1}^{N} m |\mathbf{v}_i|^2}{2N}$$

dato che l'energia cinetica media di una molecola del gas e'

$$\langle E_c \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N m |\mathbf{v}_i|^2}{2N}$$

allora

$$pV = \frac{2}{3}N < E_c > \quad . \tag{179}$$

Confrontando quest'ultima equazione con con quella ottenuta sperimentalmente, ovvero l'equazione di stato dei gas perfetti

$$pV = nRT$$

dove R e' la costante universale dei gas $^9,\,n=N/N_A$ il numero di moli, N_A il numero di Avogadro, si ha

$$\langle E_c \rangle = \frac{3}{2} k_B T \tag{180}$$

posto $k_B = \frac{R}{N_A}$, che e' la costante di Boltzamann. La formula (179) mette in relazione due grandezze macroscopiche $p \in V$ (che si misurano in maniera diretta) con una quantita' microscopica che e' l'energia cinetica media delle particelle. Quest'ultima, grazie alla (180), ci permette di interpretare il significato di un'altra grandezza macroscopica che e' la temperatura.

Possibile tema di approfondimento 7.

Ricavare in maniera piu' rigorosa la (180) usando la funzione certezza C, vedi [2].

 $^{{}^{9}}R = 8.3143 \frac{J}{m \, ol \times K}$

10.10 Invarianti collisionali

Definizione 8. Si chiamano *invarianti collisionali* dell'operatore collisionale (165), le funzioni $\phi(\mathbf{v}_1)$ tali che

$$I = \int_{S_2^+} Q(f, f) \phi(\mathbf{v}_1) \ d\mathbf{v}_1 = 0 \tag{181}$$

Teorema 17. Posto

$$I_{0} = \frac{1}{4} \int_{S_{2}^{+}} [\phi(\mathbf{v}_{1}) + \phi(\mathbf{v}_{2}) - \phi(\mathbf{v}_{1}') - \phi(\mathbf{v}_{2}')] \times [f(\mathbf{v}_{1}')f(\mathbf{v}_{2}') - f(\mathbf{v}_{1})f(\mathbf{v}_{2})] |(\mathbf{v}_{2} - \mathbf{v}_{1}) \cdot \hat{n}| \, dS_{2} \, d\mathbf{v}_{1} \, d\mathbf{v}_{2}$$
(182)

proviamo che $I = I_0$.

Dimostrazione. Definiamo

$$I = I_1 = \int_{S_2^+} Q(f, f)\phi(\mathbf{v}_1) \, d\mathbf{v}_1 \tag{183}$$

$$I_2 = \int_{S_2^+} Q(f, f)\phi(\mathbf{v}_2) \, d\mathbf{v}_1 \tag{184}$$

$$I_3 = -\int_{S_2^+} Q(f, f)\phi(\mathbf{v}_3) \ d\mathbf{v}_1$$
(185)

$$I_4 = -\int_{S_2^+} Q(f, f)\phi(\mathbf{v}_4) \ d\mathbf{v}_1$$
(186)

ne segue che

$$I_0 = \frac{1}{4} \left(I_1 + I_2 + I_3 + I_4 \right) \quad . \tag{187}$$

Consideriamo I_1 e scambiamo ${\bf v_1}$ con ${\bf v_2}$ (l'integrale non cambia perche' integrato in $d{\bf v_1}$ $d{\bf v_2})$

$$I_1 = \int_{S_2^+} \phi(\mathbf{v}_2) \left[f(\mathbf{v}_1') f(\mathbf{v}_2') - f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2) \right] \left| (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \hat{n} \right| dS_2 \, d\mathbf{v}_1 \, d\mathbf{v}_2 = I_2$$

Adesso consideriamo I_2 e scambiamo

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1 \to \mathbf{v}_1' \\ \mathbf{v}_2 \to \mathbf{v}_2' \end{cases}$$
$$\begin{cases} \mathbf{v}_1' \to \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2' \to \mathbf{v}_2 \end{cases}$$

si ottiene

$$I_{2} = \int_{S_{2}^{+}} \phi(\mathbf{v}_{2}')[f(\mathbf{v}_{1})f(\mathbf{v}_{2}) - f(\mathbf{v}_{1}')f(\mathbf{v}_{2}')]|(\mathbf{v}_{1}' - \mathbf{v}_{2}') \cdot \hat{n}|dS_{2}d\mathbf{v}_{1}'d\mathbf{v}_{2}'$$

poiche' si e' visto in (177) che per urti elastici

$$d\mathbf{v}_2' d\mathbf{v}_1' = d\mathbf{v}_2 d\mathbf{v}_1 \ e \ |\mathbf{V}'| = |\mathbf{V}| \tag{188}$$

si ha

$$I_2 = \int_{S_2^+} \phi(\mathbf{v}_2') [f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2) - f(\mathbf{v}_1') f(\mathbf{v}_2')] |(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{n}| \ dS_2 d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 = I_4 \quad .$$

Infine considerando I_4 e scambiando $\mathbf{v_2'}\leftrightarrow\mathbf{v_1'}$

$$I_4 = \int_{S_2^+} \phi(\mathbf{v}_1') [f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2) - f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2)] |(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{n}| dS_2 d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 = I_3 \quad .$$

In definitiva

$$I = I_1 = I_2$$
 , $I_2 = I_4$, $I_3 = I_4$

e dalla (187)

$$I_0 = I$$

Corollario 7. Condizione sufficiente affinche' I = 0 e' che

$$\phi(\mathbf{v}_1) + \phi(\mathbf{v}_2) = \phi(\mathbf{v}_1') + \phi(\mathbf{v}_2') \tag{189}$$

Dimostrazione. La dimostrazione segue banalmente dalla (182). $\hfill \square$

Le funzioni ϕ che soddisfano la (189) sono:

- 1. $\phi(\mathbf{v}) = 1;$
- 2. $\phi(\mathbf{v}) = \mathbf{v}$, nel caso di urti elastici (conservazione della quantita' di moto);
- 3. $\phi(\mathbf{v}) = |\mathbf{v}|^2,$ nel caso di urti elastici (conservazione dell'energia cinetica)

ovvero

$$\phi_{\alpha} = (1, \mathbf{v}_i, |\mathbf{v}|^2), \ \alpha = 0, \dots, 4$$
 . (190)

Si dimostra che queste sono le uniche quantita' conservate nel caso di urto elastico e l'invariante collisionale piu' generico e' la combinazione lineare dei tre invarianti collisionali

$$\phi(\mathbf{v}) = a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + c|\mathbf{v}|^2$$

 $\operatorname{con} a, \mathbf{b}, c \operatorname{costanti} [2].$

Teorema 18. (Teorema \mathcal{H})

Consideriamo l'equazione di Boltzmann nel caso omogeneo

$$\frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial t} = Q = \frac{1}{m} \int_{S_2^+} [f(\mathbf{v}_1')f(\mathbf{v}_2') - f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2)] |(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{n}| \, dS_2 d\mathbf{v}_2$$
(191)

consideriamo la quantita'

$$\mathcal{H} = \int f(\mathbf{v}) \log f(\mathbf{v}) \, d\mathbf{v} \tag{192}$$

 allora

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \le 0 \quad . \tag{193}$$

Dimostrazione. Supposto che f soddisfi l'equazione di Boltzmann (191), calcoliamo

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \int \frac{\partial f}{\partial t} \log f \, d\mathbf{v} + \int f \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial t} \, d\mathbf{v} =$$
$$= \int \frac{\partial f}{\partial t} [1 + \log f] \, d\mathbf{v} = \int Q [1 + \log f] \, d\mathbf{v} =$$
$$= \int Q \, d\mathbf{v} + \int Q \log f \, d\mathbf{v}$$

dove $\int Q \, d\mathbf{v} = 0$ in quanto la funzione $\phi(\mathbf{v}) = 1$ e' un invariante collisionale. Ragionando come prima, con opportuni scambi di variabili di integrazione, si ottiene

$$\int Q \log f(\mathbf{v_1}) \, \mathbf{dv_1} = \frac{1}{4} \int \mathbf{Q} [\log \mathbf{f}(\mathbf{v_1}) + \log \mathbf{f}(\mathbf{v_2}) - \log \mathbf{f}(\mathbf{v'_1}) - \log \mathbf{f}(\mathbf{v'_2})] \, \mathbf{dv_1} =$$

$$= \frac{1}{4} \int \int_{S_2^+} \log \left[\frac{f(\mathbf{v_1}) f(\mathbf{v_2})}{f(\mathbf{v'_1}) f(\mathbf{v'_2})} \right] [f(\mathbf{v'_1}) f(\mathbf{v'_2}) - f(\mathbf{v_1}) f(\mathbf{v_2})] |(\mathbf{v_1} - \mathbf{v_2}) \cdot \hat{n}| \, d\mathbf{v_1} d\mathbf{v_2} dS_2 =$$

$$= -\frac{1}{4} \int \int_{S_2^+} \log \left[\frac{f(\mathbf{v_1}) f(\mathbf{v_2})}{f(\mathbf{v'_1}) f(\mathbf{v'_2})} \right] [f(\mathbf{v_1}) f(\mathbf{v_2}) - f(\mathbf{v'_1}) f(\mathbf{v'_2})] |(\mathbf{v_1} - \mathbf{v_2}) \cdot \hat{n}| \, d\mathbf{v_1} d\mathbf{v_2} dS_2$$

consideriamo la funzione

$$\log\left(\frac{y}{x}\right)\left[\frac{y}{x}-1\right]$$

con x, y > 0, consideriamo le seguenti posizioni

$$y \to f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2)$$

 $x \to f(\mathbf{v}'_1)f(\mathbf{v}'_2)$

Poniamo $z=\frac{y}{x}>0$ e consideriamo $h(z)=(z-1)\log z,$ si ha

1. se z > 1, allora z - 1 > 0 e log $z > 0 \Rightarrow h(z) > 0$;

2. se 0 < z < 1, allora z - 1 < 0 e $\log z < 0 \Rightarrow h(z) > 0$;

3.
$$h(z) = 0 \Leftrightarrow z = 1$$

da cui

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \le 0$$

in particolare

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2) = f(\mathbf{v}_1')f(\mathbf{v}_2') \tag{194}$$

Ne segue che \mathcal{H} decresce fino a quando non raggiunge il valore di equilibrio dato dall'equazione (194) che prende il nome di equazione di bilancio dettagliato.

Possibile tema di approfondimento 8.

• Provare il teorema \mathcal{H} anche nel caso non omogeneo.

10.11 La distribuzione di Maxwell

Vogliamo trovare la distribuzione di equilibrio che soddisfi l'equazione di bilancio dettagliato (194). Prendiamo il logaritmo della (194):

$$\log f(\mathbf{v}_1) + \log f(\mathbf{v}_2) = \log f(\mathbf{v}_1') + \log f(\mathbf{v}_2')$$

Sappiamo che condizione sufficiente affinche' I sia nullo e' che valga la (189) ovvero

$$\phi(\mathbf{v}_1) + \phi(\mathbf{v}_2) = \phi(\mathbf{v}_1') + \phi(\mathbf{v}_2')$$

quindi ponendo $\phi(\mathbf{v}) = \log f(\mathbf{v})$ si ha un invariante collisionale. Ma l'invariante collisionale piu' generico e' del tipo

$$\phi(\mathbf{v}) = \log f(\mathbf{v}) = a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + c\mathbf{v}^2 \tag{195}$$

dove $f(\mathbf{v}) = \exp[a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + c\mathbf{v}^2]$. Chiamiamo con f_0 la distribuzione di equilibrio che soddisfi la (194)

$$\log f_0(\mathbf{v}) = a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + c\mathbf{v}^2$$

da cui

$$f_0(\mathbf{v}) = \exp\left[a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + c\mathbf{v}^2\right] \quad . \tag{196}$$

Il coefficiente c deve essere negativo, infatti, se fosse positivo avremmo

$$\int_{\mathbb{R}^3} c \mathbf{v}^2 \ d\mathbf{v} \to \infty$$

cioe', si avrebbero infinite particelle all'infinito. Inoltre ponendo

$$\begin{cases} \mathbf{b} = 2\alpha \mathbf{v_0} \\ c = -\alpha, \ \alpha > 0 \end{cases}$$

con \mathbf{v}_0 vettore costante, si ottiene che

$$f_0(\mathbf{v}) = A \exp\left[-\alpha(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2\right]$$
(197)

con A una costante che dipende da α , c, \mathbf{v}^2 . La (197) graficamente e' una gaussiana centrata in \mathbf{v}_0 .

Le costanti A, α , \mathbf{v}_0 possono essere espresse in funzione di variabili macroscopiche:

• Sia ρ_0 la densita' di massa ¹⁰

$$\rho_0 = \int f_0(\mathbf{v}) \, d\mathbf{v} = \int A \exp\left[-\alpha(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2\right] \, d\mathbf{v} = A\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (198)$$

da cui si trova A.

• Sia $\mathbf{u} = \langle \mathbf{v} \rangle$ la *velocita' media* (si prova che)

$$\mathbf{u} = \langle \mathbf{v} \rangle = \frac{\int \mathbf{f}_0 \mathbf{v} \, d\mathbf{v}}{\int \mathbf{f}_0 \, d\mathbf{v}} = \mathbf{v}_0 \tag{199}$$

quindi \mathbf{v}_0 e' la velocita' media di traslazione.

• Per calcolare A calcoliamo l'energia interna per unita' di massa definita come (si veda oltre)

$$e = \frac{1}{2\rho_0} \int f_0 (\mathbf{v} - \mathbf{v_0})^2 \mathbf{dv}$$
(200)

si trova

$$\rho_0 e = \frac{3}{4} A \frac{\pi^2}{\alpha} \tag{201}$$

e facendo sistema con la (198) si ottiene

$$\alpha = \frac{3}{4e} \quad , \quad A = \frac{\rho_0}{\left(\frac{4}{3}\pi e\right)^{\frac{3}{2}}} \quad .$$
(202)

Pertanto l'equazione (197) si scrive:

$$f_0(\mathbf{v}) = \frac{\rho_0}{\left(\frac{4}{3}\pi e\right)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-\frac{3m}{4e}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2\right] \quad .$$
(203)

2

¹⁰Dalla condizione di normalizzazione (163) $\int f(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \mathbf{Massa/volume}$

E' possibile scrive la (203) nell'ipotesi che il gas sia ideale

$$pV = nRT \quad . \tag{204}$$

Essendo N e' il numero di molecole, N_A il numero di Avogadro, $n = N/N_A$ il numero di moli, $k_B = R/N_A$ la costante di Boltzmann, $\rho/m = N/V$ la densita' di particelle, si ottiene

$$p = \frac{\rho k_B T}{m} \quad . \tag{205}$$

Poiche' si prova che (vedi (230))

$$p = \frac{2}{3}\rho e$$

dalla (205) si ottiene

$$e = \frac{3}{2} \frac{k_B T}{m} \tag{206}$$

da cui la (203) diventa

$$f_0(\mathbf{v}) = \rho_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2\right]$$
(207)

che e' la "famosa" distribuzione maxwelliana. Possibile tema di approfondimento 9.

• Provare le relazioni (198), (199), (201).

Verificato che il gas in equilibrio segue la distribuzione maxwelliana (207), si puo' calcolare la funzione \mathcal{H} all'equilibrio che chiameremo \mathcal{H}_0

Teorema 19. All'equilibrio vale la seguente relazione

$$S = -\frac{k_B V N}{m} \mathcal{H}_0$$

dove S e' l'entropia della termodinamica di equilibrio.

Dimostrazione. Calcoliamo

$$\mathcal{H}_0 = \int f_0(\mathbf{v}) \log f_0(\mathbf{v}) \ d\mathbf{v} =$$

usando la (207) si otterra'

$$\mathcal{H}_0 = \int f_0 \log \left\{ \rho_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 \right] \right\} \, d\mathbf{v} =$$

$$= \int f_0 \left\{ \log \left[\rho_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right] - \frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 \right\} d\mathbf{v} =$$
$$= \int f_0 \log \left\{ \rho_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right\} d\mathbf{v} - \int f_0 \frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 d\mathbf{v} =$$
$$= \log \left\{ \rho_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right\} \int f_0 d\mathbf{v} - \int f_0 \frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 d\mathbf{v}$$

poiche'

1.
$$\int f_0 \, d\mathbf{v} = \rho_0$$

2.
$$\int f_0 \frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 \, d\mathbf{v} =$$
$$= \int \rho_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2\right] \frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 \, d\mathbf{v} =$$
posto \mathbf{v} , $\mathbf{v}_0 = \mathbf{w}$ si bo

posto $\mathbf{v} - \mathbf{v}_0 = \mathbf{w}$, si ha

$$=\rho_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{m}{2k_B T} \int w^2 \exp\left[-\frac{m}{2k_B T} w^2\right] d\mathbf{w} =$$

consideriamo la trasformazione in coordinate sferiche

.

$$\begin{cases} w_x = \rho \sin \theta \cos \phi \\ w_y = \rho \sin \theta \sin \phi \\ w_z = \rho \cos \theta \end{cases}$$

con $\rho \in [0, +\infty[, \theta \in [0, \pi], \phi \in [0, 2\pi), \text{ dove } J = \rho^2 \sin \theta$

$$= \rho_0 \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta \ d\theta \int_0^{+\infty} \rho^4 \exp\left[-\frac{m}{2k_B T}\rho^2\right] d\rho =$$
$$= 4\pi \rho_0 \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}} \int_0^{+\infty} \rho^4 \exp\left[-\frac{m}{2k_B T}\rho^2\right] d\rho =$$
(208)

poniamo

$$\frac{m}{2k_BT}\rho^2 = t^2 \Rightarrow \frac{m}{2k_BT}\rho d\rho = tdt \Rightarrow \rho d\rho = \frac{2k_BT}{m}tdt$$
$$\rho = \left(\frac{2k_BT}{m}\right)^{\frac{1}{2}}t$$

sostituendo all'interno dell'integrale si ha

$$\rho^{4} \exp\left[-\frac{m}{2k_{B}T}\rho^{2}\right] d\rho = \frac{2k_{B}T}{m}\rho^{3}t \ dt \exp\left(-t^{2}\right) =$$
$$= \frac{2k_{B}T}{m} \left(\frac{2k_{B}T}{m}\right)^{\frac{3}{2}}t^{4}dt \exp\left(-t^{2}\right) = \left(\frac{2k_{B}T}{m}\right)^{\frac{5}{2}}t^{4}\exp\left(-t^{2}\right)dt$$

la (208) diventa

$$=4\pi\rho_0 \left(\frac{m}{2k_BT}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2k_BT}{m}\right)^{\frac{5}{2}} \int_0^{+\infty} t^4 \exp\left(-t^2\right) dt =$$

ma $\int_0^{+\infty} t^4 \exp\left(-t^2\right) dt = \frac{3}{8}\sqrt{\pi}$, quindi si ha

$$=\frac{4\pi\rho_0}{\pi^{\frac{3}{2}}}\frac{3}{8}\sqrt{\pi}=\rho_0\frac{3}{2}$$

in definitiva

$$\mathcal{H}_{0} = \rho_{0} \left\{ \log \left[\rho_{0} \left(\frac{m}{2\pi k_{B}T} \right)^{\frac{3}{2}} \right] - \frac{3}{2} \right\} = \rho_{0} \left\{ \frac{3}{2} \log \left[\frac{m\rho_{0}^{\frac{2}{3}}}{2\pi k_{B}T} \right] - \frac{3}{2} \right\} =$$

ma $\rho_0 = \frac{mN}{V}$ e $PV = Nk_BT,$ allora

$$= \frac{3}{2} \frac{mN}{V} \left\{ \log \left[\frac{m^{\frac{5}{3}}}{2\pi V^{\frac{2}{3}} \frac{PV}{N}} \right] - 1 \right\} =$$
$$= \frac{3}{2} \frac{mN}{V} \left\{ \log \left[\frac{m^{\frac{5}{3}}}{\frac{2\pi}{N} PV^{\frac{5}{3}}} \right] - 1 \right\} =$$
$$= \frac{3}{2} \frac{mN}{V} \left\{ \log \left(\frac{m^{\frac{5}{3}}}{\frac{2\pi}{N}} \right) - \log \left(PV^{\frac{5}{3}} \right) - 1 \right\} =$$

Moltiplicando ambo i membri per $-\frac{k_B V N}{m}$ si ottiene

$$-\frac{k_B V N}{m} \mathcal{H}_0 = \frac{3}{2} N k_B \log\left(P V^{\frac{5}{3}}\right) + costante \quad . \tag{209}$$

Il primo principio della termodinamica (conservazione dell'energia) afferma che

 $\delta Q = dU + PdV$ (legge di equilibrio)

dove dU e' la variazione infinitesima di energia interna (temperatura), $U = \frac{3}{2}Nk_BT$ (per molecole monoatomiche), δQ e' il calore scambiato con l'esterno e PdV e' il lavoro svolto dal sistema.

Per una trasformazione reversibile (quasi in equilibrio) si ha:

$$dS = \left(\frac{\delta Q}{T}\right)_{rev.}$$

da cui

$$dS = \left(\frac{\delta Q}{T}\right)_{rev.} = \frac{1}{T}\frac{3}{2}Nk_BdT + \frac{PdV}{T}$$

 $\operatorname{con} PV = k_B NT$, si ha

$$dS = \frac{3}{2}Nk_B\frac{dT}{T} + Nk_B\frac{dV}{V}$$

integrando si ottiene

$$S = \frac{3}{2}Nk_B\log T + \frac{3}{2}Nk_B\log V^{\frac{2}{3}} + costante$$
$$S = \frac{3}{2}Nk_B\log (V^{\frac{2}{3}}T) + costante$$
$$S = \frac{3}{2}Nk_B\log (PV^{\frac{5}{3}}) + costante \quad . \tag{210}$$

Confrontando la (209) e la (210) si puo' identificare

$$S = -\frac{k_B V N}{m} \mathcal{H}_0 \quad . \tag{211}$$

Quindi la funzione \mathcal{H}_0 , a meno di un segno, si identifica con l'*entropia* della termodinamica di equilibrio.

10.12 Critiche all'equazione di Boltzmann

L'equazione di Boltzmann fu subito criticata dai sui contemporanei, in quanto violava (apparentemente) i principi della meccanica. Vediamo nel dettaglio

10.12.1 Paradosso della ricorrenza

Si deve a Zemelo (matematico tedesco 1871-1953) che noto' che il teorema \mathcal{H} e' in disaccordo anche con il *teorema del ritorno di Poincare'* (matematico francese 1854-1912) che afferma:

"In qualsiasi sistema meccanico chiuso, soggetto a forze conservative, ogni stato (ovvero ogni punto dello spazio delle fasi) viene rivisitato con un'accuratezza desiderata un numero infinito di volte"

Quindi se si considera una certa condizione iniziale per il sistema meccanico, dopo un certo tempo il moto del sistema tornera' vicino a piacere alle condizioni iniziali.

Il disaccordo nasce dalla funzione distribuzione $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ e dalla funzione \mathcal{H} definita dalla posizione e velocita' delle molecole, quando il sistema torna dopo un tempo T_R vicino al suo stato iniziale, anche \mathcal{H} deve assumere un valore prossimo al suo valore iniziale, ma \mathcal{H} e' una funzione monotona (vedi eq.(193)). Come conseguenza $\mathcal{H}(t)$ non puo' essere una funzione monotona del tempo!

A queste obiezioni Boltzmann rispose che il tempo di ricorrenza di Poincare' T_R in un sistema meccanico con molte particelle (~ 10²²) e' molto lungo (maggiore della vita dell'universo) e quindi non osservabile.

10.12.2 Paradosso della reversibilita'

E stato Loschmidt (fisico austriaco 1821 – 1895) il primo ad osservare che l'equazione di Boltzmann non e' reversibile come le equazioni del moto, l'equazione di Liouville, che la gerarchia BBGKY. Il teorema \mathcal{H} e' di fondamentale importanza poiche' mostra che la funzione \mathcal{H} decresce nel tempo, caratteristica dell'irreversibilita'. Questo fatto sembra essere in conflitto con il fatto che le molecole che formano il gas seguono le leggi della meccanica classiche che sono tempo-reversibili. Cio' significa che la trasformazione

$$t \to -t, v \to -v$$

lascia inalterate le equazioni del moto (ovvero possiamo andare indietro nel tempo). Se cosi' fosse anche per la funzione \mathcal{H} , se questa decresce all'aumentare del tempo viceversa, se vado indietro nel tempo, questa dovrebbe aumentare, cosa che contraddice il teorema \mathcal{H} .

Ancora prima il paradosso della reversibilita' era stato gia' osservato da Thomson nel 1874, noto' che invertendo i tempi e le velocita' si potrebbero osservare fenomeni paradossali. Per esempio, il profumo diffuso in una stanza ritorna nel contenitore da cui era inizialmente uscito!

Tuttavia, fu il modello di Ehrenfest nel 1907 a descrivere il paradosso (vedi Appendice). La funzione \mathcal{H} decresce in media nel tempo ed e' estremamente probabile che $\mathcal{H}(t)$ sia vicino al suo valore minimo: se e' molto grande, puo' crescere o decrescere ma la probabilita' che decresca e' molto maggiore di quella che cresca. Quindi il fenomeno del profumo che torni indietro nel contenitore e' strettamente improbabile ma possibile in linea di principio.

Oggi sappiamo che l'equazione di Boltzmann fornisce una descrizione probabilistica delle leggi della meccanica. Ricordiamo che siamo partiti da una probabilita' P e per integrazione siamo arrivati a $P^{(1)}$, fornendo informazioni. Inoltre, e' stata aggiunta l'ipotesi di caos molecolare. Ma cosa c'entra l'ipotesi di caos molecolare con le reversibilita' dell'equazione della meccanica?

Se vale la reversibilita' per l'equazione della meccanica, deve valere anche per gli urti. Cio' semplifica la condizione che una certa collisione abbia luogo ad un certo tempo e determini gli stati successivi ed influenzi gli istanti precedenti. Quindi, per esempio, se al tempo t_1 la molecola A collide con la molecola B, allora le collisioni successive di A dipendono dalla collisione con B al tempo t_1 (e viceversa, ovvero le collisoni precedenti hanno condotto alla collisione con B al tempo t_1). In altri termini si e' stabilita una correlazione dinamica tra $A \in B$ al tempo t_1 che influenzera' la storia futura di A e di B. (reversibilita' \rightarrow correlazione).

Ma secondo l'ipotesi di *caos* molecolare, le collisioni molecolari sono analoghe al lancio di due dadi che sono *incorrelati*. La probabilita' che la molecola A con velocita' v_1 collide con una qualsiasi molecola di velocita' v_2 dipende solo da quante molecole sono presenti con velocita' $v_2 \ (P(v_2))$ e non dalla storia passata di A

$$P^{(2)}(v_1, v_2) = P^{(1)}(v_1)P^{(1)}(v_2)$$

dove $P^{(1)}(v_2)$ e' la probabilita' che ci siano molecole con velocita' v_2 .

L'ipotesi di caos molecolare ha quindi a che fare con la proprieta' *assenza di memoria*, quindi fa *perdere* all'equazione di Boltzmann la reversibilita' che avevano inizialmente le equazioni del moto. La grandezza del lavoro di Boltzmann (non compreso ai suoi tempi) e' di avere ridotto la termodinamica alla meccanica. Ma allora, in conclusione, ci si puo' chiedere perche' nella realta' i fenomeni sono irreversibili mentre le leggi della meccanica non lo sono?

Possiamo rispondere dicendo che la differenze e' determinata dal numero di molecole coinvolte, in un sistema reale macroscopico sono ~ 10^{23} . Il numero elevato di molecole implica che il comportamento piu' probabile del sistema di particelle sia quello irreversibile. In linea di principio un comportamento reversibile (per esempio, il profumo) e' possibile ma con probabilita' che tende a zero. L'irreversibilita' e' implicita in un sistema con un numero elevato di gradi di liberta'.

10.13 I momenti dell'equazione di Boltzmann

Fino ad ora abbiamo considerato le funzioni di distribuzioni senza investigare come ottenere da essa le quantita' macroscopiche. Ricordiamo che la massa totale e'

$$M = \int f \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} \tag{212}$$

la densita' di massa e'

$$\rho(\mathbf{x},t) = \int_{\Omega} f \, d\mathbf{v} \tag{213}$$

dove Ω e' lo spazio delle velocita' $\equiv \mathbb{R}^3.$ La velocita' media e'

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \mathbf{u} = \frac{\int f \mathbf{v} \, d\mathbf{v}}{\rho}$$
 (214)

l'energia cinetica media e'

$$<\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2>=W=\frac{\int f\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \,d\mathbf{v}}{\rho} \tag{215}$$

Le quantita' (212)-(215) si chiamano momenti dell'equazione di Boltzmann perche' ottenuti moltiplicando le f per delle funzioni di \mathbf{v} ed integrando (distribuzione marginale) in $d\mathbf{v}$.

Vogliamo trovare l'equazione di evoluzione per queste quantita'. A tal fine partiamo dall'equazione di Boltzmann con forza esterna \mathbf{F}

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = Q(f, f) \quad . \tag{216}$$

Adesso moltiplichiamo la (216) per gli invarianti collisionali ϕ_{α} ed integriamo in $d\mathbf{v}$

$$\phi_{\alpha} = (1, \mathbf{v}_i, \mathbf{v}^2), \ \alpha = 0, \dots, 4$$
$$\frac{\partial}{\partial t} \int \phi_{\alpha} f \ d\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int v_i f \phi_{\alpha} \ d\mathbf{v} + \frac{F_i}{m} \int \phi_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial v_i} \ d\mathbf{v} = \int \phi_{\alpha} Q \ d\mathbf{v} = 0$$

analizziamo il terzo termine

$$\frac{F_i}{m} \int_{\Omega} \phi_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial v_i} \, d\mathbf{v} = \frac{F_i}{m} \int_{\partial \Omega} \phi_{\alpha} f d\mathbf{v} - \frac{F_i}{m} \int_{\Omega} f \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial v_i} \, d\mathbf{v}$$

con $\Omega\equiv\mathbb{R}^3$ e sotto le ipotesi che $f\to 0$ quando $\mathbf{v}\to\infty,$ si ha

$$\frac{\partial}{\partial t}(momento) + \frac{\partial}{\partial x_i}(flusso) - \frac{F_i}{m} \int f \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial v_i} \, d\mathbf{v} = 0$$

cioe'

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \phi_{\alpha} f \, d\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int v_i f \phi_{\alpha} \, d\mathbf{v} - \frac{F_i}{m} \int f \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial v_i} \, d\mathbf{v} = 0 \qquad (217)$$

Distinguiamo i seguenti casi:

• $\alpha = 0, \, \phi_0 = 1$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f \, d\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int v_i f \, d\mathbf{v} = 0$$

da cui otteniamo l'equazione di conservazione della massa

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \tag{218}$$

dove ρu_i e' il flusso di massa nella direzione i-esima, ovvero la quantita' di moto.

• $\alpha = 1, 2, 3, \, \phi_{\alpha} = v_j$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int v_j f \, d\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int v_i v_j f \, d\mathbf{v} - \frac{F_i}{m} \int f \frac{\partial v_j}{\partial v_i} \, d\mathbf{v} = 0$$

da cui otteniamo l'equazione di bilancio della quantita' di moto

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} U_{ij} = \frac{\rho}{m} F_j \tag{219}$$

dove

$$U_{ij} = \int v_i v_j f \, d\mathbf{v} \tag{220}$$

e' il flusso della quantita' di moto.

• $\alpha = 4, \ \phi_{\alpha} = \mathbf{v}^{2}$ $\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{v}^{2} f \ d\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \int f v_{i} \mathbf{v} \ d\mathbf{v} - \frac{F_{i}}{m} \int f \frac{\partial \mathbf{v}^{2}}{\partial v_{i}} \ d\mathbf{v} = 0$ dove $\frac{\partial \mathbf{v}^{2}}{\partial v_{i}} = \frac{\partial (v_{j} v^{j})}{\partial v_{i}} = 2v_{j} \frac{\partial v_{j}}{\partial v_{i}} = 2v_{j} \delta_{ij}, \ da \ cui \ segue \ che$

$$\int f \frac{\partial \mathbf{v}^2}{\partial v_i} \, d\mathbf{v} = 2 \int f v_j \delta_{ij} \, d\mathbf{v}$$

allora otteniamo

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{v}^2 f \, d\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int v_i \mathbf{v}^2 f \, d\mathbf{v} = 2F_i u_i \rho$$

dividiamo per 2, ottenendo l'equazione di bilancio per l'energia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho W) + \frac{\partial}{\partial x_i} S_i = \rho F_i u_i \tag{221}$$

dove

$$S_i = \int \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 v_i f \, d\mathbf{v} \tag{222}$$

e' il flusso di energia.

Notiamo che le equazioni di bilancio hanno la struttura

$$\frac{\partial}{\partial t}(momento) + \frac{\partial}{\partial x_i}(flusso \ del \ momento)$$

allora il sistema non e' chiuso!

Le equazioni di bilancio si possono mettere sotto un'altra forma, introducendo la *velocita' deviatoria* (o randomica)

$$c_i = v_i - u_i \tag{223}$$

che descrive di quanto la velocita' microscopica v_i si discosta dalla sua media $u_i.$ Notiamo che

$$\int c_i f \, d\mathbf{v} = \int v_i f \, d\mathbf{v} - \int u_i f \, d\mathbf{v} = \rho v_i - \rho u_i = 0$$

Consideriamo il flusso di quantita' di moto

$$U_{ij} = \int v_i v_j f \, d\mathbf{v} = \int (v_i + c_i)(v_j + c_j) f \, d\mathbf{v} =$$
$$= \rho u_i u_j + \int c_i c_j f \, d\mathbf{v}$$
(224)

quindi U_{ij} si decompone in due parti:

- 1. il flusso macroscopico di quantita' di moto $\rho u_i u_j$;
- il flusso di quantita' di moto dovuto alla parte deviatoria che identifichiamo con il tensore degli stress ¹¹

$$P_{ij} = \int f c_i c_j \, d\mathbf{v} \tag{225}$$

Allora in modo analogo, la densita' di energia e'

$$\frac{1}{2} \int \mathbf{v}^2 f \, d\mathbf{v} = \frac{1}{2} \int (\mathbf{c} + \mathbf{u})^2 f \, d\mathbf{v} = \frac{1}{2} \rho \mathbf{u}^2 + \frac{1}{2} \int \mathbf{c}^2 f \, d\mathbf{v}$$
(226)

 \cos

- 1. $\frac{1}{2}\rho \mathbf{u}^2$ e' la densita' di energia cinetica;
- 2. $\frac{1}{2}\int \mathbf{c}^2 f \, d\mathbf{v}$ e' l'energia interna del gas (teorema di Koenig);

da cui definiamo l'energia interna del gas per unita' di massa

$$e = \frac{1}{\rho} \frac{1}{2} \int |\mathbf{c}|^2 f \, d\mathbf{v} \tag{227}$$

Esiste una relazione tra la (225) e la (227), se prendo la traccia di P_{ij} otteniamo

$$P_{ii} = \int |\mathbf{c}|^2 f \, d\mathbf{v} = 2\rho e \tag{228}$$

 $^{^{11}}$ questo termine ha lo stesso ruolo del tensore degli stress (sforzi) che compare nelle equazioni di bilancio ricavate da modelli macroscopici

e se chiamo p la parte isotropa del tensore degli stress (che coincide con la pressione nel caso idrostatico),

$$p = \frac{1}{3}P_{ii} \tag{229}$$

dalla (228) avremo

$$p = \frac{2}{3}\rho e \tag{230}$$

che e' l'equazione di stato del gas che ci permette di esprimere le tre quantita' p, ρ, e in funzione delle rimanenti due. Poiche' abbiamo visto che per un gas ideale vale l'eq. (206), dalla (227) ne segue che

$$\frac{3}{2}k_BT = \int |\mathbf{c}|^2 f \, d\mathbf{v} \quad . \tag{231}$$

Vogliamo adesso investigare il flusso di densita' di energia, chesi scrive

$$\frac{1}{2} \int v_i \mathbf{v}^2 f \, d\mathbf{v} = \frac{1}{2} \int (u_i + c_i) (\mathbf{u} + \mathbf{c})^2 f \, d\mathbf{v} =$$
$$= u_i \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{u}^2 + \rho e\right) + u_j P_{ij} + \frac{1}{2} \int c_i \mathbf{c}^2 f \, d\mathbf{v} =$$

dove

1. $u_i \left(\frac{1}{2}\rho \mathbf{u}^2 + \rho e\right)$ e' il flusso di energia macroscopica;

- 2. $u_j P_{ij}$ e' il lavoro fatto dal tensore degli stress per unita' di tempo;
- 3. $\frac{1}{2} \int c_i \mathbf{c}^2 f \, d\mathbf{v}$ e' il flusso di calore uguale a q_i

In definitiva, le *equazioni dei momenti*, o di *bilancio* o di *conservazione* (218), (219), (221) si scrivono

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0\\ \frac{\partial (\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j + P_{ij}) = \rho \frac{F_j}{m} \\ \frac{\partial}{\partial t} [\rho(\frac{1}{2}\mathbf{u}^2 + e)] + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho u_i(\frac{1}{2}\mathbf{u}^2 + e) + P_{ij}u_j + q_i] = \frac{\rho}{m} F_i u_i \end{cases}$$
(232)

queste sono le equazioni di base della meccanica dei sistemi continui, in particolare della fluidodinamica (a livello macroscopico). Esattamente sono 5 equazioni in 13 incognite (momenti)

$$\rho$$
, u_i , e , P_{ij} , q_i

rispettivamente in numero 1, 3, 1, 5, 3. Si osservi che P_{ij} e' simmetrico e quindi sono 6 incognite, inoltre $p = \frac{2}{3}\rho e$ e' un'altra equazione, in totale P_{ij} conta 5 incognite.

Per avere un sistema chiuso occorre esprime $P_{ij} \in q_i$ in termini di ρ , u_i , e. Queste equazioni aggiuntive, dette equazioni costitutive, vanno postulate in ogni approccio macroscopico alla fluidodinamica sulla base di esperimenti o di argomentazioni fisiche.

Si noti che, viceversa, nessuna di questa relazione deve essere introdotta in una descrizione microscopica. La funzione di distribuzione (unica incognita) contiene tutte le informazioni sulla densita', velocita', temperatura, stress e flusso di calore. Naturalmente cio' e' possibile perche' la f e' una funzione di 7 variabili (tempo, posizione, velocita') mentre nel caso macroscopico ho 5 incognite (ρ , u_i , e) funzioni di 4 varibili (tempo, spazio), che e' da preferire ogni volta che puo' essere applicato perche' e' piu' "semplice" trovare la soluzione numerica. Pertanto uno degli obiettivi di una teoria basata sull'equazione di Boltzmann e' di dedurre, per un gas in condizioni ordinarie, alcuni modelli approssimati macroscopici, determinando esplicitamente i parametri che vi compaiono.

10.14 Le equazioni di Eulero

Supponiamo che la funzione di distribuzione coincida con la maxwelliana (207). In tale caso si prova che:

$$q_i = 0 \tag{233}$$

e il tensore degli stress (225)

$$P_{ij} = \int f_0(\mathbf{v}) c_i c_j \ d\mathbf{v} = 0, \ i \neq j$$

quindi dalle (228), (229), (230) avremo

$$P_{ij} = p\delta_{ij} \quad , \quad p = \frac{2}{3}\rho e \tag{234}$$

che sono le equazioni costitutive del modello. In tal caso le cinque equazioni (232) nelle cinque incognite (ρ, u_i, e) formano un sistema chiuso. Nel caso di un gas ideale e' possibile esprimere l'energia interna del gas e in funzione della temperatura T grazie alla (206).

Queste sono le famose *equazioni di Eulero* della fluidodinamica, valide per fluidi *non viscosi*.

10.15 Le equazioni di Navier-Stokes-Fourier

Nel caso di fluidi compressibili e viscosi, con un'opportuna espansione dell'equazione di Boltzmann (detta di Chapman-Enskog [2]), si puo' ritrovare la descrizione macroscopica di Navier-Stokes-Fourier, dove le equazioni di chiusura sono

$$P_{ij} = p\delta_{ij} - \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$$
(235)

dove μ e' la viscosita' dinamica e $\lambda=-\frac{2}{3}\mu$ mentre per il flusso di calore vale la legge di Fourier

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \tag{236}$$

 κ e' il coefficiente di conducibilita' termica.

10.16 Il modello BGK (Bhatnagar-Gross-Krook)

Uno dei principali svantaggi dell'equazione di Boltzmann e' la complicata natura dell'operatore collisionale Q(f, f) (vedi eq.(165). Per questo motivo sono state proposte forme piu' semplici dell'operatore collisionale detti modelli collisionali. L'idea di base di questi modelli e' che il nuovo operatore collisionale J(f) sia piu' semplice mantenendo solamente le proprieta' medie e qualitative del vero operatore collisionale.

Il modello collisionale piu' conosciuto e' quello di *Bhatnagar-Gross-Krook* (BGK) introdotto nel 1954. L'idea alla base del modello BGK (mantenuta da modelli più sofisticati) e' che le caratteristiche principali dell'operatore collisionale siamo le seguenti:

(a) il vero operatore collisionale Q(f, f) ammette gli invarianti collisionali (190) e anche il nuovo operatore collisionale J deve soddisfare

$$I = \int \phi_{\alpha} J(f) \, d\mathbf{v} = 0, \ \phi_{\alpha}(1, \mathbf{v}, |\mathbf{v}|^2)$$

(b) il nuovo termine collisionale esprime la tendenza a una distribuzione maxwelliana (ovvero rispetta il teorema *H*)

Il modo piu' semplice con cui si tiene conto della seconda caratteristica e' immaginare che ogni collisione cambi la funzione di distribuzione f di un quantitativo proporzionale all'allontananeamento di f dalla maxwelliana f_0 . Per cui si introduce il seguente modello BGK

$$J(f) = -\nu[f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - f_0(\mathbf{v})]$$
(237)

dove ν e' una costante detta frequenza collisionale 12 e

$$f_0(\mathbf{v}) = \rho_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{m}{2k_B T} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2\right]$$
(238)

la distribuzione maxwelliana, che dipende anche dai parametri ($\rho,~{\bf u},~T).$ L'equazione di Boltzmann diventa

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = J \quad . \tag{239}$$

Vediamo le proprieta' di base dell'operatore J(f)

(a) $\int J\phi_{\alpha} d\mathbf{v} = 0$, sostituendo (237), si ottiene

$$\int (f\phi_{\alpha} - f_0\phi_{\alpha}) \ d\mathbf{v} = 0$$

 $^{^{12}}$ il cui inverso $1/\nu$ corrisponde al tempio medio tra una collisione e un'altra.
$$\int \phi_{\alpha} f \, d\mathbf{v} = \int \phi_{\alpha} f_0(\mathbf{v}) \, d\mathbf{v}$$

$$\int f \, d\mathbf{v} = \int f_0 \, d\mathbf{v}$$
(240)

Per $\alpha=1,\,{\rm si}$ ha

il che' significa che per ogni (\mathbf{x}, t) la maxwelliana $f_0(\mathbf{v})$ deve avere la stessa densita' data dalla distribuzione $f(\mathbf{v})$. Stessa cosa deve accadere per la velocita' media (214) \mathbf{u} ($\alpha = 1,2,3$) e temperatura (231) T. Poiche' la $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ dipende da (\mathbf{x}, t) , ne segue che anche i parametri (ρ, \mathbf{u}, T) saranno funzioni di (\mathbf{x}, t) e, per questo motivo la (238) si chiama maxwelliana locale, da distinguere dalla maxwelliana globale in cui i parametri (ρ, \mathbf{u}, T) sono delle costanti.

Osserviamo che l'operatore J(f) presenta una nonlinearita' molto peggiore di quella dell'operatore collisionale originale (165), che e' quadratico in f. Infatti dalla (240) ne segue che i parametri (ρ , \mathbf{u} , T) che compaiono sia nel numeratore che nel denominatore dell'esponenziale (238) dipendono loro stessi dalla f.

(b) Teorema \mathcal{H} nel caso omogeneo $(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = 0)$,

$$\mathcal{H} = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \log f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \, d\mathbf{v}$$
$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \frac{d\mathcal{H}}{dt} = \int \left[\frac{df}{dt} \log f + \frac{f}{f} \frac{df}{dt}\right] \, d\mathbf{v} =$$

data la non dipendenza da $\mathbf{x} \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = J$

$$= \int J \log f \, d\mathbf{v} + \int \frac{\partial f}{\partial t} \, d\mathbf{v} = \int J \log f \, d\mathbf{v} + \int J \, d\mathbf{v} =$$

dato $\phi_0 = 1$ e' un invariante collisionale $\Rightarrow \int J \, d\mathbf{v} = 0$

$$= \nu \int (f_0 - f) \log f \, d\mathbf{v} =$$
$$= \nu \int \log \left(\frac{f}{f_0}\right) (f_0 - f) \, d\mathbf{v} + \int \log f_0 J \, d\mathbf{v}$$

ma abbiamo provato in (195) che anche $\int \log f_0 J \ d{\bf v} = 0$ e' un invariante collisionale e quindi

$$= \nu \int \log\left(\frac{f}{f_0}\right) (f_0 - f) \, d\mathbf{v}$$

Poiche' abbiamo provato che $\log\left(\frac{x}{y}\right)(x-y) \leq 0, x, y > 0$, allora

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} \le 0 \ e \ \frac{d\mathcal{H}}{dt} = 0 \Leftrightarrow \ f = f_0$$

Quindi per l'operatore J vale il teorema \mathcal{H} .

10.16.1 Caso omogeneo

Un problema facilmente risolubile con il BGK e' trovare la soluzione dell'eq. (239) nel caso spazialmente omogeneo. Bisogna risolvere il problema

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} = \nu (f_0 - f) \\ f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t = 0) = g(\mathbf{v}) \end{cases}$$
(241)

Prendiamo i momenti della (241)

1. $\alpha = 0, \ \phi_0 = 1$

$$\int \frac{\partial}{\partial t} f \, d\mathbf{v} = \nu \int (f - f_0) \, d\mathbf{v} = \int J \, d\mathbf{v} = 0$$

da cui

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f \, d\mathbf{v} = 0 \; \Rightarrow \; \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

da cui ρ e' costante.

2. $\alpha = 1, 2, 3, \phi(v_i)$

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \mathbf{v} \, d\mathbf{v} = \int J \mathbf{v} \, d\mathbf{v} = 0$$

da cui

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f \mathbf{v} \, d\mathbf{v} = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) = 0$$

da cui **u** e' costante dato che ρ e' costante.

3. $\alpha = 4, \ \phi = |\mathbf{v}|^2$

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} |\mathbf{v}|^2 \, d\mathbf{v} = \int J |\mathbf{v}|^2 \, d\mathbf{v} = 0$$

da cui, dalla definizione (231), si prova

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f |\mathbf{c}|^2 \, d\mathbf{v} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial t} = 0$$

cioe'Te' costante.

Quindi ρ , **u**, *T* che compaiono nelle maxwelliana (238) non dipendono dal tempo (e per Hp. dallo spazio) e sono costanti e quindi la (241) e' un'equazione differenziale ordinaria, che dipende solo da **v**. Risolviamo l'equazione differenziale del primo ordine in *f*

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nu f = \nu f_0$$

dove νf_0 e' il termine sorgente non dipendente da f.

• risolviamo l'equazione omogenea associata

$$\frac{dy}{dx} + ay = 0 \Rightarrow \frac{dy}{y} = -a \ dx$$

integrando si ha

$$\log|y| = -ax + c \Rightarrow |y| = e^{-ax+c} = e^{-ax}e^c \Rightarrow y = ce^{-ax}, c \in \mathbb{R}$$

• applichiamo il metodo delle variazioni costanti

$$y = c(x)e^{-ax}$$
$$\frac{dy}{dx} = \frac{dc}{dx}e^{-ax} + ce^{-ax}(-a)$$
$$\frac{dc}{dx}e^{-ax} + ce^{(-ax)}(-a) + ax = b$$
$$\frac{dy}{dx} + ay = b,$$
$$\frac{dc}{dx}e^{(-ax)} - ay + ay = b$$
$$c = \int be^{ax} dx = c\frac{b}{a}e^{ax} + c$$

Torniamo alle variabili $y \to f, b \to \nu f_0$, allora l'integrale generale e'

$$f = f_0 + c_1 e^{-\nu t}$$

Determiniamo c_1

$$f(t = 0) = f_0 + c_1 = g(\mathbf{v})$$
$$c_1 = g(\mathbf{v}) - f_0(\mathbf{v})$$

La soluzione analitica e'

$$f(\mathbf{v},t) = g(\mathbf{v})e^{-\nu t} + f_0(1 - e^{-\nu t})$$

per $t \to +\infty$, si ha $f(\mathbf{v}, t) \to f_0$ che coincide con la maxwelliana di equilibrio.

10.16.2 Altri modelli BGK

Il Modello BGK contiene le caratteristiche principali dell'operatore collisionale Q(f, f). Tuttavia si possono introdurre delle correzioni:

- a) si puo' pensare che la frequenza di collisione sia una funzione della velocita' $\nu = \nu(\mathbf{v})$, in modo da approssimare meglio il gas di sfere rigide con poteziale di interazione finito poiche', in questo modello, ν varia in funzione proporzionale alla velocita'.
- b) Con il modello BGK si ottiene un numero di Prandtl¹³ pari a uno, mentre con l'equazione di Boltzmann e da dati sperimentali per un gas ideale si ottiene $\frac{2}{3}$. Si puo' pensare di modificare il rilassamento invece che ad una maxwelliana locale ad una gaussiana tridimensionale localmente anisotropa per ottenere un numero di Prandtl corretto.
- c) si possono ottenere dei modelli linearizzati o di ordine superiore.

Il successo del modello BGK e' dovuto allo sviluppo di solutori numerici deterministici di alto ordine, ch
de velocizzano la soluzione dell'equazione di Boltzmann.

10.16.3 Le equazioni di Navier Stokes

Abbiamo in precedenza ricavato le equaziondi di Eulero in cui non compare il contributo della viscosita' (attrito) che e' responsabile del fenomeno della diffusione della quantita' di moto. Dunque questo termine deve essere nascosto nelle soluzioni dell'equazione di Boltzmann di ordine superiore. I conti per trovare la soluzione al primo ordine risultano piuttosto complessi e lunghi se fatti direttamente sull'equazione di Boltzmann. Un modo piu' semplice per ottenere questo fenomeno e' di utilizzare l'approssimazione BGKdell'operatore collisionale. Definisco il tempo medio di collisione

$$\tau_c = \epsilon = \frac{1}{\nu} \tag{242}$$

quindi

$$J(f) = -\frac{1}{\tau_c} [f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - f_0(\mathbf{v})]$$
(243)

poiche' τ_c e' un numero molto piccolo, si prende come parametro di piccolezza $\epsilon,$ da cui

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - f_0(\mathbf{v}) = \mathcal{O}(\epsilon) \quad . \tag{244}$$

Dalla (239)

$$f - f_0 = -\epsilon \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}\right)$$
(245)

 $^{^{13}}$ e' un numero adimensionale che esprime il rapporto della diffusivita' cinematica rispetto alla diffusivita' termica per un fluido viscoso e caratterizza il comportamento del flusso del fluido e il trasferimento di calore.

e usando la (244) si ottiene

$$f - f_0 = f_1 + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$
 , $f_1 = -\epsilon \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{x}}\right)$. (246)

Ma dalla (238)

$$f_0 = f_0\left(\rho(\mathbf{x}, t), \rho(\mathbf{u}, t), T(\mathbf{x}, t)\right)$$

e supponendo per semplicita' il fluido incompressibile ($\rho={\rm cost.})\,$ e a temperatuta costante, si ottiene:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{\partial f_0}{\partial u_i} \frac{\partial u_i}{\partial t} \quad , \quad \frac{\partial f_0}{\partial x_j} = \frac{\partial f_0}{\partial u_i} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tag{247}$$

e la (246) dara'

$$f_1 = -\epsilon \frac{\partial f_0}{\partial u_i} \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad . \tag{248}$$

Ma dalla (238)

$$\frac{\partial f_0}{\partial u_i} = f_0 \frac{m}{k_B T} (v_i - u_i) \tag{249}$$

inoltre se moltiplicamo la (239) per v_i integriamo e al posto di f mettiamo f_0 , si ottiene l'equazione di Eulero per il momento (232)₂, (234), che nel caso di ρ costante e $F_i = 0$ si scrive

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad . \tag{250}$$

Dalla definizione di velocita' deviatorica (223) $c_i = v_i - u_i$, utilizzando le (249), (250) la (248) si scrive:

$$f_1 = \epsilon f_0 \frac{m}{k_B T} \left(-c_i c_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{c_i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)$$
(251)

e la (246) diventa:

$$f_1 = f_0 \left[1 + \epsilon \frac{m}{k_B T} \left(-c_i c_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{c_i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) \right] \quad . \tag{252}$$

E' ora possibile calcolare il tensore degli stress (225) con la soluzione trovata

$$P_{ij} = \int c_i c_j (f_0 + f_1) \, d\mathbf{v} \tag{253}$$

calcolando dei semplici integrali (vedi Appendice B) si ottiene

$$P_{ij} = -\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tag{254}$$

dove μ e' il coefficiente di viscosita' dinamica

$$\mu = \tau_c \frac{\rho k_B T}{m} \quad . \tag{255}$$

Una stima di τ_c si ottiene da

$$\tau_c = \frac{l}{v} \tag{256}$$

dove l e' il libero cammino medio e v una velocita' caratteristica microscopica. Quest'ultima si puo' stimare dalla energia interna

$$v \simeq \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \tag{257}$$

mentre il libero cammino medio lo abbiamo stimato in (166)

$$l\simeq \frac{V}{N\pi\sigma^2}$$

da cui sostituendo in (255 si ottiene

$$\mu \simeq \frac{\sqrt{mk_B T}}{\pi \sigma^2} \quad . \tag{258}$$

Un risultato importante notato gia' da Maxwell e' che il coefficiente di viscosita' non dipende dalla densita' del fluido. Un calcolo basato sull'eqauzione di Boltzmann, attraverso la teoria di Chapman-Enskog, porta al seguente valore per la viscosita'

$$\mu = \frac{5}{64} \frac{\sqrt{mk_B T}}{\sigma^2} \tag{259}$$

che e' consistente con quanto ottenuto attraveso il modello semplificato BGK.

Possibile tema di approfondimento 10.

- Ottenere l'equazione (254)
- Rimuovendo l'ipotesi di fluido incompressibile con temperatura costante, ricavare il tensore degli stress P_{ij}

A Appendice: il modello di Ehrenfest

Nel 1907 Paul e Tatiana Ehrenfest, propongono un semplice modello markoviano per chiarire l'interpretazione statistica del secondo principio della termodinamica.

Consideriamo N molecole in un contenitore diviso in due parti, $A \in B$, da un setto permeabile. Descriviamo lo stato del sistema al tempo t con k(t)che è il numero di molecole nel settore A, ovviamente N - k e' il numero di molecole in B. Nella dinamica proposta da Ehrenfest ad ogni tempo (discreto) una delle N molecole viene scelta a caso e spostata nell'altro settore, con una probabilita' che e' proporzionale al numero di molecole, si ottiene cosi' una catena di Markov (vedi [4]) con una matrice di transizione Q di elementi $q_{ij}, i, j \in 0, 1, ..., N$, dove q_{ij} e' la probabilita' che, supposto di avere al tempo n i particelle in A, al tempo successivo n + 1 ne abbia j, mentre lo spazio degli stati $E = \{0, 1, 2, ..., N\}$ e' formato dal numero di particelle nella parte A^{-14} . Avremo, dunque, una matrice di transizione che assume valori non nulli solo sulle linee adiacenti alla diagonale principale

$$\begin{cases} q_{k,k-1} = \frac{k}{N} \\ q_{k,k+1} = \frac{N-k}{N} \\ q_{ij} = 0, \quad se \quad |i-j| \neq 1 \end{cases}$$
(260)

quindi, $q_{k,k-1}$ e' la probabilita' che una molecola passi da A a B, facendo diminuire il numero di molecole in A di un'unita', questo dipende da quante molecole ci sono in A. Osserviamo che il modello di Ehrenfest puo' essere interpretato come un random walk (passeggiata aleatoria) in cui la probabilita' di salto a sinistra $(k \to k-1)$ o destra $(k \to k+1)$ dipende dalla posizione, in particolare, si osserva che la probabilita' di una molecola di saltare da A a B e' maggiore di quella di saltare da B ad A per k > N/2, questo ci fa pensare che la distribuzione stazionaria per il modello di Ehrenfest sara' concentrata attorno a k = N/2 (numero uguale di particelle nei due contenitori).

E' interessante sapere cosa succede nel caso stazionazio ovvero per un tempo molto lungo $(n \to \infty)$ ovvero se esiste il limite

$$\lim_{n \to \infty} q_{ik}^{(n)} = p_k \tag{261}$$

dove p_k e' la probabilita' di avere k particelle in A.

Abbiamo visto in [4] che il teorema di Markov ci garantisce l'esistenza e unicita' di questo limite, supposto la matrice regolare. Ricordiamo che una

¹⁴ supporremo che la catena sia temporalmente omogenea, ovvero questa probabilita' di transizione non dipende dall'istante di tempo

catena di Markov e' regolare se esiste un n intero positivo tale che ¹⁵

$$q_{ik}^{(n)} > 0 \quad , \quad \forall i,k \in E$$

Si noti che questa catena di Markov non e' regolare. Infatti se si parte da uno stato pari (rispettivamente dispari) nei tempi pari si visita uno stato pari (rispettivamente dispari) e nei tempi dispari uno stato dispari (rispettivamente pari). Pertanto per ogni n la matrice di transizione a n passi non puo' avere tutti gli elementi positivi. Tuttavia:

• si trova la distribuzione stazionaria

$$p = pQ$$

che e' una binomiale $B(N, \frac{1}{2})$, cioe'

$$p_k = \frac{1}{2^N} \binom{N}{k} \tag{262}$$

• poiche' la catena di Markov e' irriducibile (cioe' tutti gli stati comunicano tra loro) e il numero degli stati finito, per un teorema in [4], allora ha un'unica distribuzione invariante o stazionaria, che e' la (262).

Con la dinamica di Ehrenfest il sistema si rilassa alla distribuzione binomiale indipendentemente dallo stato di partenza. Si dimostra che per $N \gg 1$ la distribuzione ha il suo valore piu' probabile per k = N/2, dove quindi il sistema passa la sua maggior parte del tempo. Pertanto, una volta raggiunto l'equilibrio, il sistema non se ne discostera' spontaneamente, per questo motivo la dinamica del modello di Ehrenfest, vista da un punto di vista macroscopico con N grande, e' irreversibile.

A.1 il tempo di ritorno

Poiche' la catena di Markov del modello di Ehrenfest e' irriducibile con un numero finito di stati, possiamo applicare il risultato del tempo di (primo) ritorno 16

Teorema 20. Data una catena di Markov regolare o ergodica con distribuzione stazionaria p_k allora il valore di aspettazione del tempo di ritorno T_k vale

$$\mathbb{E}(T_k) = \frac{1}{p_k} \tag{263}$$

¹⁵Ricordiamo che $Q^{(n)} = QQ....Q = Q^n$

 $^{^{16}}$ Il tempo di primo ritorno di una catena di Markov e' il tempo necessario affinche' il sistema, supposto che al tempo iniziale parta dallo stato j, torni nello stesso stato.

Nel nostro caso, se consideriamo lo stato piu' probabile k = N/2 e approssimiamo la distribuzione binomiale (262) con una gaussiana (vedi oltre), si ottiene

$$\mathbb{E}(T_{\frac{N}{2}}) = \frac{1}{p_{\frac{N}{2}}} \simeq \sqrt{\pi N/2}$$
(264)

e per $N = 10^{23}$ si ottiene $\mathbb{E} \simeq 10^{11}$ che e' un tempo finito perche' l'unita' di tempo e' quella del salto di una molecola. Se consideriamo invece l'espansione nel vuoto, per cui tutte le molecole sono al tempo iniziale in $A \operatorname{con} k(0) = N$, il tempo di ritorno di tutte le molecole in A vale

$$\mathbb{E}(T_0) = \frac{1}{p_0} = 2^N \simeq 10^{10^{22}} \tag{265}$$

che e' un tempo enorme qualunque sia l'unita' di tempo usata. In conclusione la reversibilita'/irreversibilita' dipende dalla condizione iniziale scelta.

A.2 Approssimazione legge binomiale

Sia X una variabile aleatoria distribuita secondo una distribuzione binomiale di parametri $n \in p B(n, p)$, allora per

$$np \ge 5$$
 , $np(1-p) \ge 5$

si prova che $X \simeq N(np, np(1-p))$ cioe' la varabile aleatoria X e' distribuita secondo una normale N con valore medio $\mu = np$ e varianza $\sigma^2 = np(1-p)$. Poiche'

$$N(x,\mu,\sigma^{2}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^{2}}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^{2}}{2\sigma^{2}}\right]$$
(266)

se $p=\frac{1}{2},\,\mu=n/2,\,\sigma^2=n/4,\,x=n/2$ ne segue

$$N(x,\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{\pi n/2}}$$

Possibile tema di approfondimento 11.

- Calcolare la probabilita' limite (262)
- scivere un codice che simuli il modello di Ehrenfest

B Formula di calcolo per integrali tripli

Per gli integrali tripli si puo' effettuare un cambio di variabile in coordinate sferiche

$$\begin{cases} x = \rho \sin \theta \cos \phi \\ y = \rho \sin \theta \sin \phi \\ z = \rho \cos \theta \end{cases}$$

con $\rho\in[0,+\infty[,\,\theta\in[0,\pi],\,\phi\in[0,2\pi],$ dove $J=\rho^2\sin\theta.$ La quantita'

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$$

rappresenta l'elemento infinitesimo di angolo solido sulla sfera S^2 di raggio unitario di \mathbb{R}^3 . Sia $\mathbf{l} = (l^1, l^2, l^3)$ il versore normale sulla sfera S^2 , allora

$$\int_{S^2} l^{i_1} l^{i_2} \dots l^{i_k} d\Omega = \begin{cases} 0 & \text{se k e' dispari} \\ \frac{4\pi}{k+1} \delta^{(i_1 i_2} \dots \delta^{i_k i_{k-1})} & \text{se k e' pari} \end{cases}$$
(267)

dove le parentesi tonde rappresentato la simmetrizzazione, cioe'

$$A_{(ij)} = \frac{1}{2} \left(A_{ij} + A_{ji} \right)$$

Riferimenti bibliografici

- [1] C. Cercignani. Spazio tempo movimento. Zanichelli, 1976.
- [2] C. Cercignani. Mathematical methods in kinetic theory. Springer, 1990.
- [3] C. Cercignani. Ludwing Boltzmann The man who trust in molecules. Oxford University press, 1998.
- [4] O. Muscato. *Metodi Matematici e Statistici*. http://www.dmi.unict.it/muscato/MMStat.pdf, 2023. online.
- [5] S. Salsa. Equazioni a derivate parziali. Springer-Verlag, 2016.