Tempo e Probabilità

Eugenio Regazzini

(Università degli Studi di Pavia)

Merano, 26 Luglio 2018

1. Storia di una disputa e origine del modello degli E.
2. Descrizione del modello
3. Valore atteso della posizione del sistema all'istante...
4. Il modello di Newton
5. Distribusione invariante
6. Valore atteso di un tempo di primo passaggio
7. Il contenuto di questa lezione riflette la lettura di un certo numero di testi e, in particolare, di

R. N. Bhattacharia e E. C. Waimire
Stochastic Processes with Applications (1990, 2009)
SIAM, Philadelphia

① Brevi cenni su una famosa disputa scientifica

I fisici Paul Ehrenfest e Tatiana Ehrenfest-Afanaseva nel 1907, e più tardi Marian Smoluchowski nel 1916, proposero e usarono un certo modello a fine di spiegare un paradosso evidente che verso la fine del XIX secolo minacciava di far naufragare la teoria cinetica della materia di Ludwig Boltzmann. Secondo questa teoria, lo scambio di calore è un processo stocastico (ovvero, un processo non sottoposto ad una legge rigida, deterministica, ma osservante una legge probabilistica), mentre in termodinamica tale scambio avverrebbe secondo una progressione predeterminata e irreversibile verso l'equilibrio. Equilibrio ~~che sarebbe raggiunto nell'istante in cui le temperature~~ che avviene, pressapoco, quando le temperature si uguagliano. Nel modello citato (Ehrenfest), che si ispira al punto di vista di Boltzmann, il sistema passa, in un istante non predicibile, dallo stato di equilibrio termodinamico ad uno stato di disequilibrio, anch'esso non predeterminato, in virtù della proprietà di ricorrenza messa in luce da Henri Poincaré fin dal 1890.

Tutto questo sarebbe arrivato a contraddire la proprietà di irrever=sibilità della termodinamica, e nonostante la ~~sua~~ spiegazione della termodinamica, dal punto di vista molecolare della materia, rappresentasse uno degli obiettivi più importanti della teoria cinetica.

Fu Ernst Zermelo a porre con forza la questione nel 1896, dando luogo ad un vivace dibattito con Boltzmann. Nonostante questi sostenesse, a ragione, che il tempo richiesto per passare dall'equilibrio ad un qualunque altro stato dovesse risultare così grande da non avere rile=vanza fisica, il suo ragionamento non riuscì a convincere gli altri.

Gli Ehrenfest e Smolukowski finalmente pervennero a risolvere la disputa offrendo il modo di "calcolare" il tempo immensamente grande richiesto per passare dall'equilibrio allo stato 0: un tempo che oltrepassa i confini temporali entro cui hanno senso le applicazioni della termodinamica.

Purtroppo, Boltzmann non visse a sufficienza – si suicidò nel 1906 – per vedere la conclusione, a suo favore, della disputa.

2 Descrizione del modello

I due corpi, comunicanti tra loro e isolati dall'esterno, vengono rappresentati come due urne – indicate con I e II, rispettivamente – ciascuna delle quali contiene, in un generico istante, una parte di 2d palline. Il numero di palline contenute in I (II, rispettivamente) rappresenta la temperatura di I (II, rispettivamente) in quel preciso istante. Il fenomeno dello scambio di temperatura viene attivato in tempo discreto, cioè, agli istanti 0 (iniziale), 1, 2, ..., t, ...

Ponendoci dal lato dell'urna I, si ipotizza che all'istante iniziale essa contenga i palline (temperatura iniziale di I) e, di conseguenza, II ne contenga $(2d-i)$. In ciascuno degli istanti successivi si verifica una ed una sola delle due alternative seguenti: I rilascia una pallina che viene posta in II (la temperatura del primo corpo diminuisce di una unità e quella del secondo aumenta di una unità), oppure riceve una pallina da II. Non si ipotizza una regola rigida per queste variazioni, ma si assume che esse seguano lo schema probabilistico seguente:

Se j è il numero di palline contenute in I con $1 \leq j \leq 2d-1$, il rilascio avviene con probabilità $\frac{j}{2d}$ e l'acquisizione con probabilità $\left(1-\frac{j}{2d}\right)$. In questo modo, la probabilità di diminuzione della temperatura è maggiore di quella di aumento se e solo se la temperatura di I è maggiore di d, che è la media delle temperature dei due corpi in ciascuno degli istanti $0, 1, 2, \dots, t, \dots$.

Per completare la descrizione, si suppone che la probabilità di diminuzione, di una unità di temperatura, valga 1 se $j = 2d$, e che quella di aumento di una unità valga 1 se $j = 0$.

Si viene così a creare un sistema avente come stati gli elementi dell'insieme $S := \{0, 1, \dots, 2d\}$, il primo e l'ultimo dei quali sono barriere riflettenti. La posizione del sistema all'istante n, $n = 0, 1, \dots$, è rappresentata da un numero aleatorio X_n a valori in S. La legge di $(X_0, \dots, X_n)$ e quella di X_n $(n \geq 1)$ è determinata univocamente in virtù delle ipotesi fatte. A questo proposito, il punto più importante da rilevare è che tali ipotesi implicano la condizione markoviana

$$P(X_{n+1}=i_{n+1} \mid X_n=i_n, \dots, X_1=i_1,\ X_0=i_0)$$

(*) (*)

$$= P(X_{n+1}=i_{n+1} \mid X_n=i_n) \qquad (i_0, \dots, i_{n+1} \in S,\ n \geq 1)$$

$$(=: p_{i_n, i_{n+1}})$$

$$= \begin{cases} \dfrac{i_n}{2d} & i_{n+1}=i_n-1 \quad 1 \leq i_n \leq 2d \\[2ex] 1-\dfrac{i_n}{2d} & i_{n+1}=i_n+1 \quad 0 \leq i_n \leq 2d-1 \end{cases}$$

Quindi,

$$P\{X_0=i_0, \dots, X_{n+1}=i_{n+1}\}$$

$$= P\{X_0=i_0\} \cdot p_{i_0,i_1} \cdot p_{i_1,i_2} \cdots p_{i_n,i_{n+1}} \qquad (n \geq 0)$$

$$P(X_{n+1}=i_{n+1} \mid X_0=i_0) \qquad \left(= P_{i_0}(X_{n+1}=i_{n+1})\right)$$

$$= P\{X_0=i_0\} \sum_{i_1,\dots,i_n \in S} \underbrace{p_{i_0,i_1} \cdots p_{i_n,i_{n+1}}}_{p^{(n+1)}_{i_0,i_{n+1}}} .$$

Uno stato $i \in S$ si dice ricorrente se

$$\rho_{i,i} := P_i(X_n = i \text{ per qualche } n \geq 1) = 1$$

Uno stato j si dice transitorio se $\rho_{j,j} < 1$.

Se $p_{i,j}^{(n)} > 0$ e $p_{j,i}^{(m)} > 0$ per qualche m ed n, si dice che gli stati i, j comunicano.

Nel modello di Ehrenfest, tutti gli stati comunicano fra loro e sono ricorrenti.

③ Valore atteso (= speranza matematica) di X_n

Ci proponiamo di calcolare

$$E(X_n \mid X_0 = i) = 0 \cdot p_{i,0}^{(n)} + 1 \cdot p_{i,1}^{(n)} + \dots + 2d\, p_{i,2d}^{(n)}$$
$$= \sum_{j=0}^{2d} j \times p_{i,j}^{(n)}$$

e di discutere, quindi, la connessione di

$$E(X_n - d \mid X_0 = i) =: \bar{e}_i(n)$$

con la legge del raffreddamento di Newton.

Siamo in un caso in cui si può procedere per ricorrenza, con notevole vantaggio sul calcolo diretto.

$$\bar{e}_{X_0}(n) = E\left[(X_{n-1}-d) + (X_n - X_{n-1}) \mid X_0\right]$$

$$= \bar{e}_{X_0}(n-1) + E\left[E(X_n - X_{n-1} \mid X_{n-1}, X_0) \mid X_0\right]$$

$$= \bar{e}_{X_0}(n-1) + E\left[E(X_n \mid X_{n-1}) - X_{n-1} \mid X_0\right] \qquad (*)\ (*)$$

$$= \bar{e}_{X_0}(n-1) + E\left[(X_{n-1}+1)\left(1-\frac{X_{n-1}}{2d}\right) + (X_{n-1}-1)\frac{X_{n-1}}{2d} - X_{n-1} \mid X_0\right]$$

$$= \bar{e}_{X_0}(n-1) - \frac{1}{d} E\left[X_{n-1} - d \mid X_0\right]$$

$$= \left(1-\frac{1}{d}\right)\bar{e}_{X_0}(n-1) \qquad (n=1,2,\dots),\ \bar{e}_{X_0}(0) := X_0 - d.$$

Allora,

$$\bar{e}_{X_0}(n) := E(X_n - d \mid X_0) = (X_0 - d)\left(1-\frac{1}{d}\right)^n.$$

Conseguenza: se si stima di avere τ transizioni per secondo, in t secondi si hanno $n=\tau t$ transizioni e, quindi,

$$\boxed{f_d(t) := E\left(X_{\tau t} - d \mid X_0\right) = (X_0 - d)\, e^{-\tau\left(\log\frac{d}{d-1}\right)\cdot t}}$$

rappresenta lo "scostamento atteso" dalla "temperatura media" (d) della temperatura di I dopo t secondi.

Il comportamento atteso corrisponde, quindi, alla legge di Newton, ma il sottostante processo aleatorio se ne discosta in maniera significativa: basti ricordare che ciascheduno degli stati è ricorrente, ovvero verrà visitato infinite volte con probabilità unitaria.

4 Il modello di Newton

La condizione markoviana può essere vista come trasposizione a leggi di probabilità della condizione che, a prescindere dalla componente aleatoria delle variazioni, si sostanzia nell'assumere che la derivata $X'(t)$ di una grandezza X, variabile in funzione di un parametro t, dipenda soltanto da t e da $X(t)$, cioè

$$X'(t) = f(t, X(t)).$$

La legge di Newton scaturisce esattamente come caso particolare di questa equazione differenziale, quando si ponga

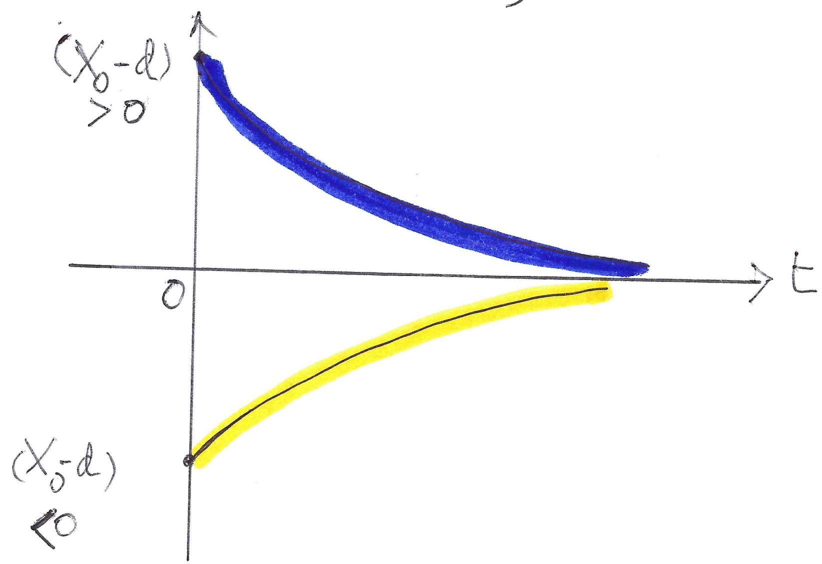
$X(t)$ = temperatura all'istante t,

$f(t, X(t)) = -k[X(t) - d]$, per k fissato positivo,

implicando

$$X(t) - d = c_1 e^{-kt} \qquad t \geq 0$$

$$= (X(0) - d) e^{-kt}$$



(5) Distribuzione invariante, o di equilibrio

Si dice invariante una distribuzione che sia comune a tutti gli elementi X_n, $n=0,1,\ldots$.

Nel caso particolare che stiamo studiando, una distribuzione invariante $\underline{\pi} := (\pi_0, \ldots, \pi_{2d})$ deve soddisfare le equazioni

$$(\S) \qquad \pi_i = \sum_{j=0}^{2d} \pi_j \, p_{ji} \qquad (i=0,\ldots,2d).$$

Infatti, in generale si ha

$$P\{X_{n+1}=i\} = \sum_{j=0}^{2d} P\{X_{n+1}=i, X_n=j\} = \sum_{j=0}^{2d} P\{X_n=j\}\, p_{ji} \qquad (i=0,\ldots,2d)$$

dalla quale segue immediatamente che, per essere invariante, $\underline{\underline{\pi}}$ debba soddisfare (§).

Una distribuzione invariante si dice, anche, distribuzione d'equilibrio, per motivi abbastanza ovvi.

Il modello di Ehrenfest ha una ed una sola distribuzione di equilibrio, che è facile determinare.

Infatti, direttamente da (§) si ottiene

$$\pi_{i-1}\left(1-\frac{i-1}{2d}\right)+\pi_{i+1}\,p_{i+1,i}=\pi_i \qquad (i=0,\dots,2d)$$

$$(\pi_{-1}=\pi_{2d+1}=0)$$

e, risolvendo,

$$\pi_1=\pi_0\cdot 2d\,,\quad \pi_2=\pi_0\,\frac{2d(2d-1)}{2\cdot 1}\,,\quad \pi_3=\pi_0\,\frac{2d(2d-1)(2d-2)}{3\cdot 2\cdot 1}\,,\ \dots$$

$$\pi_n=\pi_0\,\frac{2d(2d-1)\cdots(2d-n+1)}{n(n-1)\cdots 1}=\pi_0\binom{2d}{n}\,,\ \dots \qquad (n\le 2d).$$

Poichè dovrà risultare $\sum_{j=0}^{2d}\pi_j=1$, allora

$$\pi_n:=\binom{2d}{n}\frac{1}{2^n} \qquad n=0,\dots,2d.$$

⑥ Valore atteso di un tempo di primo passaggio

A fine di approfondire, e concludere, il paradosso messo in luce da Zermelo, avvalorando la congettura di Boltzmann, è necessario ripresentare la questione in termini tali da non ingenerare equivoci.

Indichiamo con T_0 l'istante in cui il sistema entra nello stato 0 per la prima volta. T_0 è, quindi, un numero aleatorio che può assumere, per valore, un elemento qualunque ~~dell'~~ dell'insieme $\{0, 1, \ldots, n, \ldots, +\infty\}$:

$$T_0 := \inf\{n \geq 0 : X_n = 0\}.$$

Per quanto spiegato nell'introdusione storica, interessa valutare la speranza matematica di T_0, condizionata all'ipotesi che il il sistema parta dallo stato di equilibrio (d):

$$m_d := E(T_0 \mid X_0 = d).$$

Trattando del problema in termini più generali, vediamo come si possa calcolare

$$m_i := E(T_0 \mid X_0 = i)$$

essendo i un elemento fissato di S. Ovviamente

$$m_0 = 0 \quad , \quad m_{2d} = 1 + m_{2d-1}$$

e, per $i \in \{1, \ldots, 2d-1\}$,

$$(\S\S) \qquad m_i = 1 + m_{i+1}\left(1 - \frac{i}{2d}\right) + m_{i-1} \cdot \frac{i}{2d}$$

Ehrenfest dimostrarono che, per $i=d$, la risoluzione del problema precedente è

$$m_d = \sum_{x=1}^{d} \frac{(2d-x)!\,(x-1)!}{(2d-1)!} + \sum_{x=1}^{d} \sum_{i=x}^{2d-1} \frac{(2d-x)!\,(x-1)!}{(2d-i)!\,i!}$$

$$= \frac{1}{2d}\, 2^{2d} \left(1 + O\left(\frac{1}{d}\right)\right)$$

(N.B. 10^{6000} anni se $d = 10.000$ e si sposta, mediamente, una pallina in ogni secondo)

Il discorso va completato col calcolo del tempo medio richiesto dallo spostamento da O a d.

Per questo si calcola

$$\overline{m}_i = E(T_d \mid X_0 = i)$$

dove

$$T_d := \inf\{n \geq 0 : X_n = d\}$$

$$i = 0 .$$

Con lo stesso tipo di ragionamento che produce (§§) si ottiene

$$\overline{m}_0 \leq d + d\log d + O(1)$$

(N. B. con gli stessi dati — $d = 10000$, uno sposta=
mento per secondo,

$$\overline{m}_0 \leqslant 29 \text{ ore}$$
)