Trattatello di Probabilità - Teoria delle Probabilità per Fisici, Computational Scientists and Computer Scientists

E. Marinari
G. Parisi

May 26, 2000

Chapter 1

Introduzione

1.1 Definizione di Probabilità

Un libro dedicato alla probabilità dovrebbe contenere una definizione di questa parola. Un matematico potrebbe limitarsi a fornire le condizioni necessarie per poter chiamare qualcosa una probabilità: per esempio se p_n è la probabilità che l'evento n-esimo avvenga, è necessario che $p_n \geq 0$ e che $\sum_n p_n = 1$. Più in generale la probabilità può essere definita come una misura positiva, normalizzata a 1.

Questa soluzione può lasciare insoddisfatti, ma è difficile dare una definizione non puramente matematica che non si morda la coda. Tradizionalmente la probabilità è definita come il limite della frequenza quando il numero di osservazioni tende ad infinito. In altri termini, quando si getta una moneta, il risultato *testa* è detto avere probabilità 1/2 se f_N, il numero di volte in cui dopo N lanci è apparso il lato della testa, diviso il numero di lanci effettuati, N, tende a 1/2 quando N tende ad infinito.

Come giustificare questa affermazione? In realtà per ciascun valore di N la sequenza di tutte teste è sempre possibile, anche se con probabilità molto piccola. Come vedremo nel prossimo capitolo, la probabilità che $|f_N - 1/2|$ risulti maggiore di ϵ tende a zero quanto N tende ad infinito. Possiamo essere più precisi dicendo che la probabilità è 1/2 se la probabilità che la frequenza si discosti troppo da 1/2 tende a zero per grandi N. In questo modo abbiamo brillantemente definito la probabilità in termini di probabilità.

Possiamo però cavarcela utilizzando come concetto primitivo, intuitivamente definito, che cosa sia un evento la cui probabilità tende zero. Un evento del genere tende a non avvenire mai, anzi quando la probabilità è sufficientemente bassa, molto probabilmente non è mai avvenuto in tutta la storia dell'Universo e non avverrà ancora per moltissime vite dell'Universo a venire.

Questo punto di vista (che possiamo chiamare frequentista) non è quello condiviso da tutti i probabilisti. Esiste un altro punto di vista, il soggettivista, secondo il quale la probabilità indica una nostra previsione, condizionata dalla nostra ignoranza. Per esempio il significato della frase "la probabilità del rosso in una roulette truccata sia più grande del nero" è "conviene puntare sul rosso". La probabilità ci permette quindi di decidere il da farsi in un mondo che conosciamo imperfettamente.

Nonostante che il punto di vista frequentista ci sia molto più familiare, il punto di vista soggettivista è probabilmente quello che spesso usiamo senza rendercene conto. Prendiamo la frase "i dati sperimentali implicano che la massa del protone è compresa in un certo intervallo con probabilità del 90 %". L'interpretazione frequentista letterale è la seguente: "se consideriamo tanti possibili universi in cui la massa del protone e' diversa, ma in cui si siano ottenuti gli stessi dati sperimentali, nel 90 % di questi universi, la massa del protone sta in quell'intervallo". La frase dal punto di vista soggettivista e' molto chiara: "dati i risultati degli esperimenti, una scommessa 9 a 1 è una scommessa equilibrata".

In questo libro saremo più vicini in alcuni casi al punto di vista soggettivista. Una discussione più lunga dei due punti di vista è qui fuor di luogo. Per il momento possiamo ritenere di aver dato provvisoriamente una definizione ragionevole della probabilità possiamo passare alla trattazione matematica.

1.2 Proprietà di Base delle Probabilità

Nel caso più semplice gli eventi che possono accadere possono essere identificati da un numero n, che per semplicità possiamo prendere intero positivo. Supponiamo che questi eventi siano mutualmente esclusivi e che sia certo che uno (ed ovviamente uno solo) di essi si verifichi. Indichiamo con p_n la probabilità che l'evento n-esimo avvenga. Le seguenti condizioni sono necessariamente soddisfatte:

$$\begin{aligned} p_n &\geq 0 \quad \forall\, n\ , && (1.1)\\ \sum_n p_n &= 1\ . && (1.2) \end{aligned}$$

Ad ogni sottoinsieme A dei numeri interi possiamo associare la probabilità $P(A)$ che si verifichi un evento appartenente ad A:

$$P(A) \equiv \sum_{n \in A} p_n\ . \tag{1.3}$$

Con questa definizione è facile dimostrare le proprietà fondamentali delle probabilità degli insiemi

$$\begin{aligned} P(A \cup B) &= P(A) + P(B) - P(A \cap B)\ ,\\ P(A) &\geq 0\ ,\\ P(\emptyset) &= 0\ ,\\ P(I) &= 1\ , \end{aligned} \tag{1.4}$$

dove con I abbiamo indicato l'insieme di tutti i numeri e con 0 l'insieme vuoto.

Una funzione definita sugli insiemi che soddisfa le precedenti proprietà è quella che i matematici chiamano una *misura positiva normalizzata a* 1. Nel caso che stiamo considerando (in cui gli insiemi sono costituiti da una quantità numerabile di elementi), è possibile costruire la teoria a partire dalle p_n o analogamente dalle quantità $P(A)$.

In generale se gli eventi sono etichettati da un numero reale x conviene seguire un punto di vista più generale ed introdurre la probabilità di un insieme A e quindi scrivere

$$P(A) \equiv \int_{x \in A} dP(x) = \int_{x \in A} p(x)dx\ . \tag{1.5}$$

L'ultimo passaggio, in cui abbiamo introdotto la funzione $p(x)$, deve essere fatto con cura. In generale infatti $p(x)$ può non essere una vera funzione, ma una funzione generalizzata (una distribuzione): ad esempio $p(x)$ può contenere termini del tipo di una funzione delta di Dirac $\delta(x-1)$ (che dice che si verifica con certezza l'evento caratterizzato dall'etichetta $x = 1$).

Nel caso in cui il numero degli elementi degli insiemi è finito, non ci sono problemi. Nel caso in cui l'insieme ha un numero infinito (numerabile o continuo) di elementi in generale è necessario procedere con cura e a questo scopo i matematici hanno costruito la teoria della misura. Tuttavia nel caso descritto in questo libro quasi tutte le misure anche su numeri reali sono esprimibili tramite funzioni regolari o da un numero finito di funzioni δ, mentre non appaiono misure più complicate (per esempio concentrate su i numeri razionali) e non abbiamo quindi bisogno di una trattazione sofisticata, che vada al di là di una teoria elementare dell'integrazione.

1.3 Probabilità di Intersezioni ed Unioni di Insiemi

Abbiamo cominciato a discutere il comportamento di insiemi di eventi, utilizzando concetti base come la probabilità dell'evento *unione* dei due eventi A e B, $P(A \cup B)$ e dell'evento *intersezione*, $P(A \cap B)$. In figura (13.3.3) i due eventi A e B, la loro intersezione (in scuro) e la loro unione (la superficie totale).

Abbiamo già visto che

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B) \ , \tag{1.6}$$

cioè che la probabilità dell'evento unione di A e B è data dalla probabilità di A, più la probabilità di B, meno la probabilità dell'intersezione di A e B. La figura (13.3.3), una volta associata la probabilità dell'evento ad un superficie, ci aiuta a capire. Sommando le superfici di A e B abbiamo in effetti contato due volte l'area più scura, di intersezione, che è comune ai due eventi. Una volta sottrattala abbiamo la giusta area che descrive la probabilità dell'evento $A \cup B$.

Se non ci sono modi per rendere vero sia l'evento A che l'evento B l'intersezione di A e B è nulla, $A \cap B = 0$. Due insiemi di questo tipo si definiscono *autoescludenti* (o *incompatibili*), ed in questo caso

$$P(A \cap B) = P(\emptyset) = 0 \ . \tag{1.7}$$

Cioè la probabilità che avvengano contemporaneamente due eventi incompatibili è nulla. Questa considerazione, che somiglia a prima vista ad una semplice e bonaria petizione di buon senso, può essere in realtà usata come uno dei punti chiave della teoria probabilistica. Infatti l'intera teoria può sostanzialmente essere costruita basandosi sul fatto che le probabilità p di un evento semplice o composto hanno in generale valori compresi fra 0 ed 1, e sul fatto che esistono *insiemi autoescludenti completi*. Intuitivamente questo indica che possiamo caratterizzare completamente il nostro spazio degli eventi mediante una serie di insiemi che non si ricoprono fra loro ma tassellano tutto lo spazio degli eventi (non quello fisico, anche se poi le nostre figure sono quasi sempre tracciate in due dimensioni, per rispetto ai processi di stampa e di visualizzazione così come sono organizzati ai giorni nostri). Si veda la figura (13.3.3).

Formalmente possiamo definire un *insieme completo autoescludente* come una collezione degli insiemi di eventi H_i, con $i = 1, ..., M$, tali che

$$\begin{aligned} H_i \cap H_j &= \emptyset \ , \ \forall i \neq j \ , \\ \bigcup_{i=1}^{M} H_i &= I \ , \end{aligned} \tag{1.8}$$

cioè la cui unione è proprio l'insieme di tutti gli eventi (si veda la figura (13.3.3)). Si ottiene quindi che

$$P(A) = \sum_{i=1}^{M} P(A \cap H_i) \ . \tag{1.9}$$

Infatti gli insiemi H_i tassellano lo spazio degli eventi senza mai ricoprirsi. Considerare tutte le loro intersezioni con A vorrà dire proprio considerare tutto l'insieme A. Nella figura (13.3.3) come esempio il quadrato, spazio degli eventi, diviso in quattro parti. Sommare sulle quattro parti equivale a sommare su tutto il quadrato (senza bisogno di precauzioni eccessive, visto che abbiamo disegnato quattro parti che non si sovrappongono).

In figura (13.3.3) mostriamo il caso di tre insiemi di eventi, che si sovrappongono in modo generico. Indichiamo con R_1 la superficie in bianco, che è occupata da uno solo dei tre insiemi (parte di R_1 dall'insieme A, parte da B e parte da C), con R_2 la superficie, in colore chiaro, condivisa da due degli insiemi, e con R_3 la parte più scura, condivisa dai tre insiemi. Vogliamo allora mostrare che la quantità

$$P(A \cup B \cup C) \equiv R_1 + R_2 + R_3 \ , \tag{1.10}$$

coincide con

$$P(A \cup B \cup C) = S_1 - S_2 + S_3 \ , \tag{1.11}$$

dove abbiamo definito

$$\begin{aligned} S_1 &\equiv P(A) + P(B) + P(C) \ , \\ S_2 &\equiv P(A \cap B) + P(B \cap C) + P(C \cap A) \ , \\ S_3 &\equiv P(A \cap B \cap C) \ . \end{aligned} \tag{1.12}$$

Sostanzialmente il nostro modo di ragionare è semplice. Se sommiamo le tre probabilità di A, B e C sopravaluteremo la probabilità, perché conteremo troppo le aree di intersezione. Ma togliendo le intersezioni doppie (S_2) esagereremo un po', sottraendo tre volte la parte in cui i tre insiemi si sovrappongono (avremmo dovuto invece sottrarla solo due volte). Aggiungendo S_3 risolveremo anche questo problema.

In termini un po' più formali, la somma delle probabilità dei tre insiemi (che *non è* la probabilità dei tre insiemi, ovviamente) può esser scritta come

$$P(A) + P(B) + P(C) = R_1 + 2R_2 + 3R_3 = S_1 \ , \tag{1.13}$$

sommando cioè l'area in bianco, più due volte quella in colore chiaro più tre volte quella in colore scuro. Vale invece la relazione (1.10) per la probabilità dell'unione dei tre insiemi. Inoltre per le intersezioni doppie vale

$$S_2 = P(A \cap B) + P(B \cap C) + P(C \cap A) = R_2 + 3R_3 \ , \tag{1.14}$$

e per quella tripla

$$S_3 = P(A \cap B \cap C) = R_3 \ . \tag{1.15}$$

Un'adeguata combinazione lineare delle tre relazioni precedenti è proprio la nostra tesi, cioè il fatto che

$$R_1 + R_2 + R_3 = S_1 - S_2 + S_3 \ . \tag{1.16}$$

Per capire meglio: provate a pensare i tre insiemi l'uno sull'altro. Che cosa succede in questo caso?

È semplice generalizzare questa relazione ad un numero arbitrario di insiemi di eventi che si sovrappongono in modo generico. Si trova che

$$P(\bigcup_{i=1}^{N} A_i) = \sum_{k=1}^{N} (-1)^k S_k \ , \tag{1.17}$$

dove

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_i P(A_i) \ , \\ S_2 &= \sum_{ik} P(A_i \cap A_k) \ , i \neq k \ , \text{ coppie non ordinate} \ , & (1.18) \\ S_3 &= \sum_{ik} P(A_i \cap A_k \cap A_j) \ , i \neq k \ \neq j \ , \text{ terne non ordinate} \ . & (1.19) \end{aligned}$$

Nella scheda (13.3.3) (da scrivere) l'esempio dei compleanni comuni in una classe scolastica.

1.4 Probabilità Condizionate

Il simbolo | indica il *condizionamento* di un insieme rispetto ad un altro. Possiamo definirlo mediante la relazione

$$P(A \cap H) = P(H) P(A|H) \ , \tag{1.20}$$

che definisce la probabilità dell'insieme A condizionato all'insieme H. In figura (13.3.3) un aiuto ad una comprensione intuitiva: la probabilità dell'intersezione di A ed H è uguale alla probabilità di H moltiplicata per la probabilità di A condizionato ad H. In altri termini la probabilità condizionata è la probabilità che A avvenga o sia avvenuto una volta che siamo a conoscenza dell'accadimento di H. Il lettore noti che non stiamo facendo minimamente alcuna ipotesi del tipo H causa A o H avviene prima di A. Ovviamente la probabilità condizionata è definita solo se $P(H) \neq 0$; in questo caso possiamo scrivere che

$$P(A|H) \equiv \frac{P(A \cap H)}{P(H)} \ . \tag{1.21}$$

Il simbolo di condizionamento, |, ovviamente è non simmetrico in generale:

$$P(H|A) \equiv \frac{P(A \cap H)}{P(H)} = P(A|H) \frac{P(H)}{P(A)} \ . \tag{1.22}$$

Se è notte ed appare un gatto certamente lo vedrò di colore grigio, mentre per il solo fatto che un gatto mi appaia grigio non è detto sia notte: forse è una luminosissima giornata di agosto, ma il gatto è veramente grigio. Si ha che

$$P(\text{gatto grigio}|\text{è notte}) = 1 \ , P(\text{è notte}|\text{ gatto grigio}) < 1 \ . \tag{1.23}$$

1.5 La Formula di Bayes

Per cominciare a discutere della *formula di Bayes* partiamo ricordando l'importanza di un insieme di eventi mutualmente esclusivi (l'*insieme completo autoescludente*) definito in (1.8). Se gli eventi A_i formano un insieme completo autoescludente allora per la probabilità dell'evento B

$$P(B) = P(1 \cap B) = P((\bigcup_j A_j) \cap B) = \sum_j P(A_j \cap B) \ , \tag{1.24}$$

e per la definizione di probabilità condizionata (1.20)

$$P(B) = \sum_j P(A_j)P(B|A_j) \ . \tag{1.25}$$

La (1.22) applicata al caso di uno degli eventi A_k in rapporto all'evento B ci dice che

$$P(A_k|B) = \frac{P(A_k)P(B|A_k)}{P(B)} \ , \tag{1.26}$$

che utilizzando la (1.25) ci dà *formula di Bayes*

$$P(A_k|B) = \frac{P(A_k P(B|A_k))}{Z}, \qquad Z = \sum_j P(A_j)P(B|A_j) \ . \tag{1.27}$$

Si noti che il valore del denominatore Z, che non dipende da k può essere facilmente ritrovato imponendo la condizione di normalizzazione

$$\sum_k P(A_k|B) = 1 \tag{1.28}$$

Per ora la (1.27) è soltanto una riscrittura matematica delle (1.21). Nella sezione (5.2) ne discuteremo un uso secondo noi corretto e ne faremo il punto di partenza per l'analisi dei dati sperimentali e più in generale per l'inferenza statistica. Possiamo però già notare che, se identifichiamo le A_k come le possibili *cause* dell'evento B (tutte le possibili cause, e con certezza si è data una sola causa, visto che abbiamo considerato un insieme completo autoescludente di eventi), la (1.27) può essere vista come una regola che consente di stabilire la *probabilità delle cause* di un evento.

Chapter 2

Distribuzioni di Probabilità

Discuteremo in questo capitolo delle distribuzioni di probabilità fondamentali che più entreranno nella nostra trattazione. Definiremo prima i concetti di valore di aspettazione e momento. Ci occuperemo della distribuzione binomiale, della distribuzione di Poisson e della distribuzione Gaussiana o normale: discuteremo le loro definizioni, le loro proprietà più rilevanti ed i loro comportamenti asintotici.

2.1 Valori di Aspettazione e Momenti

È di grande utilità pratica (e teorica) caratterizzare una distribuzione di probabilità mediante una serie di valori, dati da integrali (o somme, nel caso discreto) di funzioni della variabile aleatoria considerata.

Sia quindi x una variabile aleatoria che può assumere i valori x_α ($\alpha = 1, 2, \ldots$) con probabilità $P_\alpha \equiv P(x_\alpha)$. Se la serie converge assolutamente il valore di aspettazione (o valore medio) di x è definito da

$$\langle x \rangle \equiv \sum_\alpha x_\alpha P_\alpha \ , \tag{2.1}$$

ed x ha in questo caso un valore di aspettazione finito. Se $\sum_\alpha |x_\alpha| P_\alpha$ diverge x non ha un valore di aspettazione univocamente definito se non diamo una prescrizione precisa sull'ordine in cui effettuiamo la somma. Indicheremo il valore di aspettazione $\langle \cdot \rangle$ anche con $E(\cdot)$.

A volte si introduce il valore mediano, ovvero quello per cui $P(x < x_m)) - P(x > x_m))$ è zero, o il piu piccolo possibile, che è sempre definito anche quando il valor medio di x è divergente (per un'interessante discussione sull'importanza della differenza tra valor medio e mediano vedi [1]). A volte sentiamo parlare di valore modale di x, ma non dobbiamo spaventarci, è il valore di x che rende massima la probabilità (quello più di moda).

In più grande generalità potremo calcolare valori di aspettazioni di funzioni della variabile aleatoria

$$\langle f(x) \rangle \equiv \sum_\alpha f(x_\alpha) P_\alpha \ . \tag{2.2}$$

Per esempio

$$\langle x^k \rangle \equiv \sum_\alpha x_\alpha^k P_\alpha \ , \tag{2.3}$$

che con $k > 0$ intero, fornisce il *momento k-esimo* della distribuzione di probabilità. È da notare che queste definizioni, che abbiamo dato per una distribuzione di probabilità discreta, sono banalmente estese ad una distribuzione continua sostituendo la somme con degli integrali.

Riveste un'importanza particolare la *varianza* della variabile x

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \sum_\alpha P_\alpha \left(x_\alpha^2 - 2\langle x \rangle x_\alpha + \langle x \rangle^2 \right) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \ . \tag{2.4}$$

La deviazione standard σ è la radice quadrata della varianza. La deviazione standard dà una prima valutazione quantitativa della distanza tipica che la variabile x ha dalla sua media. È evidente che la varianza è una quantità non negativa, (è la somma di quadrati). La varianza (e di conseguenza σ) è uguale a zero solo e solo se la variabile x può assumere solo un valore con probabilità diversa da zero (i.e. $P(35) = 1$. Esattamente la stessa situazione si realizza se x è una variabile con una distribuzione continua e la funzione è data da $\delta(x - x_1)$.

2.2 La Distribuzione Binomiale

2.2.1 Eventi di Bernoulli e Distribuzione Binomiale

Utilizzeremo come base del nostro ragionamento il concetto di evento di Bernoulli. Consideriamo una sequenza di tentativi aleatori ripetuti: eseguiamo cioè una prova (per esempio il lancio di un dado), e ripetiamo poi la stessa prova molte volte. Si tratta di *eventi di Bernoulli* se:

1. Ad ogni tentativo può essere ottenuto uno di due risultati permessi. Esempi tipici sono il lancio della moneta con i due possibili risultati di testa o croce, o il lancio di un dado, dove un valore compreso fra uno e tre sia l'evento A mentre un valore compreso fra quattro e sei sia l'evento B. In questi due esempi i due eventi permessi sono equiprobabili, cioè hanno $p = \frac{1}{2}$: nel caso, ad esempio, di un lancio di un dado, si può considerare il valore uno come evento A e un valore compreso fra due e sei come evento B. Oppure si può considerare una carta tirata a caso da un mazzo di 52 carte, e definire evento A quello in cui si è estratto un asso. In questi ultimi due esempi i due eventi hanno probabilità diversa.

2. La probabilità di ognuno dei due risultati permessi non varia durante la serie di esperimenti.

Il fatto che i numeri "in ritardo" nel gioco del lotto abbiano esattamente la stessa probabilità dei numeri estratti nell'estrazione più recente è espressione del loro essere degli eventi di Bernoulli. Va notato che questa è da un lato un'assunzione empirica, coerente con i dati sperimentali (e con la nostra comprensione dei meccanismi delle forze fisiche, che ci fa sostenere che la probabilità di tirar fuori una palletta da un'urna il giovedì di questa settimana è la stessa che per la prossima settimana: le stesse saranno infatti le leggi che governano le interazioni fra le componenti elementari della palletta, dell'urna e della mano della persona bendata che effettua l'estrazione, sempre sotto l'ipotesi che le palle stiano tutte alla stessa temperatura). La natura binaria dell'evento (che ammette solo una risposta positiva o negativa) e la costanza della probabilità dell'evento elementare caratterizzano gli eventi di Bernoulli.

Consideriamo quindi N tentativi di Bernoulli, e chiediamoci quale sia la probabilità di ottenere K risposte positive (cioè eventi di tipo A e non B) in un ordine non specificato. Il problema è lo stesso che conta i modi di mettere K palline in N buche (ognuna delle quali può contenere una o nessuna pallina). Il numero di modi in cui possiamo ordinare N oggetti è $N!$. Le K risposte positive sono indistinguibili, e ci fanno quindi eliminare un fattore $K!$, così come sono indistinguibili le $N-K$ risposte negative, che ci fanno eliminare un fattore $(N-K)!$. Quindi il conteggio ci dà un risultato

$$\frac{N!}{K!\,(N-K)!} = \begin{pmatrix} N \\ K \end{pmatrix} , \tag{2.5}$$

che è , appunto, proprio il coefficiente binomiale. Il nostro risultato finale è quindi che la probabilità che N eventi di Bernoulli diano luogo a K risposte positive è

$$B(N,K,p) = \begin{pmatrix} N \\ K \end{pmatrix} p^K q^{N-K} , \tag{2.6}$$

dove p è la probabilità elementare di una singola risposta positiva, e $q = 1-p$. Questa distribuzione di probabilità è detta la *distribuzione binomiale.* È interessante notare che il coefficiente $B(N,K,p)$ è proprio il termine K-esimo dell'espansione di $(q+p)^N$.

Mostriamo che la distribuzione binomiale è ben normalizzata, cioè che

$$\sum_{K=0}^{N} B(N,K,p) = 1 . \tag{2.7}$$

Infatti $\sum_{K=0}^{N} B(N,K,p)$ è uguale, come si è detto, alla somma dei termini dell'espansione di $(q+p)^N$. Quindi è uguale proprio a $(q+p)^N$, che è uguale ad 1. QED.

2.2.2 Caratteristiche della Distribuzione Binomiale

Calcoliamo in primo luogo il valore di aspettazione del numero di risposte positive in una serie di prove governate da una distribuzione binomiale, e la varianza associata. Per calcolare il valore di aspettazione del numero di risposte positive dobbiamo sommare i possibili numeri di successi con il loro peso:

$$E(\text{ numero di successi }) = \sum_{K=0}^{N} B(N,K,p)\ K . \tag{2.8}$$

Usiamo il fatto che

$$K\ \frac{N!}{K!\ (N-K)!}\ p^K\ q^{N-K} = N\ p\ B(N-1,K-1,p) , \tag{2.9}$$

e notiamo che la somma su K (da 1 a N) di $B(N-1,K-1,p)$ dà 1 (il termine con $K=0$ dà 0). Quindi

$$E(\text{ numero di successi }) = Np . \tag{2.10}$$

Analogamente per la varianza si vede che

$$\begin{aligned}\sum_{K=0}^{N} K^2 B(N,K,p) - (Np)^2 = Np\left(\sum_{K=0}^{N} KB(N-1,K-1,p) - Np\right) = \\ Np\,((N-1)p + 1 - Np) = Np(1-p) = Npq ,\end{aligned} \tag{2.11}$$

e cioè $\sigma^2 = Npq$.

Consideriamo adesso $B(N, K, p)$ come funzione di K ad N fisso. Stiamo quindi considerando un numero fisso di eventi, N, ed analizzando B in funzione del numero di risposte positive. Dimostreremo quindi che se $(N+1)\ p$ non è intero allora B ha un massimo in $B(N, \mathrm{int}[(N+1)\ p], p)$, dove con $\mathrm{int}[\cdot]$ abbiamo indicato la parte intera. Se invece $(N+1)\ p$ è un intero allora dimostreremo che B ha un massimo in $B(N, (N+1)\ p, p) = B(N, (N+1)\ p - 1, p)$.

Vediamo la dimostrazione. Calcoliamo

$$\frac{B(N, K-1, p)}{B(N, K, p)} = \frac{\begin{pmatrix} N \\ K-1 \end{pmatrix} p^{K-1} q^{N-K+1}}{\begin{pmatrix} N \\ K \end{pmatrix} p^K q^{N-K}} = \frac{K\ (1-p)}{(N-K+1)\ p}\ . \tag{2.12}$$

Questi termini sono crescenti se

$$\frac{K\ (1-p)}{(N-K+1)\ p} < 1\ , \tag{2.13}$$

cioè se

$$K < (N+1)\ p\ . \tag{2.14}$$

Abbiamo visto cioè che $B(N, K, p)$ cresce con K sino all'intero più grande che soddisfa questa relazione, e poi comincia a diminuire. Se $(N+1)\ p$ è proprio un intero allora

$$\frac{B(N, K-1, p)}{B(N, K, p)} = 1 \text{ per } K = (N+1)\ p\ , \tag{2.15}$$

cioè B è massimo in $K = (N+1)\ p$ ed in $K = (N+1)\ p - 1$. QED.

È interessante notare due fatti. In primo luogo $B(N, K, p)$ come funzione di K cresce in modo monotono fino ad un certo valore di K e poi decresce in modo monotono. In secondo luogo è da ricordare il fatto che per N grande i termini individuali $B(N, K, p)$ sono tutti piccoli. Per ottenere una probabilità finita si può considerare invece, ad esempio, la probabilità di avere *almeno* K successi.

2.2.3 Il Limite di Poisson

È interessante discutere il caso in cui il numero di eventi N è grande, la probabilità di un successo p è piccola, mentre

$$\lambda \equiv N\ p \tag{2.16}$$

è finito.

Guardiamo in primo luogo alla probabilità di non avere alcuna risposta positiva. In queste condizioni:

$$B(N, 0, p) = \begin{pmatrix} N \\ 0 \end{pmatrix}\ q^N = (1-p)^N = \left(1 - \frac{\lambda}{N}\right)^N\ . \tag{2.17}$$

Usando l'espansione di Taylor per il logaritmo, per N grande si ha che

$$\log\left(B(N, 0, p)\right) = N \log\left(1 - \frac{\lambda}{N}\right) \simeq -\lambda\ , \tag{2.18}$$

e cioè nelle nostre condizioni (per N grande)

$$B(N,0,p) = e^{-\lambda} + O\left(\frac{1}{N}\right) \ . \tag{2.19}$$

La probabilità di avere un solo evento positivo è data dal termine con $K = 1$. Qui

$$B(N,1,p) = N \ p \ (1-p)^{N-1} \ , \tag{2.20}$$

e

$$\log\left(B(N,1,p)\right) = \log\left(N\frac{\lambda}{N}\right) + (N-1)\log\left(1-\frac{\lambda}{N}\right) \simeq \log(\lambda) - \lambda \ , \tag{2.21}$$

cioè

$$B(N,1,p) \simeq \lambda e^{-\lambda} \ . \tag{2.22}$$

In generale si ha che

$$B(N,K,p) \simeq \frac{\lambda^K}{K!}e^{-\lambda} \ . \tag{2.23}$$

Questa è proprio la distribuzione di Poisson che stiamo per discutere. **una figura N=1O** $\lambda = 1$

2.3 La Distribuzione di Poisson

2.3.1 Definizione, Normalizzazione, Vita Media e Momenti

La distribuzione di Poisson, che abbiamo già introdotto nella (2.23) come limite naturale della distribuzione binomiale, è caratterizzata da un parametro λ. La probabilità di K eventi è data, nel caso di una distribuzione di Poisson, da

$$P(K,\lambda) = \frac{\lambda^K}{K!}e^{-\lambda} \ . \tag{2.24}$$

Discuteremo in seguito le cruciali connessioni di questo tipo di distribuzione con la teoria dei processi stocastici. È da notare anche il fatto che nel limite di un gran numero di prove anche altre distribuzioni, oltre a quella binomiale, tendono alla distribuzione di Poisson (citiamo come esempio il problema del numero di carte uguali collocate nelle stesse posizioni di due mazzi ben mescolati).

La distribuzione di Poisson (2.24) è ben normalizzata. Infatti

$$\sum_{K=0.\infty} P(K,\lambda) = e^{-\lambda} \sum_{K=0,\infty} \frac{\lambda^K}{K!} = e^{-\lambda}e^{\lambda} = 1 \ . \tag{2.25}$$

Si può verificare inoltre la formula (che può essere utile)

$$\sum_{K=0}^{N} P(K,\lambda) = \frac{1}{N!}\int_{\lambda}^{\infty} dx \ x^N \ e^{-x} \ , \tag{2.26}$$

che può essere ottenuta ad esempio utilizzando le proprietà delle matrici Γ di Eulero.

Per ottenere una comprensione più profonda del significato di una distribuzione di Poisson consideriamo una sequenza di esperimenti (ovviamente in condizioni costanti nel tempo). L'esempio paradigmatico è quello della ben nota emissione radioattiva. Per semplicità basiamo il nostro ragionamento sull'uso di probabilità discrete. La nostra assunzione fondamentale sarà che intervalli temporali disgiunti siano indipendenti: che la probabilità, cioè , di un evento in un primo intervallo sia indipendente dalla probabilità in un secondo intervallo (di dimensioni arbitrarie ma disgiunto dal primo). Consideriamo quindi un intervallo temporale di lunghezza T, e dividiamolo in N sottointervalli di lunghezza $\frac{T}{N}$. In un sottointervallo può accadere qualcosa o può non accadere nulla, con probabilità rispettive $P_{\left(\frac{T}{N}\right)}$ ed $1 - P_{\left(\frac{T}{N}\right)}$.

Sotto queste ipotesi la probabilità quindi di avere K successi è , come abbiamo visto, data da $B\left(N, K, P_{\left(\frac{T}{N}\right)}\right)$. Quando $N \to \infty$ per ottenere un probabilità finita di avere 0, 1, 2, ... eventi in un intervallo di tempo macroscopico bisogna che $N\ P_{\left(\frac{T}{N}\right)}$ tenda ad un limite finito: bisogna che

$$N\ P_{\left(\frac{T}{N}\right)} \to \lambda T\ . \tag{2.27}$$

Vale quindi il risultato già ottenuto sulla convergenza di una distribuzione binomiale ad una distribuzione di Poisson. La probabilità di K eventi tende dunque a

$$P(K, \lambda T) = e^{-\lambda T} \frac{(\lambda T)^K}{K!}\ . \tag{2.28}$$

La probabilità che non si abbia alcun evento è $e^{-\lambda T}$: se pensiamo al caso della disintegrazione, che abbiamo citato come esempio tipico, λ^{-1} può essere interpretato come una *vita media*.

Notiamo anche che l'argomento che abbiamo esposto per un intervallo temporale T può essere esteso all'analisi di una distribuzione spaziale, ottenendo risultati analoghi.

Calcoliamo in ultimo i primi momenti (media e varianza) di una distribuzione di Poisson con parametro λ. Per il valore di aspettazione di una variabile aleatoria x distribuita secondo Poisson si ha che

$$\langle x \rangle = \sum_{K=0.\infty} K\ P(K, \lambda) = e^{-\lambda} \sum_{K=0.\infty} \frac{K\ \lambda^K}{K!} = \lambda \sum_{K=0.\infty} P(K-1, \lambda) = \lambda\ . \tag{2.29}$$

Analogamente

$$\sigma^2 = \sum_{K=0.\infty} K^2\ P(K, \lambda) - \lambda^2 = \lambda \left(\sum_{K=0.\infty} K\ P(K-1, \lambda) - \lambda \right) = \lambda\ . \tag{2.30}$$

2.4 La Distribuzione Gaussiana

2.4.1 Definizione e Momenti

La *distribuzione di probabilità Gaussiana* o *normale* con media μ e varianza σ^2 è definita da

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\ e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\ . \tag{2.31}$$

Nel caso in cui il valor medio $\mu = 0$ si ha una curva "a campana" simmetrica intorno all'asse x: se si prende ad esempio $\sigma^2 = 1$ la curva ha una larghezza tipica uguale ad uno.

Diamo nella sezione (3.5.4) alcuni risultati su integrali tipici di funzioni Gaussiane. Questi mostrano, ad esempio, che l'integrale di $F(x)$ fra $-\infty$ e $+\infty$ è 1, e cioè che la distribuzione che abbiamo scritto è ben normalizzata.

Inoltre, ovviamente, per la (2.31) si ha che $\langle x \rangle = \mu$ e che $\langle x^2 \rangle - \mu^2 = \sigma^2$.

2.4.2 Relazione con la Distribuzione Binomiale

Vogliamo mostrare ora che nel limite di N grande la distribuzione binomiale è ben approssimata dalla distribuzione Gaussiana. I risultati di questo tipo culminano nel teorema del limite centrale, che dimostreremo presto, nella sezione (3.2). Dimostriamo qui la convergenza della distribuzione binomiale a quella Gaussiana nel caso simmetrico, in cui $p = 1 - p = q = \frac{1}{2}$ (il teorema per il caso non simmetrico segue una linea di dimostrazione molto simile, con delle complicazioni tecniche aggiuntive: ci limiteremo ad enunciarlo).

Cominciamo considerando dunque il caso di $2N$ eventi binomiali con $p = \frac{1}{2}$. In questo caso abbiamo mostrato in sezione (2.2.2) che i coefficienti $B(2N, K, \frac{1}{2})$ come funzione di K intero hanno un solo massimo (dato che $p = \frac{1}{2}$ ed il numero di eventi è pari). Indichiamo nel seguito con A_K il coefficiente $B(2N, N+K, \frac{1}{2})$: A_0 è quindi il termine in cui i coefficienti binomiali assumono il valore massimo, $B(2N, N, \frac{1}{2})$ (si veda la sezione (2.2.2)). Dato che $A_K = A_{-K}$ ci basterà considerare solo i valori di K positivi. Calcoliamo quindi

$$\frac{A_K}{A_0} = \frac{B(2N, N+K, \frac{1}{2})}{B(2N, N, \frac{1}{2})} = \frac{N!}{(N-K)!} \frac{N!}{(N+K)!} = \frac{N\ (N-1)\ \ldots\ (N-K+1)}{(N+K)\ (N+K-1)\ \ldots\ (N+1)} \ . \tag{2.32}$$

In primo luogo ricordiamo che stiamo assumendo che N sia grande. Notiamo anche che per K grande i rapporti che abbiamo scritto saranno piccoli (il denominatore sarà molto più grande del numeratore), e potranno essere trascurati: saranno quindi rilevanti solo i termini con $\frac{K}{N}$ piccolo.

Dividiamo quindi numeratore e denominatore per N^K: ognuno dei fattori dell'ultima espressione che abbiamo scritto viene quindi moltiplicato per un fattore $\frac{1}{N}$, ed ha la forma

$$1 + \frac{J}{N} \simeq e^{\frac{J}{N} + O\left((\frac{J}{N})^2 \right)} \ , \tag{2.33}$$

dove J va da $-K$ a K. Quindi, in questo limite,

$$\frac{A_K}{A_0} \simeq \frac{e^{0 - \frac{1}{N} - \frac{2}{N} - \ldots - \frac{K-1}{N}}}{e^{\frac{K}{N} + \frac{K-1}{N} + \ldots + \frac{1}{N}}} = e^{-\frac{K}{N} - \frac{2}{N}((K-1)+(K-2)+\ldots+1)} = e^{-\frac{K^2}{N}} \ , \tag{2.34}$$

che vale a meno di termini di ordine $O\left(\frac{K^4}{N^2}\right)$. Dato che per grandi valori di K, dove la formula precedente non è valida, la condizione di normalizzazione $\sum_K A_K = 1$ fissa il valore di A_0. In conclusione abbiamo dimostrato che, nel limite di N che tende ad ∞, per valori di $K < K_{MAX}$, dove K_{MAX} è tale che $\frac{K_{MAX}^3}{N^2} \to 0$.

$$A_K \simeq \frac{2}{\sqrt{2\pi N}} e^{-\frac{2K^2}{N}} \ , \tag{2.35}$$

dove il punto di partenza era una distribuzione binomiale simmetrica, cioè con $p = \frac{1}{2}$. Come abbiamo già detto si tratta di un caso particolare del teorema del limite centrale, che discuteremo in più grande generalità nella sezione (3.2).

Ovviamente avremmo potuto stimare A_0 usando la formula di Stirling (3.91) ottenendo lo stesso risultato. Sarebbe anche stato possibile usare direttamente la formula di Stirling direttamente nell'equazione 2.34, semplificando la prova, ma rendendola forse un po' troppo compatta.

Figura di confronto N=10 p=1/2

Un risultato analogo, che non ricaveremo esplicitamente qui, può essere ottenuto per valori qualunque di p. Lo schema di dimostrazione è simile a quello che abbiamo visto, con l'aggiunta di alcune complicazioni tecniche. Si trova che

$$B(N, I_{MAX} + K, p) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi N p(1-p)}} e^{-\frac{1}{2}\frac{K^2}{Np(1-p)}} \ , \tag{2.36}$$

dove I_{MAX} è l'intero dove B assume il suo valore massimo. La distribuzione Gaussiana che abbiamo ottenuto ha valore medio Np e varianza $Np(1-p)$: questo è ovvio dato che si tratta, come abbiamo mostrato in precedenza, dei valori che caratterizzano la distribuzione binomiale di partenza.

Un'altra figura p=1/4 N=20 tutte le figure fino adesso in scala lineare.

2.4.3 Relazione con la Distribuzione di Poisson

Abbiamo già visto che per N grandi e valori di $\lambda = Np$ finiti la distribuzione binomiale è ben approssimata da una distribuzione di Poisson, cioè

$$B(N, K, p) \simeq P(K, \lambda) \ . \tag{2.37}$$

È chiaro che quindi dai risultati della sezione precendente che in certe condizioni una distribuzione di Poisson tenderà ad una distribuzione Gaussiana.

Per valori di λ piccoli la distribuzione di Poisson, anche nel limite di N grande, è apprezzabilmente diversa da una Gaussiana: se invece λ non è troppo piccolo le due distribuzioni risulteranno molto simili. Questo risultato è ancora, in sostanza, collegato profondamente al teorema del limite centrale (3.2).

È possibile ad esempio mostrare che, per $\lambda \to \infty$, e le due costanti c_1 e c_2 fisse,

$$\sum_{K=\lambda\left(1+\frac{c_1}{\sqrt{\lambda}}\right)}^{\lambda\left(1+\frac{c_2}{\sqrt{\lambda}}\right)} P(K, \lambda) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{c_1}^{c_2} dx \ e^{-\frac{x^2}{2}} \ , \tag{2.38}$$

dove per la dimostrazione si usa la formula di Stirling (3.91).

In altri termini la distribuzione di probabilità per la variabile $x = \frac{k-\lambda}{\lambda^{1/2}}$ tende nel limite $\lambda \to \infty$ a

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{2.39}$$

Chapter 3

Legge dei Grandi Numeri e Teorema del Limite Centrale

In questo capitolo discuteremo la distribuzione di probabilità della quantità

$$y_N \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i \ , \tag{3.1}$$

per grandi valori di N. Assumeremo che le variabili aleatorie x_i sia mutualmente indipendenti e siano tutte distribuite secondo la stessa distribuzione di probabilità. In altri termini

$$P(x_1, x_2, \ldots x_N) = P(x_1)P(x_2) \ldots P(x_N). \tag{3.2}$$

In generale due variabili x e y sono indipendenti se e solo se la probabilità di avere l'evento (x,y) si fattorizza del prodotto delle due probabilità separate:

$$P(x, y) == P(x)Q(y) \tag{3.3}$$

In altri termini abbiamo che la probabilità di x condizionata a y non dipende da y e viceversa:

$$P(x|y) = P(x); \qquad P(y|x) = Q(y) \tag{3.4}$$

Il caso in cui le variabili x_i sono correlate (ovvero non sono scorrelate) è estremamente più difficile da trattare, e sarà studiato nei capitoli successivi solo in alcuni casi particolari. Al contrario, nel caso in cui la distribuzione di probabilità delle x_i (supposte scorrelate) dipenda da i, si possono ottenere risultati soddisfacenti con semplici generalizzazioni delle tecniche qui introdotte.

I concetti che intervengono nella formulazione e nella dimostrazione della *legge dei grandi numeri* e del *teorema del limite centrale* sono alla base della nostra concezione intuitiva di probabilità, e sono perciò da analizzare con cura.

3.1 La Legge dei Grandi Numeri

3.1.1 Enunciato della Legge dei Grandi Numeri

Il concetto fondamentale espresso mediante la legge dei grandi numeri (nelle sue varie formulazioni) può essere sintetizzando affermando che nel limite in cui $N \to \infty$ la variabile y_N, definita nella (3.1), tende a $\mu \equiv \langle x \rangle = \int dx \ P(x) \ x$. Notiamo subito che in generale questa legge è vera solo se il valore medio di $|x| \equiv \int dx P(x)|x|$ è finito. In generale se questa condizione non è soddisfatta la legge dei grandi numeri non si applica. Discuteremo in seguito, nella sezione dedicata al teorema del limite centrale, degli esempi in cui, appunto, la legge non è vera.

Esistono due diversi teoremi, detti rispettivamente legge *debole* e legge *forte* dei grandi numeri.

- La *forma debole* stabilisce che la probabilità che $|y_N - \mu|$ sia maggiore di ϵ tende a 0 quando N tende ad infinito. In altri termini la probabilità che $|y_N - \mu|$ risulti minore di ϵ tende a 1 quando N cresce. In altri termini la probabilità $P_N(x)$ tende a $\delta(x - \mu)$.

- Nella *forma forte* dobbiamo considerare la successione infinita di sequenze di variabili aleatorie x_i e delle corrispondenti medie y_N. Si considera la probabilità che per almeno un N maggiore di M avvenga che $|y_N - \mu|$ sia maggiore di ϵ, La legge forte implica che questa probabilità tende a 0 quando M tende ad ∞ per qualsiasi ϵ positivo.. In altri termini la probabilità che la relazione $|y_N - \mu| < \epsilon$ sia vera <u>per tutti gli $N > M$</u> tende ad 1 quando M tende ad infinito. La forma debole implica solo che la probabilità che la relazione $|y_N - \mu| < \epsilon$ sia vera <u>per $N = M$</u> tende ad 1 quando M tende ad infinito.

Noi ci limiteremo a dimostrare il teorema nella forma debole nel caso a varianza limitata, utilizzando il lemma di Tchebichev (la legge dei grandi numeri non richiede infatti che la distribuzione di probabilità sia dotata di una varianza finita). Nel caso a varianza non limitata la legge dei grandi numeri sarà una conseguenza del teorema generalizzato del limite centrale. Per motivi di brevità non presentiamo la dimostrazione della legge dei grandi numeri nella forma forte, la quale è valida sotto le stesse condizioni della forma forte (ovvero $\langle |x| < \infty$).

Ovviamente la forma forte della legge ha implicazioni più notevoli che la forma debole. La forma debole implica che y_N è vicina a μ per un dato valore di N grande, mentre la forma forte implica anche che quando si fa crescere N il valore di y_N si avvicina a μ.

Va notato che succede spesso di attribuire erroneamente alle legge dei grandi numeri conseguenze che in realtà non ne derivano. Poniamo ad esempio al lettore due domande, e lo invitiamo a dedurne la risposta. Due avversari giocano M volte a testa e croce, con sequenze di E eventi (un punto parziale è vinto da chi ha più teste dopo E lanci, e la partita è vinta da chi ha più punti parziali dopo M sequenze): ci si può aspettare, secondo la legge dei grandi numeri, che per N ed M grandi ci sia stato in media un numero molto simile di teste e croci? Consideriamo invece una sola sequenza molto lunga, vinta dal giocatore che aveva scelto testa: possiamo aspettarci, dalla legge dei grandi numeri, che in media, in questa sequenza, si sia avuto un numero di teste molto simile a quello delle croci? Ovvero, ci si può aspettare, nel primo e nel secondo caso, che il giocatore che ha vinto la sfida sia stato in testa mediamente per la metà del tempo?

3.1.2 Il Lemma di Tchebichev

Definiamo

$$\mu \equiv \langle x \rangle = \int dx \ P(x) \ x \ , \tag{3.5}$$

e

$$\sigma^2 \equiv \langle x^2 \rangle - \mu^2 = \int dx \ P(x) \ x^2 - \mu^2 = \int dx \ P(x) \ (x - \mu)^2 \ . \tag{3.6}$$

Supponiamo che la varianza σ^2 sia finita. Il *Lemma di Tchebichev* afferma che la probabilità che avvenga l'evento $|x - \mu| > t$ è minore di $\left(\frac{\sigma}{t}\right)^2$. La dimostrazione è immediata:

$$\sigma^2 \equiv \int dx\ P(x)\ (x-\mu)^2 > \int_{|x-\mu|>t} dx\ P(x)\ (x-\mu)^2 > t^2 \int_{|x-\mu|>t} dx\ P(x)\ . \tag{3.7}$$

Si ha quindi che

$$\int_{|x-\mu|>t} dx\ P(x) < (\frac{\sigma}{t})^2\ , \tag{3.8}$$

QED. Il Lemma di Tchebichev ha, come vedremo meglio, grande importanza teorica, ma dal punto di vista quantitativo la stima (3.8) non è una stima di grande precisione (è facile stabilire dei limiti più stringenti se si fanno ipotesi ulteriori).

3.1.3 Dimostrazione della Legge dei Grandi Numeri

Osserviamo preliminarmente che la varianza della somma di due o più variabili indipendenti è uguale alla somma delle varianze. Infatti a causa dell'indipendenza $\langle ab\rangle = \langle a\rangle\langle b\rangle$ e quindi

$$\langle (a+b)^2\rangle = \langle a^2\rangle + 2\langle a\rangle\langle b\rangle + \langle b^2\rangle \tag{3.9}$$

che raggruppando i termini è ancora uguale a

$$= \langle (a-\langle a\rangle)^2\rangle + \langle (b-\langle b\rangle)^2\rangle + \langle a+b\rangle^2\ . \tag{3.10}$$

Spostando l'ultimo termine a sinistra dell'uguale si dimostra la tesi. Generalizzando il ragionamento ad N variabili indipendenti si ottiene che la varianza della quantità $N\ y_N$ è data da $N\sigma^2$ mentre il suo valor medio è ovviamente $N\mu$. Il lemma di Tchebichev implica quindi che la probabilità dell'evento $(N|y_N-\mu|>t)$ è minore di $\frac{\sigma^2 N}{t^2}$.

Scegliendo $t = N\epsilon$ si ha per la probabilità dell'evento $(|y_N-\mu|>\epsilon)$ è certamente più piccola od uguale a $\frac{\sigma^2}{N\epsilon^2}$ e questa stima ad ϵ fissato (piccolo o grande a piacere) tende a zero quando N tende ad ∞. QED.

3.2 Dimostrazione del Teorema del Limite Centrale

Il *teorema del limite centrale* afferma che se consideriamo N variabili indipendenti x_i (sotto l'ipotesi che μ e σ^2, definiti nella sezione precedente, siano entrambi finiti), la distribuzione di probabilità $c_N(w)$ della variabile

$$w \equiv \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \mu)\ , \tag{3.11}$$

nel limite $N \to \infty$ tende ad una distribuzione Gaussiana con varianza σ, ovvero

$$\lim_{N\to\infty} c_N(w) \equiv P_\infty(w) = \frac{\exp(-\frac{w^2}{2\sigma^2})}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}}\ . \tag{3.12}$$

Ricordiamo che la legge dei grandi numeri implica che nel limite $N \to \infty$ la distribuzione della probabilità della variabile $z = N^{-1/2}w$ tende a $\delta(z)$.

Assumeremo nel seguito, senza perdere in generalità, che $\mu = 0$ (μ può essere messo a zero mediante una semplice ridefinizione della variabile x (ovvero usando una nuova variabile $y = x - \mu$).

Indichiamo con $\tilde{P}(q)$ la trasformata di Fourier della distribuzione di probabilità $P(x_i)$ della variabile aleatoria elementare x_i (siamo sotto l'ipotesi che le x_i siano tutte distribuite secondo la stessa $P(x)$):

$$\tilde{P}(q) \equiv \int dx\ e^{iqx}\ P(x)\ . \tag{3.13}$$

Applicando ripetutamente il teorema di convoluzione (si veda l'appendice (3.5.3)) si trova che la trasformata di Fourier di $c_N(w)$ è data da:

$$\tilde{c}_N(q) \equiv \tilde{P}(\frac{q}{N^{\frac{1}{2}}})^N = \exp\left(N\log\left(\tilde{P}\left(\frac{q}{N^{\frac{1}{2}}}\right)\right)\right)\ , \tag{3.14}$$

dove il fattore $N^{\frac{1}{2}}$ è la normalizzazione della variabile w, mentre l'esponente N è originato dalla somma sulle N variabili elementari. Il risultato precedente implica immediatamente che la somma di variabili gaussiane e gaussiana.

Tutti i punti dove $|\tilde{P}(q)| < 1$ danno un contributo che va a zero esponenzialmente con N. Nel limite $N \to \infty$ sopravvivono solo i punti dove $|\tilde{P}(q)| = 1$ e i loro intorno. Consideriamo per il momento il contributo a $q = 0$, infatti $\tilde{P}(0) = 1$, conseguenza della normalizzazione della probabilità. Nel limite di N grande possiamo sviluppare

$$N\log\left(\tilde{P}\left(\frac{q}{N^{\frac{1}{2}}}\right)\right) = N\log\left(\int dx\ \exp\left(\frac{iqx}{N^{\frac{1}{2}}}\right)P(x)\right) = N\log\left(1-\frac{q^2\sigma^2}{2N}+O\left(\frac{q^3m_3}{N^{\frac{3}{2}}}\right)\right)\ , \tag{3.15}$$

dato che abbiamo posto $\mu = 0$. Con m_3 abbiamo indicato il momento terzo della distribuzione di probabilità $P(x)$, e continuando lo sviluppo otteniano

$$N\log\left(\tilde{P}\left(\frac{q}{N^{\frac{1}{2}}}\right)\right) = -\frac{q^2\sigma^2}{2}+O\left(\frac{q^3\sigma^3S}{N^{\frac{1}{2}}}\right)\ . \tag{3.16}$$

dove S è la torsione (skewness) definita per $\mu = 0$ da

$$S = \frac{\langle x^3\rangle}{\langle x^2\rangle^{3/2}} \tag{3.17}$$

La torsione è nulla per una distribuzione di probabilità simmetrica intorno a $x = \mu$.

Quindi per N grande

$$\tilde{c}_N(q) = e^{-\frac{q^2\sigma^2}{2}} + O(N^{-\frac{1}{2}})\ , \tag{3.18}$$

e mediante trasformata inversa di Fourier (notando che la trasformata di Fourier di una funzione Gaussiana è ancora una funzione Gaussiana)

$$c_N(w) = \frac{e^{-\frac{w^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} + O(N^{-\frac{1}{2}})\ , \tag{3.19}$$

QED.

Le correzioni alla distribuzione asintotica Gaussiana sono di ordine $N^{-1/2}$ nell'ipotesi in cui m_3 sia finito e non nullo.

Consideriamo ora per semplicità il caso di una distribuzione simmetrica, che soddisfi cioè la condizione $P(x) = P(-x)$: qui m_3 è nullo, mentre assumeremo che almeno i momenti quarto e sesto, m_4 ed m_6, siano finiti. Ovviamente considerazioni molto simili a quelle che stiamo per fare possono essere elaborate nel caso non simmetrico (e le suggeriamo anzi come esercizio al lettore). Sviluppando quindi all'ordine superiore non banale si vede subito che

$$\tilde{c}_N(q) = e^{-\frac{q^2\sigma^2}{2}+\frac{q^4\sigma^4}{24N}(K-3)+O(N^{-2})} \ , \tag{3.20}$$

dove K è la *kurtosis* che caratterizza la distribuzione di probabilità $P(x)$,

$$K \equiv \frac{m_4}{\sigma^4} = \frac{\langle x^4 \rangle}{\langle x^2 \rangle^2} \ . \tag{3.21}$$

Possiamo a questo punto espandere al primo ordine in $\frac{1}{N}$, e trasformare inversamente secondo Fourier. Un semplice calcolo dà

$$c_N(w) = \frac{e^{-\frac{w^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(1 - \frac{K-3}{24N} H_4(\frac{w}{\sigma}) + O(\frac{1}{N^2})\right) \ , \tag{3.22}$$

dove abbiamo definito la funzione che governa le correzioni dominanti alla distribuzione asintotica Gaussiana

$$H_4(z) \equiv z^4 - 6z^2 + 3 \ , \tag{3.23}$$

ed è da notare che si tratta del quarto *polinomio di Hermite.*

Figure per N=10 distribuzioni ± 1, *piatta fra -1 e 1,* $\exp -C|1+x^2|^{1/4}$ *distribuzione vera, teorema limite centrale e correzione due volte in scala lineare e logaritmica* Nello stesso modo quando la torsione è diversa da zero le correzioni dominanti sono

$$c_N(w) = \frac{e^{-\frac{w^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(1 - \frac{S}{6^{1/2}} H_3(\frac{w}{\sigma}) + O(\frac{1}{N})\right) \ , \tag{3.24}$$

dove

$$H_3(z) \equiv z^3 - 3z \ , \tag{3.25}$$

Aver ottenuto esplicitamente la forma delle correzioni dominanti permette un controllo quantitativo dell'approccio alla distribuzione asintotica per grandi N.

È interessante notare che le correzioni dominanti nel caso di una distribuzione simmetrica, proporzionali a $\frac{1}{N}$, si annullano se la kurtosis K è uguale a 3. Questo è estremamente ragionevole. Infatti se la distribuzione $P(x)$ è Gaussiana anche la distribuzione $c_N(w)$ deve essere Gaussiana, dato che la somma di variabili Gaussiane è anch'essa una variabile con distribuzione Gaussiana, come è facile verificare a partire dalle formule precedenti: in questo caso tutte le correzioni in potenze inverse di N sono nulle. Una distribuzione di probabilità con lo stesso valore della kurtosis assunto da una Gaussiana, cioè tre, ha quindi una forte somiglianza con una Gaussiana, e le correzioni dominante sono nulle: in questo caso le correzioni potranno cominciare (per una distribuzione simmetrica) solo dall'ordine $\frac{1}{N^2}$.

Abbiamo tralasciato di considerare quale e il contributo di un eventuale altro punto in q^* in cui $|\tilde{P}(q^*)| = 1$, per esempio $\tilde{P}(q^*) = \exp(i\alpha)$. Un tale punto addizionale darebbe un contributo alla distribuzione di probabilità proporzionale a

$$P^N_{ex}(w) = \exp(-Aw^2 + iN(\alpha + q^* w)) \tag{3.26}$$

Un tale contributo (anche per $\alpha = 0$) tende a zero in un senso appropriato (Che sarà meglio spiegato nell'appendice) quando N va ad infinito. Il fatto che questo termine tenda a zero sembra a prima vista strano, in quanto per ciascun valore di w fissato è una quantità di ordine 1, tuttavia per ogni funzione $f(w)$ regolare

$$\int dw f(w) P_{ex}^{N}(w) \to 0 \tag{3.27}$$

quando N va ad infinito: i termini positivi si cancellano con i termini negativi. Nel caso in cui la funzione $f(w)$ è analitica in una striscia attorno all'asse reale, l'integrale nell'equazione 3.27 va a zero esponenzialmente con N. In altri termini una funzione limitata, le cui oscillazioni diventano sempre più veloci, va a zero debolmente con un'opportuna definizione di convergenza debole.

3.2.1 Dimostrazione Alternativa del Teorema del Limite Centrale

Vogliamo discutere adesso uno schema di dimostrazione del teorema del limite centrale che si basa su ipotesi più restrittive di quelle assunte nella dimostrazione precedente. Assumeremo qui a priori l'esistenza di tutti i momenti della funzione c_N. La ragione che ci porta ad illustrare questa seconda dimostrazione è che la prova basata su questo schema ha il vantaggio di essere più facilmente generalizzabile al caso in cui le variabili x non siano indipendenti, ma siano invece fra loro correlate (caso che non discuteremo in queste note).

Per semplicità supporremo che la distribuzione $P(x)$ sia pari. Consideriamo la variabile w definita in (3.11), con $\mu = 0$ (dato che la distribuzione è pari e $\langle x \rangle = 0$). La nostra dimostrazione sarà basata su un teorema (che non dimostreremo qui, si veda ad esempio [3]) che ci dice che *se la funzione $f(z)$ è positiva ed i suoi momenti*

$$f_j \equiv \int dz\ f(z)\ z^j \tag{3.28}$$

sono convergenti e non crescono con j più velocemente di $(j!)^2$, allora $f(z)$ è univocamente determinata dai suoi momenti.

Procederemo quindi mostrando che tutti i momenti pari di $c_N(w)$ tendono per grandi N ai momenti di una distribuzione Gaussiana (i momenti dispari sono nulli per costruzione a causa della simmetria di $P(x)$). Grazie al teorema precedente questo basta a dimostrare che, per $N \to \infty$, $c_N(w)$ tende ad una distribuzione Gaussiana.

Dimostreremo quindi che $\forall j$, per $N \to \infty$

$$\int dw\ c_N(w)\ w^{2j} \to \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int dw\ e^{-\frac{w^2}{2\sigma^2}}\ w^{2j} = (j-1)!!\ \sigma^{2j}\ , \tag{3.29}$$

dove per ottenere il valore dei momenti della distribuzione Gaussiana (l'ultima uguaglianza della formula precedente) si può procedere con cambi di variabili eliminando la dipendenza da σ e passando alla variabile $y = w^2$. In termini di y l'integrale può essere valutato utilizzando le proprietà della funzione Gamma di Eulero Γ discusse nell'appendice (3.5.5).

Se sapremo dimostrare quindi che tutti i momenti della funzione $c_N(w)$ tendono per $N \to \infty$ a quelli di una distribuzione Gaussiana, questo implicherà che la funzione $c_N(w)$ debba tendere ad una distribuzione Gaussiana (supponendo che non ci siano difficoltà nello scambiare l'ordine in cui vengono effettuati il limite $N \to \infty$ ed il calcolo dei momenti).

Il calcolo del momento secondo è immediato. Indicando con $\langle \cdot \rangle$ il valore di aspettazione rispetto alla distribuzione di probabilità $P(x)$ abbiamo

$$\langle w^2 \rangle = \langle \left(N^{-\frac{1}{2}} \sum_{i=1}^{N} x_i \right)^2 \rangle = \frac{1}{N} \langle \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \sigma^2\ , \tag{3.30}$$

dato che le x_i sono indipendenti ed a media nulla.

Il momento quarto ha forma

$$\langle w^4 \rangle = \langle \left(N^{-\frac{1}{2}} \sum_{i=1}^{N} x_i \right)^4 \rangle = N^{-2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \langle x_i x_k x_l x_m \rangle \ . \tag{3.31}$$

I contributi non nulli a questa somma sono quelli in cui gli indici sono uguali a due a due o tutti e quattro uguali (i due casi vanno tenuti distinti): tutti gli altri contributi si annullano a causa dell'integrazione sulla $P(x)$ simmetrica. Quindi si vede facilmente che

$$\langle x_i x_k x_l x_m \rangle = (\delta_{i,k}\delta_{l,m} + \delta_{i,l}\delta_{k,m} + \delta_{i,m}\delta_{k,l})\, \sigma^4 + \delta_{i,k}\delta_{i,l}\delta_{i,m}(m_4 - 3\sigma^4) \ , \tag{3.32}$$

dove le δ sono funzioni delta di Kroneker. I contributi con due delta sono quelli in cui due coppie di indici sono uguali, e moltiplicano $\langle x^2 \rangle^2$. I contributi con tre delta sono quelli in cui gli indici sono tutti uguali: qui abbiamo a moltiplicare $\langle x^4 \rangle$, ed inoltre per ognuno di questi contributi sottraiamo un fattore che abbiamo aggiunto in sovrappiù fra i termini con due delta (dove i quattro indici potevano essere uguali, aggiungendo un contributo improprio). Facendo adesso le quattro somme si trova:

$$\langle w^4 \rangle = 3\sigma^4 + \frac{(m_4 - 3\sigma^4)}{N} \ , \tag{3.33}$$

dato che i termini con due δ riceve un fattore N^2 dalle due somme residue, mentre il termine con tre δ riceve un fattore N.

Il termine dominante nel limite $N \to \infty$ è quello in cui tutte le copie sono differenti, perchè qui è massimo il numero di fattori N forniti da somme che non sono state inchiodate da funzioni δ. È ovvio che esattamente lo stesso meccanismo è valido per i momenti di ordine superiore.

Nel calcolare ora i momenti di ordine più elevati $\langle w^j \rangle$ resta il problema di valutare il numero di contributi dominanti non triviali (ovvero l'analogo del fattore 3 che abbiamo trovato nel calcolo di $\langle w^4 \rangle$). Questo valore $M(j)$ è dato dal numero di modi diversi in cui j oggetti si possono raggruppare a due a due. Nel caso $j = 4$, $M(4)$ è uguale a 3: infatti possiamo accoppiare il primo oggetto con il secondo e il terzo con il quarto, il primo con il terzo ed il secondo con il quarto, il primo con il quarto e il secondo con il terzo. Il nostro risultato finale dirà che

$$\langle w^j \rangle = M(j)\ \sigma^j \ . \tag{3.34}$$

Resta da valutare $M(j)$ (per j pari). Dato che abbiamo $j-1$ possibili scelte per l'indice da accoppiare al primo indice, $j-3$ scelte residue per l'indice da accoppiare al primo degli indici rimanenti, e così via, possiamo concludere che

$$M(j) = (j-1)(j-3)\ ...\ 1 = (j-1)!! \ , \tag{3.35}$$

che è il risultato desiderato. QED.

3.3 Teorema del Limite Centrale Generalizzato

Siamo interessati adesso a generalizzare il teorema del limite centrale al caso di distribuzioni di probabilità $P(x)$ con varianza infinita. Per semplicità considereremo il caso di distribuzioni di probabilità simmetriche. Supporremo che per grandi valori di x si abbia che

$$P(x) \approx \frac{k}{|x|^\alpha} \ , \tag{3.36}$$

dove k è una costante. La zona di valori interessanti è quella di α più piccolo di 3 (per $\alpha > 3$ la varianza è finita) e più grande di 1 (altrimenti la funzione $P(x)$ non può avere integrale 1, e non può essere una buona distribuzione di probabilità normalizzabile). Un'analisi più fine, che non svolgeremo qui, potrebbe prendere in considerazione i casi in cui la funzione $P(x)$ non va a zero come una potenza semplice, ma in cui sono presenti ad esempio correzioni logaritmiche.

Come mostreremo nell'appendice (3.5.3) in questo caso la trasformata di Fourier $\tilde{P}(q)$ non è differenziabile intorno a $q = 0$ (la sua derivata seconda è la varianza che è divergente per ipotesi), e per piccoli q si comporta come

$$\tilde{P}(q) = 1 - K|q|^{\alpha-1} + O(q^2) \ , \tag{3.37}$$

dove

$$K = k\frac{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(\frac{1-\alpha}{2})}{2^{\alpha-1}\Gamma(\frac{\alpha}{2})} \ . \tag{3.38}$$

Definiamo ora

$$w = N^{-\rho}\sum_{i=1}^{N} x_i \ , \tag{3.39}$$

con

$$\rho = \frac{1}{\alpha - 1} \ . \tag{3.40}$$

Si vede quindi che la trasformata di Fourier della distribuzione di probabilità di w è data da

$$e^{N\log\left(A\left(\frac{q}{N^\rho}\right)\right)} \propto e^{-K|q|^{\alpha-1}} \ . \tag{3.41}$$

In questo caso il teorema del limite centrale generalizzato implica che le fluttuazioni rispetto alla media sono di ordine $N^{-\rho}$. Inoltre quando $N \to \infty$ la distribuzione di probabilità $c_N(w)$ è data asintoticamente da:

$$\lim_{N\to\infty} c_N(w) \equiv c(w) = \frac{1}{2\pi}\int dq \ e^{iqw-K|q|^{\alpha-1}} \ , \tag{3.42}$$

che non è una distribuzione Gaussiana ($c(w) \propto \frac{k}{|w|^\alpha}$ per grandi w). Nel caso $\alpha = 2$ l'integrazione è elementare e si ottiene

$$c(w) = \frac{K}{\pi(w^2 + K^2)} \ , \tag{3.43}$$

ovvero una distribuzione di Cauchy.

Il caso $\alpha = 2$ è particolarmente interessante in quanto la media di N variabili non converge per N alla media fatta sulla distribuzione di probabilità, ma continua a fluttuare, pur rimanendo un numero di ordine 1 quando N va ad infinito. In generale, per $\alpha < 2$ la media sulla distribuzione di probabilità è divergente e la media di N variabili risulta essere di ordine $N^{(2-\alpha)/(\alpha-1)}$. In questo caso la media diventa sempre più grande all'aumentare di N.

La situazione è molto differente da quella dell'usuale teorema del limite centrale. In questo primo caso un termine generico non può dare un contributo a w di ordine 1. in quanto una singola variabile dovrebbe essere di ordine $N^{1/2}$ is che è certamente impossibile (nel caso di una distribuzione di probabilità limitata) o estremamente piccola (nel caso di distribuzione di probabilità a decrescita rapida).

Figura: esempio con $x^-2.5$ $N = 10$ e $N = 40$ e paragone con il caso asintotico Qui la musica e' completamente differente. Se le x variabili hanno un distribuzione di probabilità $P(x)$, il massimo X di queste N variabili è all'incirca nella regione dove $\int_X^\infty dx P(x) = O(1/N)$, ovvero per $X = N^\rho$; quindi ci sono un numero finito di variabili che danno un contributo di ordine 1 alla quantita' w.

Diremo di più : il contributo principale all'equazione 3.39 fine da un numero limitato di termini: più precisamente, se ordiniamo le x in ordine decrescente in modulo abbiamo che

$$w_M = N^{-\rho} \sum_{i=1}^{M} x_i \ , \tag{3.44}$$

è una buona approssimazione a w anche quando N tende ad infinito e che anche dopo il limite N ad infinito la differenza $w - w^M$ va a zero quando M va ad infinito.

3.4 Distribuzioni stabili

Una distribuzione di probabilità è stabile se date due variabili indipendenti x e y estratte con la stessa distribuzione di probabilità $P(x)$ o $P(y)$ la variabile $z = A(x + y)$ ha la stessa distribuzione di probabilità $P(Z)$, per una scelta opportuna di A.

È facile convincersi che tutte le funzioni che si ottengono dai teoremi di asintotici tipo limite centrale devono essere distribuzioni stabili (anche se l'inverso potrebbe non essere vero). Infatti consideriamo una sequenza infinita di numeri aleatori indipendenti $x(i)$ per $i = 0, \infty$. Possiamo definire le quantità

$$x^{(n)}(i) = L^{-\rho} \sum_{k=0,L-1} x(Li + k), \tag{3.45}$$

dove $L = 2^n$. Ovviamente abbiamo che

$$x^{(1)}(i) = x(i). \tag{3.46}$$

In altri termini $x^{(n)}(1)$ è la media, opportunamente normalizzata, sui primi L valori, $x^{(n)}(2)$ e la media sui secondi L valori e cosi via.

È evidente che se ρ è stato scelto opportunatamente, il teorema del limite centrale assicura che le variabili $x^{(n)}(i)$, che sono anche loro indipendenti ed equidistribuite, hanno una distribuzione limite quando n tende ad infinito.

È utile notare la formula di ricorsione

$$x^{(n+1)}(i) = 2^{-\rho}(x^n(2i) + x^n(2i + 1), \tag{3.47}$$

che unita alla relazione 3.46 permette di calcolare ricorsivamente tutte le $x^{(n)}$ e la loro distribuzione di probabilità Infatti si ottiene che

$$\tilde{P}_{n+1}(q) = (\tilde{P}_n(A^{-1}q))^2 \ . \tag{3.48}$$

Dato che nel limite $n \to \infty$ sia le $x^{(n-1)}$ che $x^{(n)}$ sono distribuite secondo l'opportuna distribuzione di probabilità $P_\infty(x)$, quest'ultima deve essere una distribuzione di probabilità stabile.

Quindi se le variabili x sono indipendenti e distribuite secondo la legge di distribuzione di probabilità $P_\infty(x)$ anche le variabili

$$y(i) = 2^{-\rho}(x(2i) + x(2i+1)), \tag{3.49}$$

La distribuzione di probabilità $P_\infty(x)$ che soddisferá quindi l'equazione

$$\tilde{P}_\infty(q) = (\tilde{P}_\infty(A^{-1}q))^2. \tag{3.50}$$

La soluzione generale dell'equazione precedente è

$$\tilde{P}_\infty(q) = \exp(|q|f(\ln(|q|)) + qg(\ln|q|)), \tag{3.51}$$

dove f e g sono funzioni periodiche con periodo $\ln(A)$. Tuttavia se le funzioni f e g sono arbitrarie, non è detto che la funzione$\tilde{P}_\infty(q)$ precedentemente scritta sia la trasformata di Fourier di una probabilità (ovvero di una funzione positiva). Le distribuzioni di probabilità stabili sono state classificate dai matematici e molti risultati sono disponibili.

Le distribuzione stabili che abbiamo incontrato nei paragrafi precedenti sono caratterizzate dall'avere $g = 0$ e $f = costante$. Le distribuzioni Gaussiani hanno $\rho = \frac{1}{2}$ e quindi $A = 2^{-1/2}$; le altre distribuzioni che abbiamo incontrato nel caso di probabilità con code a potenza hanno valori di ρ più piccolo e quindi di $A = 2^{-\rho}$ più grande.

3.5 Appendici Matematiche

3.5.1 Convergenza di Funzioni

Accenneremo soltanto, qui, al problema della convergenza di funzioni, cercando di elencare e chiarire le assunzioni principali che varranno nel resto di questo testo. Questo è uno dei momenti in cui la teoria delle probabilità più chiaramente mostra il suo aspetto di teoria della misura. Noi ci limiteremo a fornire qui un punto fondante. Il lettore interessato e motivato è invitato ad approfondire l'argomento su uno dei numerosi testi che discutono la teoria della misura (si veda per esempio come testo base di analisi funzionale [10], familiare ai fisici, e [3, 4, 7]).

Molto spesso ci troveremo a considerare sequenze di funzioni di probabilità $p_n(x)$. L'indice n etichetta diverse funzioni di probabilità, ed il nostro interesse primario è nel limite in cui $n \to \infty$. Esiste, in qualche senso, un limite della sequenza $p_n(x)$ quando $n \to \infty$? Qual'è? In generale la nozione di distanza fra due funzioni ha carattere fondamentale, ed è necessaria alla comprensione di un gran numero di concetti.

Il nostro scopo sarà definire in modo matematicamente preciso cosa voglia dire affermare che *una funzione di probabilità $f(x)$ tende alla funzione $g(x)$* in un certo limite. Diverse nozioni di convergenza risultano utili in contesti in diversi: la convergenza (o la mancata convergenza) di una funzione ad certo limite in uno schema o in un altro è connessa a proprietà specifiche del sistema considerato[1].

Nel seguito ci limiteremo a distinguere[2] il caso in cui lo spazio topologico (per le definizioni

[1] Ricordiamo soprattutto ai nostri lettori fisici che questa problematica è particolarmente rilevante, ad esempio, per lo studio delle proprietà delle trasformazioni di gruppo di rinormalizzazione: si veda ad esempio [12, 2, 11] e le numerosissime referenze recenti lì contenute.

[2] Citiamo da pagina 213 di [10]: *The reader may be bewildered by the many topologies we have introduced on L(H): the weak, strong, and uniform operator topologies, the weak Banach space topology, the ultraweak topology. Later on we will encounter the ultrastrong topology. Why is it necessary to introduce all these topologies?*. Speriamo che il lettore risulti abbastanza incuriosito da questa lista per consultare le referenza [10] onde ottenere la risposta alla domanda.

dettagliate si veda uno dei testi citati in precedenza) di interesse è dotato di una *topologia forte* e quello in cui invece ci muniamo di una *topologia debole.*

Consideriamo le funzioni misurabili a quadrato sommabile $f(x)$. Le $f(x)$ soddisfano la proprietà di normalizzazione $\int dx f(x)^2 < \infty$, e formano il cosidetto spazio delle funzioni di tipo L^2.

Una successione di funzioni $f_n(x)$ tende a zero in *topologia forte* se per $n \to \infty$

$$\int dx\ f_n(x)^2 \to 0\ . \tag{3.52}$$

Invece si ha convergenza a zero in *topologia debole* se per $n \to \infty$

$$\int dx\ f_n(x)g(x) \to 0 \tag{3.53}$$

per qualunque funzione $g(x)$ appartenente a L^2.

Se una successione di funzioni tendo a zero fortemente e $\int dx\ f_n(x)^2$ rimane limitato quando $n \to \infty$, essa deve tendere a zero anche debolmente. Infatti

$$|\int dx\ f_n(x)g(x)| \leq \Big((\int dx\ f_n(x)^2)(\int dx\ g(x)^2)\Big)^{\frac{1}{2}}\ . \tag{3.54}$$

Al contrario è comune il caso di funzioni che tendono a zero debolmente mentre non tendono a zero fortemente. Vediamo due esempi.

- Consideriamo le funzioni definite sull'intervallo $(-\infty, +\infty)$. La successione di funzioni $f_n(x) \equiv f(x-n)$, dove f è una funzione di L^2, tende a zero debolmente, ma non ha nessuna intenzione di tendere a zero fortemente. Infatti $\int dx\ f_n(x)^2$ non dipende da n. Un buon esercizio per il lettore è discutere degli esempi espliciti di funzioni. Cosa succede, ad esempio, quando sia $f(x)$ che $g(x)$ sono delle distribuzioni Gaussiane?

- Consideriamo le funzioni definite sull'intervallo $[0,1]$. La successione di funzioni $f_n(x) \equiv \cos(2\pi nx)$, tende a zero debolmente. Infatti se definiamo

  $$c_n \equiv \int dx \cos(2\pi nx) g(x)\ , \tag{3.55}$$

  é un fatto intuitivo che la successione delle c_n tenda a zero per $n \to \infty$ (il coseno oscilla sempre più velocemente e le oscillazioni finiscono per mediarsi a zero), e quindi la successione $f_n(x)$ tenda a zero debolmente. Questo fatto può essere visto meglio definendo

  Invece $\int dx\ f_n(x)^2 = \frac{1}{2}$ non dipende da n, e la successione non tende a zero fortemente.

  Notiamo anche che definendo

  $$s_n \equiv \int dx \sin(2\pi nx) g(x)\ , \tag{3.56}$$

  e notando che

  $$\sum_{n=0,\infty} (c_n^2 + s_n^2) = \int dx\ g(x)^2\ . \tag{3.57}$$

  Quest'ultima espressione è finita per ipotesi (dato che g appartiene ad L^2). Ma allora le c_n e le s_n devono andare a zero quando $n \to \infty$, perché s così non fosse la somma dovrebbe divergere. Lo stesso tipo di argomento, applicato alla trasformata di Fourier implica che l'integrale definito in eq. (3.27) tende a zero quando N tende ad infinito.

L'uso di un'impalcatura matematica basata su diverse topologie è rilevante anche in teoria delle probabilità (come accennavamo già prima). In questo testo ci atterremo ad una sola delle possibili definizioni. Diremo infatti che la successione delle probabilità $p_n(x)$ tende alla probabilità limite $p(x)$ se sono vere le due condizioni:

1. $$\int dx\ p_n(x) g(x) \to \int dx\ p(x) g(x)\ , \tag{3.58}$$

   per tutte le funzioni $g(x)$ sufficientemente regolari (per esempio infinitamente differenziabili e a decrescita rapida all'infinito)[3].

2. La funzione limite $p(x)$ è ben normalizzata, cioè

   $$\int dx\ p(x) = 1\ . \tag{3.59}$$

   È possibile dimostrare in modo molto semplice e generale che vale la diseguaglianza $\int dx\ p(x) \leq 1$, cioè che la funzione di probabilità limite è normalizzata ad un valore minore di uno. Per farlo consideriamo un sistema con stati discreti etichettati dalla variabile k, e ricordiamo che le probabilità individuali $p_n^{(k)} \geq 0$ sono per ogni valore finito di n ben normalizzate, cioè $\sum_k p_n^{(k)} = 1$. Vogliamo dimostrare che se $\lim_{n\to\infty} p_n^{(k)} = p_\infty^{(k)}$ allora $\sum_k p_\infty^{(k)} \leq 1$.

   Per farlo consideriamo, ad n finito, la somma su un numero finito S degli infiniti stati (numerabili) permessi al sistema: dato che le probabilità sono positive e che stiamo sommando su un numero finito di stati, non su tutti, si ha che $\sum_{k=1}^S p_n^{(k)} \leq 1$. Ma su una somma fatta di un numero finito di termini posso prendere senza problemi il limite $n \to \infty$, ottenendo che $\sum_{k=1}^S p_\infty^{(k)} \leq 1$. Ma questo ora implica che $\lim_{S\to\infty} \sum_{k=1}^S p_\infty^{(k)} \leq 1$, QED. Questo stile di dimostrazione, che ci servirà ancora nel seguito,è basato sul fatto che il limite $n \to \infty$ può esser preso sulla somma finita. Poi la somma finita (con $n = \infty$) può essere estesa, e resta minore di uno.

Esempio: $2\cos(2\pi nx)^2 \to 1$ nell'intervallo $0 - 1$ quando $n \to \infty$. Infatti $2\cos(2\pi nx)^2 = 1 + \cos(4\pi nx)$ e abbiamo già visto che $\cos(4\pi nx)$ tende debolmente a zero quando n tende ad infinito. Quest'esempio fa vedere come il quadrato di una funzione chiedendo debolmente a zero possa non avere la più piccola intenzione di tendere a zero.

3.5.2 Cambiamento di Variabili

Supponiamo di conoscere la distribuzione di probabilità della quantità x, che diciamo $P(x)$. Ci proponiamo di calcolare la distribuzione di probabilità della quantità $y = g(x)$, che diremo $P_y(y)$, a partire dalla conoscenza di $P(x)$.

Il modo di procedere è il seguente. Si risolve in primo luogo l'equazione $y = g(x)$ per la variabile x. Siano x_α ($\alpha = 1, \ldots, n$) le n radici reali di quest'equazione. Allora

$$P_y(y) = \sum_\alpha \frac{P\left(x_\alpha(y)\right)}{\left|\frac{dg(x)}{dx}\right|_{x=x_\alpha(y)}}\ , \tag{3.60}$$

[3]In altri termini se $p_n(x)$ tende a $p(x)$ nel senso delle distribuzioni.

dove le derivate sono calcolate nelle radici dell'equazione. Abbiamo assunto che esista non più che un'infinità numerabile di radici dell'equazione: questo è certamente vero, ad esempio, se $g(x)$ è continua e mai costante.

Discutiamo come esempio la trasformazione $g(x) = \frac{a}{x}$. Qui l'equazione $y = \frac{a}{x}$ ammette la sola soluzione $x = \frac{a}{y}$. Sulla soluzione si ha che $\frac{dg(x)}{dx} = \frac{y^2}{a}$. Quindi $P_y(y) = \frac{|a|}{y^2} P(\frac{a}{y})$. Se ad esempio la distribuzione di partenza è una distribuzione di Cauchy,

$$P(x) = \frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{x^2 + \alpha^2} \ , \tag{3.61}$$

allora si vede subito che la distribuzione di y è ancora una distribuzione di Cauchy caratterizzata dal parametro $\frac{|a|}{\alpha}$.

Simili formule sono vere in più dimensioni. Se X e Y sono vettori con dimensioni che sono l'uno una funzione dell'altro N si ha che la probabilità di Y è data

$$Q(Y) = P(X(Y))|J(Y)| \tag{3.62}$$

dove lo Jacobiano J è il determinante della matrice $N \times N$ con componenti $J_{i,k} = \frac{y_i}{x_k}$.

3.5.3 Alcune Proprietà della Trasformata di Fourier

Data una distribuzione di probabilità $P(x)$, è conveniente introdurre la sua *trasformata di Fourier* $\tilde{P}(q)$ definita da

$$\tilde{P}(q) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ e^{iqx} P(x) \equiv F[P(x)] \ , \tag{3.63}$$

dove abbiamo indicato anche l'applicazione della trasformata di Fourier con il simbolo $F[\cdot]$. La funzione $P(x)$ può essere riottenuta mediante applicazione della *trasformata inversa di Fourier*, che indichiamo con $F_I[\cdot]$:

$$P(x) = F_I[\tilde{P}(q)] \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \ e^{-iqx} \tilde{P}(q) \ . \tag{3.64}$$

Si noti il modo in cui abbiamo (legittimamente) scelto di distribuire i fattori π fra operazione di trasformata e di antitrasformata.

Lo sviluppo in serie di $\tilde{P}(q)$ intorno al punto $q = 0$ è collegato ai valori dei momenti della funzione $P(x)$. Se i momenti di $P(x)$ sono finiti abbiamo che

$$P(q) = \sum_k \frac{m_k \ (iq)^k}{k!} \ , \tag{3.65}$$

dove

$$m_k \equiv \langle x^k \rangle \equiv \int dx \ P(x) \ x^k \ . \tag{3.66}$$

Se la distribuzione di probabilità $P(x)$ ha varianza finita, la funzione $P(q)$ è differenziabile almeno due volte attorno al punto $q = 0$.

Il *teorema di convoluzione* per le trasformate di Fourier è spesso molto utile. Siano x e y variabili indipendenti, e poniamo

$$z = x + y \ . \tag{3.67}$$

Se si indicano con $a(x)$ e $b(y)$ le distribuzioni di probabilità di x e y e con A e B le rispettive trasformate di Fourier, si trova che la trasformata di Fourier (C) della probabilità di z ($c(z)$) è data da

$$C(q) = A(q)B(q) \ . \tag{3.68}$$

Diamo qui la dimostrazione del risultato (3.68), che è assai semplice ad ottenersi. La probabilità che la variabile $z = x + y$ assuma un valore dato è ottenuta moltiplicando la probabilità di un dato valore di x per la probabilità che $y = z - x$, e sommando su tutti i modi in cui si può scegliere x, cioè

$$c(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ a(x) \ b(z-x) \ . \tag{3.69}$$

Questa operazione è detta di *convoluzione*, e la indicheremo con un asterisco $*$, ottenendo che $c = a * b$. Dimostreremo quindi che

$$F[c] \equiv F[a * b] = F[a]F[b] \ . \tag{3.70}$$

Utilizzando l'antitrasformata di Fourier si ha che

$$c(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ a(x)b(z-x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ \int_{-\infty}^{+\infty} dk \ e^{-ikx} A(k) \int_{-\infty}^{+\infty} dq \ e^{-iq(z-x)} B(q) \ . \tag{3.71}$$

L'integrale in dx dà $2\pi\delta(k-q)$, che consente di integrare su dq. Resta

$$c(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \ A(k)B(k)e^{-ikz} = F_I[A(k)B(k)] \ , \tag{3.72}$$

cioè

$$C(k) = A(k)B(k) \ , \tag{3.73}$$

QED.

Generalizzando si ottiene banalmente che la trasformata di Fourier della probabilità di $y = \sum_{1=i}^{N} x_i$, dove le x_i sono N variabili indipendenti tutte governate dalla stessa distribuzione di probabilità $a(x)$, è data da

$$\tilde{a}_N(q) = \tilde{a}(q)^N \ . \tag{3.74}$$

3.5.4 Integrali Gaussiani

Gli integrali Gaussiani hanno un ruolo cruciale in tutta la nostra trattazione. Ricordiamo qui che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \ e^{-\frac{Ax^2}{2} \pm Bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} \ e^{\frac{B^2}{2A}} \ , \tag{3.75}$$

che per $B = 0$, $A = 2$ ci dice che $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \ e^{-x^2} = \pi^{\frac{1}{2}}$.

Verifichiamo esplicitamente come si calcola l'integrale

$$I \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ e^{-\frac{x^2}{2}} \ . \tag{3.76}$$

Conviene considerare l'integrale bidimensionale

$$I^2 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy\ e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\ , \tag{3.77}$$

e passare in coordinate polari scrivendo

$$I^2 = \frac{1}{2\pi}\int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{0}^{+\infty} dr\ r\ e^{-\frac{r^2}{2}} = \int_{0}^{+\infty} dr\ r\ e^{-\frac{r^2}{2}}\ . \tag{3.78}$$

Si passa ora alla variabile $y = \frac{r^2}{2}$, ottenendo

$$I^2 = \int_{0}^{+\infty} dy\ e^{-y}\ , \tag{3.79}$$

e $I = \sqrt{I^2} = 1$, che è il risultato del nostro calcolo.

La dipendenza da B si può ottenere facilmente traslando la variabile x ud $A^{-1}B$ in modo da eliminare il termine quadratico nel numeratore.

Avremo spesso a che fare con integrali D-dimensionali. È comodo esprimere gli integrali rilevanti in forma matriciale. Per l'integrale Gaussiano si ha in questo caso nel caso di una matrice A simmetrica:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\prod_{i=1}^{D} dx_i\right)\ e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,k} x_i A_{ik} x_k \pm \sum_i B_i x_i} = \sqrt{\frac{(2\pi)^D}{\det(A)}}\ e^{\frac{1}{2}\sum_{ik} B_i (A^{-1})_{ik} B_k}\ . \tag{3.80}$$

Il risultato può essere facilmente ottenuto passando ad una base in cui la matrice A è diagonale (nel caso B=0) se ci si ricorda che il determinante di una matrice coincide col prodotto dei sui autovalori. Nello stesso modo la dipendenza da B può essere ottenuta traslando la variabile x_i della quantità $\sum_k (A^{-1})_{ik} B_k$.

Notiamo che

$$\sqrt{\frac{\det(A)}{(2\pi)^D}}\exp(-\frac{1}{2}\sum_{i,k} x_i A_{ik} x_k) \tag{3.81}$$

è una distribuzione di probabilità. Sviluppando entrambi i lati dell'equazione 3.80 otteniamo le seguenti formule

$$\begin{aligned} \langle x_i x_k \rangle &= (A^{-1})_{ik} \\ \langle x_i x_k x_l x_m \rangle &= (A^{-1})_{ik}(A^{-1})_{lm} + (A^{-1})_{il}(A^{-1})_{km} + (A^{-1})_{im}(A^{-1})_{lm} \end{aligned} \tag{3.82}$$

In generale la formula per il valor medio del prodotto di l variabili x è nullo per l dispari e per l pari e' dato da $(L-1)!!$ termini che si ottengono l'uno dall'altro mediante permutazioni. Per esempio

$$\langle x_i x_k x_l x_m x_r x_s \rangle = (A^{-1})_{ik}(A^{-1})_{lm}(A^{-1})_{rs} + 14 permutations. \tag{3.83}$$

3.5.5 Funzione Gamma di Eulero

La funzione *Gamma di Eulero* può essere espressa mediante la formula di Eulero

$$\Gamma(z) = \lim_{n\to\infty} \frac{n!\ n^z}{z(z+1)(z+2)\ldots(z+n)}\ , \tag{3.84}$$

per z non nullo o intero negativo. Per $\mathcal{R}(z) > 0$ (parte reale di z) può essere usata la rappresentazione integrale

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty dx\ x^{z-1}e^{-x}\ . \tag{3.85}$$

La funzione $\frac{1}{\Gamma(z)}$ è una funzione intera con zeri semplici nei punti $z = -n$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$. In altri termini la funzione $\Gamma(z)$ non ha zeri ed ha dei poli semplici in zero e negli interi negativi. Per n intero positivo la funzione Γ coincide con il fattoriale

$$\Gamma(n+1) = n!\ . \tag{3.86}$$

Sono valori notevoli (ed utili a conoscersi)

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}\ ,\ \ \Gamma(1) = 1\ . \tag{3.87}$$

È da notare anche che per n intero

$$\Gamma(n+\frac{1}{2}) = \frac{(2n-1)!!}{2^n}\Gamma(\frac{1}{2})\ . \tag{3.88}$$

Vale inoltre la relazione di ricorrenza

$$\Gamma(z+1) = z\ \Gamma(z)\ \ \lim_{z\to 0} z\Gamma(z) = 1. \tag{3.89}$$

È anche opportuno notare una formula asintotica che risulta spesso utile:

$$\lim_{z\to\infty} z^{-\alpha}\frac{\Gamma(z+\alpha)}{\Gamma(z)} = 1\ . \tag{3.90}$$

Il comportamento asintotico della funzione Gamma, per grandi valori della parte reale del suo argomento, è dato dalla formula di Stirling

$$\Gamma(z) \approx (\frac{2\pi}{z})^{\frac{1}{2}}\left(\frac{z}{e}\right)^z \qquad z! \approx (2\pi z)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{z}{e}\right)^z . \tag{3.91}$$

La formula di Stirling riceve delle correzioni moltiplicative note, che vanno a zero quando $x \to \infty$: ad esempio al primo ordine in $\frac{1}{z}$ la correzione è $(1 + \frac{1}{12z})$.

Più precisamente abbiamo che

$$\Gamma(z) \approx (2\pi z)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{z}{e}\right)^z \exp(1 + \frac{1}{12z} - \frac{1}{360z^3} + \frac{1}{1260z^5} - \frac{1}{1680z^7}\ldots) \tag{3.92}$$

Sebbene la serie non sia convergente, ma solo asintotica, il resto della serie è sempre più piccolo del termine trascurato. La forma precedente fornisce un eccellente e veloce medodo di calcolo della funzione Γ con un errore relativo arbitriamente piccolo. Per esempio se vogliamo calcolare $\Gamma(1/4)$ possiamo riportarci al calcolo di $\Gamma(n + 1/4)$ utilizzando repetutamente la relazione di ricorrenza e per $n = 7$ la formula precedente ha un errore relativo minore di $O(10^{-14})$. Per ottenere errori relativi più piccoli basta andare a valore di n più grandi e/o utilizzare più termini dello sviluppo asintotico.

Per finire notiamo la formula:

$$(\Gamma(z)\Gamma(1-z))^{-1} = \frac{\sin(\pi z)}{\pi}, \tag{3.93}$$

che è estremamente utile per calcolare la funzione Γ per valori negativi dell'argomento. L'equazione 3.93 è quasi intuitiva: entrambi i lati dell'equazione sono funzioni intere che hanno gli stessi zeri (tutti gli interi positivi e negativi), hanno la stessa derivata in zero e (cosa che non dimostriamo) hanno un comportamento simile per $|z|$ grande. Esistono teoremi che garantiscono l'unicità di una funzione intera che soddisfi alle precedenti condizioni.

3.5.6 Trasformata di Fourier di Funzioni con Decadimento a Potenza

Vogliamo discutere qui di comportamenti asintotici di trasformate di Fourier: utilizzando un gergo da fisici possiamo dire che tipicamente ci interesseranno i comportamenti a piccoli momenti q (dove q è la variabile trasformata), cioè a grandi distanze x (dove x è la variabile originaria).

Calcoliamo per prima cosa la trasformata di Fourier della funzione $\frac{1}{|x|^\alpha}$. Formalmente il nostro calcolo è valido per $\alpha < 1$. Il risultato che più ci interessa, per $\alpha > 1$ ed $\alpha < 3$, può essere visto come ottenuto tramite una continuazione analitica: una verifica esplicita della correttezza di questa procedura può essere fatta calcolando l'integrale della derivata seconda della funzione ed integrandolo poi due volte. Ci interesserà principalmente il risultato sulla retta reale, cioè in $D = 1$. In tutta generalità faremo i nostri calcoli per un valore generico della dimensionalità D, e specializzeremo il nostro risultato mettendo $D = 1$ nelle formule ottenute[4].

Baseremo il nostro calcolo sull'uso della rappresentazione integrale

$$A^{-\gamma} = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_0^\infty dz\ z^{\gamma-1}\ e^{-Az}\ , \tag{3.94}$$

che può essere ottenuta subito passando alla variabile zA ed utilizzando la definizione di funzione Gamma di Eulero (3.85). Applicheremo quindi la (3.94) con $A = \vec{x}^2$ e $\gamma = \frac{\alpha}{2}$. La trasformata di Fourier di $|\vec{x}|^{-\alpha}$ (dove $\vec{x}$ è un vettore D-dimensionale, e per evitare confusione indichiamo questo fatto in modo esplicito con la freccia soprascritta) sarà

$$\tilde{F} \equiv \int d^D x\ e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}\ \ (\vec{x}\cdot\vec{x})^{-\frac{\alpha}{2}} = \frac{1}{\Gamma(\frac{\alpha}{2})} \int_0^\infty dz\ z^{\frac{\alpha}{2}-1} \int d^D x\ e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}\ e^{-z(\vec{x}\cdot\vec{x})}\ . \tag{3.95}$$

dove abbiamo usato la rappresentazione (3.94). Possiamo ora calcolare l'integrale Gaussiano in $d^D x$ utilizzando la (3.80), ottenendo

$$\tilde{F} = \frac{\pi^{\frac{D}{2}}}{\Gamma(\frac{\alpha}{2})} \int_0^\infty dz\ z^{\frac{\alpha}{2}-\frac{D}{2}-1}\ e^{-\frac{\vec{q}\cdot\vec{q}}{4z}}\ . \tag{3.96}$$

Passando ora alla variabile $y = \frac{\vec{q}\cdot\vec{q}}{4z}$ l'integrale in dz rappresenta una funzione Γ (si veda la (3.85)). Si ha quindi che

$$\tilde{F} = \frac{\pi^{\frac{D}{2}}\ \Gamma(\frac{D-\alpha}{2})}{2^{\alpha-D}\ \Gamma(\frac{\alpha}{2})}\ \ |\vec{q}|^{\alpha-D} \equiv k(\alpha, D)\ \ |\vec{q}|^{\alpha-D}\ \ , \tag{3.97}$$

che è il risultato finale del nostro calcolo. Si noti che il calcolo è corretto solo nella zona $\alpha < D$, altrimenti gli integrali non sarebbero convergenti all'origine. Nel caso unidimensionale questa condizione diventa $\alpha < 1$ e quindi non stiamo nella zona per noi interessante.

Tuttavia possiamo portare a buon fine il conto facendo vedere che più in generale, anche se la funzione $F(x)$ non è esattamente uguale a $|x|^{-\alpha}$, ma si comporta in questo modo solo asintoticamente

[4] Per il solo caso della dimensionalità $D = 1$ lo stesso risultato si sarebbe potuto ottenere più semplicemente dividendo l'integrale in due integrali da $-\infty$ a 0 e da 0 a $+\infty$ ed utilizzando la rappresentazione integrale (3.94).

per grandi x, il comportamento singolare (ovvero non differenziabile) della trasformata di Fourier $\tilde{F}(q)$ a piccoli q non cambia. Questo è vero ad esempio se $F(x)$ differisce da $|\vec{x}|^{-\alpha}$ per una funzione che va a zero velocemente a infinito: possiamo scrivere quindi (in $D = 1$, ad esempio)

$$F(x) = Ax^{-\alpha} + G(x) \tag{3.98}$$

In questo caso ($D = 1$)

$$\tilde{F}(q) = c(\alpha)A|q|^{\alpha-1} + \tilde{G}(q) \ , \tag{3.99}$$

dove $G(q)$ è una funzione più regolare di $|q|^{\alpha-1}$ (ad esempio si può avere che $G(q)$ uguale ad un costante più un termine di ordine $O(q^2)$), dove

$$c(\alpha) = k(\alpha, 1) = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}\ \Gamma(\frac{1-\alpha}{2})}{2^{\alpha-1}\ \Gamma(\frac{\alpha}{2})} \tag{3.100}$$

Sfortunatamente l'argomento fallisce per $\alpha > 1$ in quanto anche se la $F(x)$ è regolare a x, sia $x^{-\alpha}$ che $G(x)$ avrebbero una singolarità non integrabile a $x = 0$.

La prima tentazione sarebbe di chiudere gli occhi su questo doppio problema: derivare la formula 3.99 nella regione $\alpha < 1$ ed estenderla analiticamente, incrociando le dita, nella regione $\alpha > 1$. Questo modo di indovinare le formule, un po' alla cieca, spesso funziona, anche se a volte dà risultati terrificanti.

Proviamo per prima cosa a verificarne la validità considerando un esempio concreto dove i conti possono essere fatti esplicitamente: calcoliamo la trasformata di Fourier della funzione

$$F(x) = \frac{1}{|\mu + x^2|^{\frac{\alpha}{2}}} \ , \tag{3.101}$$

dove stiamo sempre trattando il caso unidimensionale $D = 1$. Con manipolazioni analoghe a quelle utilizzate nel calcolo precedente si ottiene che

$$\tilde{F}(q) = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{\Gamma(\frac{\alpha}{2})} \int_0^\infty dz\ z^{\frac{\alpha-1}{2}-1}\ e^{-\frac{q^2}{4z}-\mu z} \ . \tag{3.102}$$

Qui il comportamento singolare a piccoli q è controllato dalla regione a piccoli z: per piccoli z infatti il termine in μ è piccolo rispetto al termine in q^2. Questa regione, appunto, non dipende dal termine in μ, e gode delle stesse proprietà della funzione con $\mu = 0$ che avevamo analizzato in precedenza. In questo caso particolare l'integrazione può essere portata a termine in modo esplicito (ed invitiamo il lettore a farlo): si ottiene come risultato una funzione di Bessel (del tipo K), ed è possibile analizzare esplicitamente la forma dei termini singolari.

Presentiamo adesso un argomento un poco più dettagliato che serve per superare le difficoltà precedentemente esposte e di arrivare quindi al risultato finale in maniera pulita. Il caso interessante di valori di α compresi fra 1 e 3 può essere analizzato facilmente considerando la trasformata di Fourier della funzione $F_2(x) \equiv F(x)x^2$. È immediato notare che

$$\tilde{F}_2(q) = -\frac{d^2\tilde{F}(q)}{dq^2}. \tag{3.103}$$

Inoltre per questi valori di α possiamo affermare che

$$\tilde{F}_2(q) = Ac(\alpha - 2)|q|^{\alpha-3} + \dots \tag{3.104}$$

dove abbiamo indicato con i puntini $(\dots)$ i termini regolari. Integrando rispetto a q otteniamo che

$$\tilde{F}(q) = \frac{-c(\alpha-2)}{(\alpha-1)(\alpha-2)}|q|^{\alpha-1} + \dots, \tag{3.105}$$

che è esattamente la formula voluta in quanto un semplice calcolo mostra che

$$\frac{-c(\alpha-2)}{(\alpha-1)(\alpha-2)} = c(\alpha), \tag{3.106}$$

come potevamo ragionevolmente aspettarci. Infatti avevamo ottenuto il comportamento asintotico corretto per $\alpha < 1$ e in quella regione la formula precedente è necessariamente valida.

In conclusione i termini singolari che abbiamo trovato sono dominanti rispetto ai termini regolari proporzionali a q^2 nella regione $\alpha < 3$ mentre nella regione $\alpha > 3$ avviene l'opposto. Si ha quindi che

$$\tilde{F}(q) = 1 - cost|q|^{\rho} \dots \tag{3.107}$$

dove $\rho = \alpha - 1$ per $\alpha < 3$ e $\rho = 2$ per $\alpha > 3$. Si noti che il valore di ρ è continuo a $\alpha = 3$.

3.5.7 Il Metodo del Punto di Sella

Il metodo del punto di sella può essere usato per calcolare integrali del tipo

$$\int_{\infty}^{\infty} \exp(Nf(x)) \tag{3.108}$$

dove per semplicità consideriamo una funzione $f(x)$ analitica che 'ha una parte complessa sull'asse reale.

Il passo cruciale del metodo del punto di sella consiste nel trovare un cammino C che va da $-\infty$ a $+\infty$ in maniera di minimizzare il massimo del modulo dell'integrando.

Consideriamo un punto z_s (supponendo che esista) tale che $\frac{df}{dz}$ in questo punto. Per z vicina a z_s abbiamo che

$$\exp(N(f(z_s) + \frac{1}{2}f''(z_s)(z-z_s)^2)) \tag{3.109}$$

Indipendentemente dalla fase di $f''(z_s)$ dato che $(z-z_s)^2)$ prende tutte le fasi possibili due volte ci sono due direzioni a partire da z_s lungo le quali la funzione $\exp(z)$ scende il più velocemente possibile. Se è possibile trovare un cammino che va da $-\infty$ a $+\infty$ e passa per il punto di sella in maniera tale che il massimo del modulo dell'integrando sia proprio per il punto di sella abbiamo che l'integrale originale si può approssimare da

$$\int dz \exp(N(f(z_s) + \frac{1}{2}f''(z_s)(z-z_s)^2)) \tag{3.110}$$

dove il cammino d'integrazione è fatto lungo una direzione tale che la funzione ha il massimo sul punto di sella.

Mettendo tutto assieme si ottiene

$$\int \exp(Nf(z)) \approx \exp(N(f(z_s) \left(\frac{2\pi}{f''(z_s)}\right)^{1/2} \tag{3.111}$$

Un esempio tipico dell'uso del punto di sella è dato *(prendere dal Morse per esempio).*

3.5.8 Analisi Dimensionale

Si puó dimostrare In generale che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (x+a)^{-3} = Ca^{-2} \tag{3.112}$$

Possiamo utilizzare l'analisi dimensionale per dimostrare, a meno di costanti moltiplicative la relazione eq. (3.97).

3.5.9 Miscellanea

Ricordiamo che la funzione δ di Dirac può essere espressa mediante la sua rappresentazione integrale

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \; e^{izx} \; . \tag{3.113}$$

È interessante notare che

$$\delta(Ax-b) = |A|^{-1} \delta(x - bA^{-1} \tag{3.114}$$

relazione che è facile ricostruire a partire dalla relazione

$$\pi\delta(x) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2} \tag{3.115}$$

In dimensioni D abbiamo che

$$\delta^D(Ax) = |\det(A)|^{-1} \delta^D(x) \tag{3.116}$$

dove A e' una matrice quadrata $D \times D$. Più in generale si ha che

$$\delta(f(x)) = \sum_n c_n \delta(x - x(n)) \tag{3.117}$$

dove $x(n)$ sono tutte le soluzioni dell'equazione $f(x) = 0$ e

$$c_n = \det |A(n)|^{-1} \tag{3.118}$$

dove le componenti della matrice $A(n)$ sono date da

$$A(n)_{i,k} = \frac{\partial f_i}{\partial x_k} \tag{3.119}$$

L'integrale multiplo che segue può esser calcolato, con il risultato

$$\int \left(\prod_{k=1}^{N} dp_k \right) \; \delta \left(\sum_{k=1}^{N} p_k - Z \right) = \frac{Z^{N-1}}{(N-1)!} \; . \tag{3.120}$$

L'integrale (3.120) può essere calcolato partendo dal caso $N = 1$, e notando che aggiungere l'ennesima variabile di integrazione moltiplica il risultato per un fattore $\frac{Z}{N-1}$.

Chapter 4

Grandi Deviazioni

4.1 Formulazione del Problema

In questo capitolo saremo interessati a calcolare la distribuzione di probabilità $P(z)$ della variabile z (somma di N variabili indipendenti) nella regione dove la probabilità di un evento è molto piccola. In altri termini vogliamo calcolare la probabilità di avere grandi deviazioni dalla media. Consideremo qui il caso in cui la funzione $P(z)$ è diversa da zero sono in una regione limitata dello spazio oppure va a zero quando $z \to \infty$ più velocemente di un qualsiasi esponenziale (in realtà e sufficiente che la discesa sia esponenziale, i.e $P(z) < A\exp(-B|z|)$. Definiamo la variabile z come

$$z = \sum_{i=1}^{N} x_i \ , \tag{4.1}$$

dove le variabili aleatorie x_i sono indipendenti e sono tutte governate dalla stessa distribuzione di probabilità $P(x_i)$. Il nostro obiettivo sarà stimare la probabilità $c_N(z)$, nel limite in cui N tende ad infinito, per valori di z grandi. Specificatamente saremo interessati alla probabilità dell'evento $z = \overline{z}$, dove sceglieremo $\overline{z} = \lambda N$, con λ costante (nel limite in cui $N \to \infty$).

In questa regione la probabilità di un evento sarà estremamente piccola: si avrà cioè che per N grande

$$c_N(\overline{z}) \sim e^{NS(\lambda)} \ , \tag{4.2}$$

dove S sarà una funzione decrescente di λ, che noi siamo interessati a calcolare nel limite $N \to \infty$. Definiamo quindi

$$S(\lambda) = \lim_{N\to\infty} \frac{\log\left(c_N(N\lambda)\right)}{N} \ . \tag{4.3}$$

Otterremo qui risultati coerenti con quelli implicati dal teorema del limite centrale, ma che ci consentono un controllo più accurato della probabilità di eventi molto rari: questo controllo è ovviamente di grande utilità in molte situazioni pratiche, dove lo scopo è quello di predire e quindi evitare un improbabile ma devastante disastro.

4.2 Una Prima Dimostrazione

Per ricavare il nostro risultato partiamo dalla trasformata di Fourier $\tilde{c}_N(q)$ della distribuzione di probabilità $c_N(z)$. In analogia alla (3.14) si ha che

$$\tilde{c}_N(q) = \tilde{P}(q)^N = e^{N \log(\tilde{P}(q))} . \tag{4.4}$$

Le ipotesi che abbiamo fatto sulla funzione $P(x)$ implicano che la trasformata di Fourier $\tilde{P}(q)$ è una funzione intera, priva di singolarità in tutto il piano complesso.

Trasformando ora inversamente con Fourier si trova che

$$c_N(z) = \frac{1}{2\pi} \int dq \; e^{-izq} \; \tilde{c}_N(q) = \frac{1}{2\pi} \int dq \; e^{N\left(\log\left(\tilde{P}(q)\right) - i\lambda q\right)} . \tag{4.5}$$

Per N grande possiamo applicare il metodo del *punto di sella*: in quanto si tratta di un integrale che oscilla molto rapidamente. Il cammino di integrazione deve essere deformato a partire dall'asse reale in un cammino che passa per il punto di sella. Questa operazione deve essere fatta in maniera che l'integrando assuma il suo massimo sul punto di sella, che viene individuato mettendo a zero la derivata rispetto a q dell'argomento dell'esponenziale. L'applicazione del metodo del punto di sella è delicata in quanto dobbiamo verificare esplicitamente che il punto di sella è effettivamente un massimo globale, non solo locale dell'integrale e questo compito può non essere facile nel caso in cui esistano più punti di sella.

Alla fine si trova che l'integrando sarà ben approssimato dal suo massimo. Dobbiamo quindi risolvere l'equazione

$$\frac{d \log(\tilde{P}(q))}{dq} = i\lambda . \tag{4.6}$$

Diciamo $\overline{q}(\lambda)$ la soluzione dell'equazione (4.6). Si ha quindi che

$$c_N(N\lambda) \propto e^{NS(\lambda)} , \tag{4.7}$$

dove

$$S(\lambda) \equiv \log\left(\tilde{P}(\overline{q}(\lambda))\right) - i\lambda \overline{q}(\lambda) . \tag{4.8}$$

Se l'equazione di punto di sella (4.6) non ammette soluzione la probabilità $c_N(N\lambda)$ scende a zero più velocemente di un esponenziale o è addirittura nulla.

Cerchiamo in primo luogo una soluzione per q piccoli. In questo caso, usando le definizioni (3.5) ed (3.6), analogamente a quel che si è visto in (3.15), si ha che

$$\log\left(\tilde{P}(q)\right) = \log\left(1 + iq\mu - \frac{q^2\sigma^2}{2} + O(q^3)\right) = iq\mu - \frac{q^2\sigma^2}{2} + O(q^3) . \tag{4.9}$$

In questo limite l'equazione del punto di sella è quindi

$$i\mu - q\sigma^2 = i\lambda , \tag{4.10}$$

e per $\mu - \lambda$ piccolo ammette quindi soluzione:

$$\overline{q}(\lambda) = \frac{i(\mu - \lambda)}{\sigma^2} + O(\overline{q}(\lambda)^2) . \tag{4.11}$$

Sulla soluzione dell'equazione di punto di sella si ha che

$$S(\lambda) = -\frac{(\mu - \lambda)^2}{2\sigma^2} + O((\mu - \lambda)^3) . \tag{4.12}$$

Questo risultato è ovviamente coerente con le predizioni del teorema del limite centrale, in quanto ci dice che λ si sposta poco dalla media μ.

È molto interessante il fatto che il punto di sella risulti situato sull'asse immaginario puro. In generale supporremo che $q(\lambda)$ assuma sempre un valore immaginario puro: i risultati ottenuti sotto quest' ipotesi saranno confortati dall'analisi che svolgeremo nella prossima sezione. Conviene porre $iq = h$ e definire una funzione

$$R(h) \equiv \log\left(\tilde{P}(-ih)\right) \ . \tag{4.13}$$

In queste variabili l'equazione del punto di sella diventa

$$\mathcal{R}'(h(\lambda)) = \lambda \ , \tag{4.14}$$

dove $R'(h) = \frac{dR(h)}{dh}$ e la funzione $S(\lambda)$ è data da

$$S(\lambda) = R(h(\lambda)) - h(\lambda)\lambda \ . \tag{4.15}$$

Notiamo che se introduciamo la distribuzione di probabilità

$$P_h(x) = \frac{P(x)\exp(+hx)}{\int dx P(x)\exp(+hx)} \tag{4.16}$$

l'equazione 4.14 diventa

$$R'(h(\lambda)) = \langle x \rangle_h = \lambda \tag{4.17}$$

dove abbiamo indicato con $\langle\cdot\rangle_h$ il valor medio rispetto alla distribuzione di probabilità 4.16.

È evidente che se $P(x)$ è diversa da zero solo nell'intervallo $[a:b]$, anche la funzione $P_h(x)$ godrà della stessa proprietà e che l'equazione 4.14 avrà una (e una sola soluzione) per λ appartenente allo stesso intervallo $[a:b]$, con la possibile eccezione degli estremi dell'intervallo.

Considereremo nei prossimi paragrafi alcuni esempi espliciti.

4.2.1 Il caso gaussiano

Il calcolo delle grandi deviazioni invece per il caso di una somma di variabili distribuite Gaussianamente è banale e la dimostrazione viene lasciata come esercizio al lettore. Il risultato finale per una distribuzione di probabilità gaussiana con media μ e varianza σ^2 è dato da

$$S(\lambda) = \frac{\lambda - \mu)^2}{2\sigma^2}. \tag{4.18}$$

4.2.2 La Distribuzione Binomiale

Calcoliamo esplicitamente, ad esempio, $S(\lambda)$ nel caso in cui la distribuzione di probabilità elementare delle variabili x sia

$$P(x) = \frac{1}{2}\left(\delta(x-1) + \delta(x-1)\right) \ , \tag{4.19}$$

cioè nel caso in cui la variabile x possa assumere i due soli valori ± 1, ognuno dei quali con probabilità $\frac{1}{2}$. Questo è un caso di una certa importanza in fisica e nella schematizzazione di molti problemi statistici, in cui si assume che le variabili elementari del problema (ad esempio gli spin) possono assumere solo due valori, *up* e *down* (oppure *vero* e *falso*). La trasformata di Fourier di (4.19) è

$$\tilde{P}(q) = \frac{e^{iq} + e^{-iq}}{2} \ , \tag{4.20}$$

e quindi

$$R(h) = \log\left(\cosh(h)\right) \ . \tag{4.21}$$

Quindi l'equazione di punto di sella è

$$\tanh(h) = \lambda \ , \tag{4.22}$$

e la soluzione per $|\lambda|$ minore di 1 è data da

$$h = \mathrm{arth}(\lambda) = \frac{1}{2}\log\left(\frac{1+\lambda}{1-\lambda}\right) \ . \tag{4.23}$$

Per $|\lambda|$ maggiore di 1 l'equazione di punto di sella non ammette soluzioni, e questo è consistente con l'annullarsi della funzione $c_N(z)$ per $|z| > N$ (la somma di N variabili che possono valere ± 1 è compresa fra $-N$ ed N).

Notando che sulla soluzione

$$-h\lambda = -\frac{\lambda}{2}\log(1+\lambda) + \frac{\lambda}{2}\log(1-\lambda) \ , \tag{4.24}$$

e

$$\log(\cosh(h)) = \log(((1+\lambda)(1-\lambda))^{-\frac{1}{2}}) = -\frac{1}{2}\log(1+\lambda) - \frac{1}{2}\log(1-\lambda) \ , \tag{4.25}$$

si ottiene finalmente che

$$S(\lambda) = -\frac{1+\lambda}{2}\ \log(1+\lambda) - \frac{1-\lambda}{2}\ \log(1-\lambda) \ . \tag{4.26}$$

La funzione $c_N(\lambda)$ è quindi simmetrica sotto lo scambio $\lambda \leftrightarrow -\lambda$. Per λ piccoli si ha inoltre che

$$S(\lambda) = -\frac{\lambda^2}{2} + O(\lambda^4) \ . \tag{4.27}$$

È anche notevole la relazione

$$S(\pm 1) = -\log(2) \ , \tag{4.28}$$

che esprime il fatto che la probabilità che tutte le N variabili x_i siano uguali ad 1 è evidentemente 2^{-N}. Lo stesso risultato si sarebbe potuto ottenere utilizzando l'espressione esatta della distribuzione binomiale ed applicando la formula di Stirling. In generale sviluppando la funzione $R(h)$ intorno al punto di sella si possono calcolare in maniera sistematica le correzioni proporzionali alle potenze di $\frac{1}{N}$.

L'assenza di una soluzione all'equazione per il punto di sella deve essere considerata come un'indicazione che per quel valore di λ la funzione di probabilità è strettamente nulla. Questo accade nel nostro esempio per $|\lambda| > 1$. Più in generale, se la distribuzione di probabilità $P(x)$ è diversa da zero solo nell'intervallo $a - b$, anche $c_N(\lambda)$ sarà diversa zero solo in quell'intervallo e zero al di fuori dello stesso intervallo.

Lasciamo al lettore il facile esercizio di dimostrare che per $\lambda > b$ o per $\lambda < a$ l'equazione eq.(4.16), non ammette soluzioni. Al contrario nell'intervallo $a - b$ (se $a \neq b$) si ha che la soluzione è unica in quanto (come il lettore può facilmente dimostrare) $R(h)$ è una funzione crescente:

$$R''(h) \equiv \frac{d^2R}{dR^2} > 0 \tag{4.29}$$

4.2.3 La distribuzione esponenziale

Consideriamo il caso in cui le quantità x_i sono distribuite in maniera esponenziale:

$$P(x) = \exp(-x) \quad \text{per} \quad x > 0 \tag{4.30}$$

mentre $P(x) = 0$ for $x < 0$. Ci domandiamo quale è la distribuzione della somma di N variabili distribuite in questo modo. In questo caso le condizione che abbiamo usato per dimostrare il teorema delle grandi deviazioni (decrescita veloce della $P(x)$ a grandi $|x|$ e conseguente analiticità della funzione $R(h)$ non sono soddisfatte. Tuttavia in questo caso, dove come vedremo $R'(h)$ diverge sul punto di non analiticità, la legge della grandi deviazioni si ottiene correttamente.

Utilizzando la formula nell' eq. (3.120) dell'appendice del capitolo precedente si trova esplicitamente che

$$\begin{aligned} P_N(\lambda) = \int \prod_{i=1,N} dx_i \delta(\sum_{i=1,N} x_i - N\lambda) \exp(-\sum_{i=1,N} x_i) \\ \frac{1}{(N-1)!}(N\lambda)^N \exp(-N\lambda) \end{aligned} \tag{4.31}$$

Trascurando prefattori e utilizzando al formula di Stirling troviamo che per grande N

$$P_N(\lambda) \approx \exp(NS(\lambda)) \tag{4.32}$$

con

$$S(\lambda) = -\lambda + \ln(\lambda) + 1 \tag{4.33}$$

Proviamo ad utilizzare le formule dimostrate nella sezione precedente. La trasformata di Laplace della funzione $P(x)$ è data da $(1-h)^{-1}$ (ovviamente esiste solo per $Re(h) < 1$ e la funzione $R(h)$ è data da

$$R(h) = \ln(1-h) \tag{4.34}$$

L'equazione da risolvere è quindi $\lambda = (1-h)^{-1}$ e sostituendo nelle equazioni della sezione precedente ritroviamo il risultato trovato.

Complessivamente abbiamo visto tre casi:

- La funzione $P(x)$ è definita in intervallo compatta. In questo caso anche λ appartiene allo stesso intervallo e quando λ si avvicina ai bordi dell'intervallo $|h|$ va a infinito.

- La funzione $P(x)$ è diversa da zero e scende più velocemente di un esponenziale per grandi x come nel caso gaussiano. Tutti i valori di λ sono ammissibili e $|h|$ va ad infinito quando λ va ad infinito.

- La funzione $P(x)$ decresce come un esponenziale. La trasformata di Laplace ha una forte singolarità sull'asse reale e h tende a un valore infinito quando λ va a infinito. Situazioni più complicate si possono avere a secondo del comportamento asintotico della $P(x)$, per esempio risultati molto più complicati si ottengono nel caso $P(x) \approx x^{-2}\exp(-x)$ dove la singolarità della trasformata di Laplace è molto più debole, con $R'(h)$ divergente.

Se invece la a funzione $P(x)$ decresce più lentamente di un esponenziale, la trasformata di Laplace non è definita sul'asse reale. Il teorema delle grandi deviazioni non è valido sotto la forma che abbiamo presentato e risultati dipendono in dettaglio dal comportamento asintotico.

figure distribuzione di probabilità per N=10 e N=40 versus λ e comportamento asintotico per ± 1, $\exp(-(1+x^2)^{3/2}$ $\exp(-x)\theta(x)$ comportamento asintotico e formula del teorema del limite centrale su scala logaritmica.

4.3 Formalismo Termodinamico per le Grandi Deviazioni

L'uso della trasformata di Fourier e della tecnica di integrazione nel campo complesso sul quale abbiamo basato il calcolo della sezione precedente consente di risolvere il problema ma può risultare poco intuitivo. Rideriveremo per questa ragione i risultati precedenti utilizzando un metodo di uso comune nello studio di sistemi fisici, che consente forse una migliore comprensione dei meccanismi rilevanti.

Cominciamo assumendo per ipotesi che per valori di N grandi la funzione $c_N(\lambda N)$ si comporta come $e^{NS(\lambda)}$: il nostro scopo è quello di determinare la funzione $S(\lambda)$. Consideriamo quindi per N grande

$$\langle e^{hz} \rangle = \int dz\ c_N(z)\ e^{hz} \propto \int d\lambda\ e^{N(S(\lambda)+h\lambda)} \ , \tag{4.35}$$

che, appunto, è vero per ipotesi, e supponiamo che l'integrale esista. Come nella sezione precedente abbiamo posto $z = \lambda N$. Sia adesso $R(h)$ la funzione definita da

$$e^{R(h)} = \int dx\ P(x) e^{hx} \ . \tag{4.36}$$

Allora

$$\langle e^{hz} \rangle = e^{NR(h)} \ . \tag{4.37}$$

Si noti che questa funzione R è la stessa che abbiamo definito nella sezione precedente.

A questo punto abbiamo quindi calcolato $R(h)$ come funzione di h. Sappiamo che, per grandi N, l'integrale che ci interessa può essere calcolato utilizzando il metodo del punto di sella, cioè valutando $S(\lambda) + \lambda h(\lambda)$ nel punto in cui prende il suo valore massimo, $\overline{\lambda} h$, che è determinato dall'equazione

$$\frac{dS(\lambda)}{d\lambda}|_{\lambda=\overline{\lambda}(h)} = -h \ . \tag{4.38}$$

Varrà quindi la condizione

$$R(h) = S(\overline{\lambda}(h)) + h\overline{\lambda}(h) \ , \tag{4.39}$$

che ci dà $R(h)$ in funzione di $S(\lambda(h))$. A noi interessa invece la relazione inversa, cioè calcolare $S(\lambda(h))$ data $R(h(\lambda))$: questo ci consentirà, data la funzione $R(h(\lambda))$ che conosciamo, di calcolare la funzione $S(\lambda(h))$. Le funzione R è detta *trasformata di Legendre* della funzione S (si veda la sezione (4.4) per definizioni e dettagli).

Se deriviamo la (4.39) rispetto ad h ed usiamo la (4.38) troviamo che

$$\frac{dR}{dh} = \frac{dS}{d\lambda}\frac{d\lambda}{dh} + h\frac{d\lambda}{dh} + \lambda(h) = -h\frac{d\lambda}{dh} + h\frac{d\lambda}{dh} + \lambda(h) = \lambda(h) \ , \tag{4.40}$$

e cioè l'equazione

$$\frac{dR}{dh} = \lambda \ , \tag{4.41}$$

consente di determinare la funzione inversa $h(\lambda)$. La funzione $S(\lambda)$ è data da $R(h(\lambda)) - h(\lambda)$, esattamente come nel risultato della derivazione precedente.

La relazione fra questo modo di affrontare il problema e la descrizione termodinamica dello stato di sistemi fisici verrà discussa in dettaglio nel capitolo (13).

4.4 La Trasformata di Legendre

Consideriamo la funzione $f(x)$, che per semplicità supponiamo differenziabile due volte, con $f''(x) > 0$; funzioni che godono di questa proprietà sono molto importanti in matematica e vengono chiamate funzioni connesse (esiste una definizione di funzione connessa applicabile anche a funzioni non diffenziabili, che qui non riportiamo).

Definiamo anche la funzione di due variabili

$$F(x,p) = px - f(x). \tag{4.42}$$

Scelto un dato valore per p, $p = \overline{p}$, sia $\overline{x}(\overline{p})$ il punto dove la funzione F, come funzione di x, a $p = \overline{p}$ fissato, è massima, cioè dove $\overline{x}(\overline{p})$ è tale che $\frac{\partial F}{\partial x}|_{x=\overline{x}(\overline{p})} = 0$. La convessità implica che la soluzione, se esiste è unica.

In questo punto, in altri termini, $\frac{df}{dx}|_{x=\overline{x}(\overline{p})} = \overline{p}$. Definiamo quindi la funzione di p

$$g(p) \equiv F(\overline{x}(p), p) \ , \tag{4.43}$$

che diciamo *trasformata di Legendre* della funzione $f(x)$. Il valore $\overline{x}$ se esiste è unico grazie al fatto che $f''(x) > 0$. La trasformata di Legendre mappa funzioni su un dato spazio vettoriale in funzioni sullo spazio duale, come discuteremo meglio nel seguito.

Consideriamo ad esempio la funzione $f(x) = \frac{x^\alpha}{\alpha}$, con $\alpha > 1$, e calcoliamone la trasformata di Legendre. L'equazione $F' = p - \overline{x}^{\alpha-1} = 0$ dà $\overline{x} = p^{\frac{1}{\alpha-1}}$, e

$$g(p) \equiv F(\overline{x}(p), p) = \overline{x}p - \frac{\overline{x}^\alpha}{\alpha} = \frac{p^{\frac{\alpha}{\alpha-1}}}{\frac{\alpha}{\alpha-1}} \ . \tag{4.44}$$

Cioè abbiamo trovato che $g(p) = \frac{p^{\tilde{\alpha}}}{\tilde{\alpha}}$, con $\tilde{\alpha} = \frac{\alpha}{\alpha-1}$. È interessante notare il fatto, facile da verificare, che $\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\tilde{\alpha}} = 1$.

Ritrasformiamo ora con Legendre la funzione $g(p)$. Utilizzando x come parametro della trasformazione si ottiene che $h(x) = H(x, \overline{p}(x)) = x\overline{p} - g(\overline{p})$, dove come abbiamo visto $\overline{p}$ è determinato dalla condizione $\frac{\partial H}{\partial p}|_{p=\overline{p}(\overline{x})} = 0$. Si vede esplicitamente che $h(x) = f(x)$, e cioè che abbiamo operato un'operazione di trasformata di Legendre inversa (che coincide con la trasformata diretta). In altri termini vale il teorema, che dimostreremo tra poco, che ci dice che *la trasformata di Legendre è un'operazione involutiva*, e quindi il suo quadrato è uguale alla trasformazione identità.

Infatti abbiamo che

$$\frac{\partial H}{\partial p}|_{p=\overline{p}(\overline{x})} = x - \left.\frac{\partial F(x,p)}{\partial p}\right|_{x=\overline{x}(\overline{p}(x));p=\overline{p}} = x - \overline{x}(\overline{p}(x)). \tag{4.45}$$

La condizione $\frac{\partial H}{\partial p}|_{p=0}$ implica che

$$x = \overline{x}(\overline{p}(x)) \tag{4.46}$$

e quindi $\overline{p}(x)$ è la funzione inversa di $\overline{x}(p)$. In altri termini la prima trasformata di Legendre introduce una corrispondenza biunivoca tra la i punti x e p e tale relazione persiste quando si effettua la seconda trasformata di Legendre. A questo punto è immediato verificare che la trasformata di Legendre è involutiva. Infatti

$$h(x) = \overline{p}(x)x - \overline{px}(\overline{p}(x)) + f(\overline{x}(\overline{p}(x))) = f(x). \tag{4.47}$$

Può essere utile ricordare una semplice interpretazione geometrica della trasformazione di Legendre. Si consideri la curva $y = -f(x)$. La trasformata di Legendre (come funzione di p) è il valore del valore dell'ordinata dell'intersezione con l'asse delle ordinate della tangente a questa curva con pendenza $-p$.

Due funzioni $f(x)$ e $g(p)$ che sono l'una la trasformata di Legendre dell'altra (e viceversa!) sono dette *duali nel senso di Young*. Vale la *diseguaglianza di Young*:

$$px \leq f(x) + g(p) \ , \tag{4.48}$$

che discende banalmente dal fatto che la funzione $F(x, p) = px - f(x)$ che abbiamo definito prima è più piccola di $g(p)$ per tutti i valori di x e p (per costruzione).

La generalizzazione della costruzione della trasformata di Legendre al caso vettoriale è immediata.

La trasformata di Legendre è uno strumento di grande importanza in molti campi della fisica teorica. Il primo esempio da citare è probabilmente quello della relazione fra funzione di Lagrange e funzione Hamiltoniana in meccanica classica (e poi per estensione a sistemi di campi). Ricordiamo schematicamente che le equazioni di Eulero-Langrange

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \ , \tag{4.49}$$

dove L è la funzione di Lagrange, data da $L = T - U$, cioè da energia cinetica meno energia potenziale del sistema, risultano equivalenti alle equazioni di Hamilton

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad , \ \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \ , \tag{4.50}$$

dove la funzione Hamiltoniana

$$H(\vec{p}, \vec{q}, t) = \vec{p}\,\dot{\vec{q}} - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \tag{4.51}$$

è la trasformata di Legendre della funzione di Lagrange (come funzione di $\dot{\vec{q}}$).

Altri esempi di rilievo riguardano termodinamica, meccanica statistica e teoria dei campi. In termodinamica prima ed in meccanica statistica poi energia libera ed entropia possono esser viste come connesse da una trasformazione di Legendre (che stabilisce, nell'approccio meccanico-statistico, una relazione fra il punto di vista canonico e quello microcanonico, e porta dalla variabile temperatura alla variabile energia). Infatti la trasformata di Legendre di $\beta F(\beta)$, dove $\beta = (kT)^1$ (k è la costante di Boltzmann e T è la temperatura assoluta) è proprio l'entropia S come funzione dell'energia interna E. In questo caso abbiamo che

$$E = \frac{\partial}{\partial \beta}\beta F \quad , \quad S(E) = \beta E - \beta F, \tag{4.52}$$

Simili considerazioni si possono fare per il rapporto fra ensemble canonico e gran canonico, dove pressione ed energia libera sono collegate da una trasformazione di Legendre che agisce sulle variabili potenziale chimico e densità.

In ultimo citiamo la relazione fra magnetizzazione ed il campo magnetico esterno, che ne è il parametro coniugato. Anche questo tipo questo tipo di relazioni, sulla quale sono poi basate manipolazioni fondamentali nella teoria dei campi, nella termodinamica e nella meccanica statistica, sono basate sulla trasformata di Legendre.

Chapter 5

Analisi di Dati Sperimentali

5.1 Introduzione

In tutta generalità i dati sperimentali sono affetti da due diversi tipi di errori: gli *errori sistematici* e gli *errori statistici*. Una trattazione corretta degli errori sistematici (dovuti ad esempio ad imperfezioni dell'apparato di misura o alla presenza di un fondo di eventi spuri impossibili ad eliminarsi) è estremamente importante, ma va al di là degli scopi di questo corso.

Discuteremo invece qui del come trattare gli errori statistici in modo corretto: anche questo è un compito di grande rilevanza. Senza una buona stima degli errori statistici i risultati sperimentali stessi non hanno infatti alcun significato univoco. Cominciamo le nostre osservazioni notando che bisogna evitare di cadere in due trappole opposte:

1. La sottovalutazione degli errori: in questo caso si rischia infatti di raggiungere conclusioni arbitrarie ed infondate.

2. La sopravalutazione degli errori: in questo caso si perdono informazioni rilevanti che sono contenute nell'insieme dei dati sperimentali.

Consideriamo un insieme di dati sperimentali. Consideriamo una quantità x, distribuita secondo una legge di probabilità $D(x)$ ignota. Indichiamo con X il valor medio aspettato di x, definito come

$$X \equiv \int dx\ D(x)\ x\ \equiv \langle x \rangle . \tag{5.1}$$

Supponiamo di aver misurato $N > 1$ volte la quantità x, e di aver ottenuto i risultati $x_{(k)}$, con $k = 1, \ldots, N$ (le $x_{(k)}$ sono variabili indipendenti: il risultato della misura k-esima non dipende dai risultati delle altre misure). Ci interessa raggiungere delle conclusioni sul conto del valor medio X a partire da questi dati sperimentali: più precisamente siamo interessati a dedurre quale sia la distribuzione di probabilità di X suggerita da un'analisi dei dati sperimentali. Più in generale vorremmo sapere cosa possiamo inferire dai dati sperimentali sulla distribuzione di probabilità $D(x)$, più precisamente quale sia la distribuzione di probabilità $\mathcal{P}(D)$ della funzione D.

Determinare $\mathcal{P}(D)$ è un problema tecnicamente molto complesso, in quanto $\mathcal{P}(D)$ è un funzionale della probabilità D (che è una funzione). Una trattazione semplificata (che ad esempio viene utilizzata nei primi corsi universitari di fisica) porta alla conclusione che la probabilità di X, $P(X)$, è proporzionale a

$$\exp\left(-\frac{(N-1)(X-\overline{x})^2}{2\sigma^2}\right) , \tag{5.2}$$

dove in generale, in questo capitolo, indicheremo con una barra la media sui dati sperimentali e con i simboli $\langle\cdot\rangle$ il valor medio rispetto alla legge di probabilità dei dati sperimentali. In particolare abbiamo definito la media

$$\overline{x} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} x_k \ , \tag{5.3}$$

e la deviazione standard

$$\sigma^2 \equiv \overline{(x-\overline{x})^2} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_k-\overline{x})^2 \ . \tag{5.4}$$

La legge dei grandi numeri ci garantisce che se la funzione $D(x)$ va a zero abbastanza velocemente per x grandi abbiamo che nel limite $N \to \infty$

$$\begin{aligned} \overline{x} &\to \langle x\rangle \\ \sigma^2 &\to \Sigma^2 \equiv \langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle \end{aligned} \tag{5.5}$$

Si noti tuttavia che $\overline{x}$ è una stima imparziale (unbiased) di $\langle x\rangle$, nel senso che la media su vari esperimenti di $\overline{x}$ è proprio $\langle x\rangle$, ovvero

$$\langle\overline{x}\rangle = \langle x\rangle \tag{5.6}$$

Questo risultato non è vero per σ, infatti un semplice conto mostra che

$$\langle\sigma^2\rangle = \frac{N-1}{N}\Sigma^2 \tag{5.7}$$

come è banale verificare nel caso $N = 1$. Il fatto che la miglior stima della varianza sia data da

$$\frac{N}{N-1}\sigma^2 \tag{5.8}$$

è all'origine del fattore $N-1$ all'esponente nell'equazione (5.2).

Come vedremo in seguito il risultato (5.2) (che viene comunemente indicato in una forma abbreviata come $X = \overline{x} \pm e$ con $e = \sigma(N-1)^{-1/2}$) è essenzialmente corretto se sono vere le assunzioni seguenti:

- La distribuzione $D(x)$ non contiene code importanti per grandi valori di x e va a zero in maniera sufficientemente rapida per grandi x.
- Siamo nel limite di N grande: sono state fatte molte misure, ed abbiamo registrato molti eventi statisticamente indipendenti.
- Siamo interessati soltanto alla regione in cui la probabilità non è troppo piccola (le code dove la probabilità di un evento è molto bassa devono essere sempre trattate a parte, si veda il capitolo sulle grandi deviazioni, (4).

In generale queste tre ipotesi non sono vere, ed è necessario considerare una trattazione più generale, che sia valida anche per N finito e per distribuzioni non Gaussiane. In questi casi una trattazione corretta può portare a risultati molto differenti da (5.2).

A nostro avviso il metodo migliore per impostare lo studio degli errori statistici consiste nel ragionare a partire dal principio di Bayes, cui abbiamo già accennato nella sezione (1.5), e che esporremo in maggior dettaglio nella prossima sezione.

5.2 L'Uso del Principio di Bayes

Il principio di Bayes è alla base di un corretto metodo di inferenza statistica. In generale possiamo il problema è il seguente: se a un dato istante abbiamo una certa conoscenza (probabilistica) di un fenomeno e successivamente viene osservato un fatto B ci domandiamo come sia modificata la nostra conoscenza da questo fatto. Supponiamo di quantificare la nostra conoscenza come la probabilità che ciascuna fra le M possibili e differenti ipotesi (che indichiamo con H_j) sia vera (M potrebbe anche essere infinito). Queste ipotesi constituiscono un insieme completo di eventi disgiunti: siamo certi che una ed una sola di queste ipotesi è sempre vera (ovvero $H_j \cap H_i = 0$ per $i \neq j$, e $P(\bigcup_{j=1,M} H_j) = 1$). La nostra conoscenza è determinata dal valore di queste probabilità, che indichiamo con $A(H_j)$. Queste sono le probabilità *a priori*, ovvero prima di aver osservato l'evento B.

La formula di Bayes ci dice che probabilità *a posteriori* ($P(H_j)$, ovvero dopo aver osservato l'evento B sono date da

$$P(H_j) = A(H_j)P(B|H_j)Z^{-1}, \tag{5.9}$$

dove Zè un opportuno fattore di normalizzazione. La formula precedente di dice quindi come sono modificate le probabilità (ovvero le nostre aspettative) per ciascuna delle differenti ipotesi come effetto dell'osservazione dell'evento B. Questo modo di procedere è caratteristico dell'inferenza statistica Bayesiana.

[1].

Per applicare questo procedimento supponiamo che, per poter spiegare dei dati sperimentali, siano plausibili M differenti ipotesi. Supponiamo, esattamente come prima, di avere un stima a priori (una stima elaborata cioè *prima* di aver fatto l'esperimento di cui stiamo considerando i risultati) delle probabilità delle diverse ipotesi H_j, ed indichiamo con $A(H_j)$ la probabilità che la j-esima ipotesi si verifichi. Vogliamo sapere come queste probabilità si modificano dopo aver fatto un esperimento che ha dato come risultato $\mathbf{x}$ ($\mathbf{x}$ è l'insieme dei dati sperimentali), e cioè quali sono le probabilità delle H_j condizionate dai dati sperimentali

Abbiamo già visto con l'equazione (1.27) che

$$P(H_j|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x}|H_j)\ A(H_j)}{Z}\ , \tag{5.10}$$

dove $P(H_j|\mathbf{x})$ è la probabilità della j-esima ipotesi condizionata dai dati sperimentali, mentre $P(\mathbf{x}|H_j)$ è la probabilità di osservare i dati sperimentali data l'ipotesi H_j. La prima espressione è la probabilità che cerchiamo di conoscere. Supponiamo che $P(\mathbf{x}|H_j)$ sia nota, ovvero supponiamo

[1] Un tentativo di inquadrare *tutte* le conoscenze in un quadro di inferenza Bayesiana incontra notevoli difficoltà, in quanto l'inferenza Bayesiana presuppone sempre l'esistenza di conoscenze precedenti. L'origine delle prime conoscenze a priori potrebbe servire come spunto di una lunga discussione con risvolti filosofici ed epistemologici. Noi qui ci limitiamo ad accennare all'esistenza di almeno tre punti di vista differenti.

- L'*a priori* di un esperimento è l'*a posteriori* di un altro esperimento. Possiamo risalire all'indietro l'intera storia dell'umanità attraverso una lunga catena di somme di conoscenze che servono come quadro a priori per nuovi progressi, senza porci il problema di come gli uomini primitivi abbiano acquisito le prime conoscenze.

- Gli esseri umani non ragionano naturalmente secondo i principi dell'inferenza Bayesiana. L'inferenza Bayesiana viene utilizzata da persone che hanno già una loro visione del mondo e possedono delle aspettative a priori.

- Esistono delle conoscenze a priori che si sono accumulate durante la filogenesi delle specie attraverso la selezione naturale. Questo è un meccanismo forse più crudele dell'inferenza Bayesiana, e certamente molto diverso.

di conoscere come la distribuzione di probabilità dei dati sperimentali dipenda dalle varie ipotesi. Come abbiamo visto Z è un fattore di normalizzazione che garantisce che

$$\sum_{j=1}^{M} P(H_j|\mathbf{x}) = 1 \ , \tag{5.11}$$

ed è dato da

$$Z = \sum_{j=1}^{M} P(\mathbf{x}|H_j) A(H_j) \ . \tag{5.12}$$

In generale la formula di Bayes può essere utilizzata per stimare probabilità a partire da osservazioni. Spesso le conoscenze a priori sono del tutto evidenti: se considero la lunghezza di un oggetto rigido che sta dentro una stanza, è estremamente ragionevole aspettarsi che la lunghezza di questo oggetto sia inferiore a quella della stanza medesimo. In altri casi, come vedremo successivamente, le conoscenze a priori sono molto meno banali e più difficili a quantificare.

Facciamo un'applicazione molto semplice del metodo. Supponiamo di avere due urne, ciascuna con un numero elevato di palline, e sappiamo con certezza che la prima urna contenga una percentuale q di palline bianche (e $1-q$ di palline nere) e che la secondo urna contenga una percentuale $1-q$ di palline bianche (e q di palline nere). La prima urna viene indicata convenzionalmente come l'urna bianca. Se effettuando N estrazioni da una delle due urne (scelta a caso) vengono fuori M palline bianche e $N-M$ palline nere, il principio di Bayes mi dice che la probabilità che l'urna sia quelle bianca è data da

$$\frac{q^M(1-q)^{N-M}}{q^M(1-q)^{N-M}+(1-q)^M q^{N-M}.} \tag{5.13}$$

Generalizzando se ho R urne di cui una bianca e le altre $R-1$ nere e da una delle R urne (scelta a caso) vengono fuori M palline bianche e $N-M$ palline nere, la probabilità che l'urna sia quelle bianca è data da

$$\frac{q^M(1-q)^{N-M}}{q^M(1-q)^{N-M}+(R-1)(1-q)^M q^{N-M}.} \tag{5.14}$$

in quanto la probabilità a priori che l'urna sia bianca è R–1.

Se infine la scelta dell'urna viene fatta da un mio amico che ha una preferenza per il color nero, la stima della probabilit'a a priori del colore dell'urna è molto più difficile.

Quest'esempio è particolarmente istruttivo in quanto fa vedere che il principio dell'inferenza statistica non si limita a considerare semplicemente il caso in cui il numero di dati o di osservazioni (in questo caso N) è grande ma può essere utilizzato anche nel caso di N piccolo, al limite 1. La formula di Bayes ci permette di quantificare quanto le nostre aspettazioni sul mondo esterno sono modificate in seguito ad una o più osservazioni ulteriori.

La formula di Bayes può essere facilmente generalizzata al caso di una distribuzione continua di variabili. Si ha che

$$P(h|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x}|h)\ A(h)}{Z} \ , \tag{5.15}$$

dove

$$Z = \int dh\ P(\mathbf{x}|h)\ A(h) \ . \tag{5.16}$$

Possiamo discutere a questo punto come utilizzare il principio di Bayes per esempio nel caso dell'analisi di dati sperimentali nel caso che l'ipotesi h quantifichi il valore vero di una quantità che noi misuriamo. Supponiamo di aver fatto precedente N misure della quantità x. Supponiamo inoltre di sapere (a priori, cioè prima di fare l'esperimento) che la distribuzione di probabilità $D(x)$ non è una funzione completamente arbitraria, ma dipende da un insieme di parametri $\mathbf{h}$:

$$D(x) = P(x|\mathbf{h}) \ . \tag{5.17}$$

Conosciamo inoltre la distribuzione di probabilità delle variabili $\mathbf{h}$ prima di fare l'esperimento (cioè la loro distribuzione a priori). In questo caso quindi si ha per la probabilità dei parametri $\mathbf{h}$ condizionata dai dati sperimentali $\mathbf{x}$ che

$$P(\mathbf{h}|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x}|\mathbf{h}) \ A(\mathbf{h})}{Z} \ , \tag{5.18}$$

dove

$$Z = \int d\mathbf{h} \ P(\mathbf{x}|\mathbf{h}) \ A(\mathbf{h}) \ , \tag{5.19}$$

con

$$P(\mathbf{x}|\mathbf{h}) = \prod_{k=1}^{N} P(x_{(k)}|\mathbf{h}) \ . \tag{5.20}$$

Se indichiamo con $X(\mathbf{h})$ il valor medio di $\mathbf{x}$ a $\mathbf{h}$ fissato, ovvero

$$X(\mathbf{h}) \equiv \int dx \ P(x|\mathbf{h}) \ x \ , \tag{5.21}$$

otteniamo che

$$P(X) = \int d\mathbf{h} \ P(\mathbf{h}|X)\delta\left(X - X(\mathbf{h})\right) = \frac{\int d\mathbf{h} \ P(\mathbf{x}|\mathbf{h}) \ A(\mathbf{h}) \ \delta\left(X - X(\mathbf{h})\right)}{\int d\mathbf{h} \ P(\mathbf{x}|\mathbf{h})A(\mathbf{h})} \ . \tag{5.22}$$

È importante notare che se la funzione $A(\mathbf{h})$ è quasi costante nella regione dove la funzione $P(\mathbf{x}|\mathbf{h})$ è sensibilmente diversa da zero, la formula precedente può essere approssimata con successo da

$$P(X) = \frac{\int d\mathbf{h} \ P(\mathbf{x}|\mathbf{h}) \ \delta\left(X - X(\mathbf{h})\right)}{\int d\mathbf{h} \ P(\mathbf{x}|\mathbf{h})} \ . \tag{5.23}$$

Le due formule (5.22 e 5.23) danno essenzialmente lo stesso risultato nel caso in cui la funzione $P(\mathbf{x}|\mathbf{h})$ abbia un picco molto stretto intorno al suo valore più probabile. In questo caso, che avviene normalmente per valori sufficientemente grandi di N, la forma esplicita di $A(\mathbf{h})$ risulta irrilevante.

Nel caso in cui non sia data nessuna conoscenza a priori sulla possibile forma della funzione $D(x)$ il problema è matematicamente mal posto, ed a rigore non saremmo in grado di ricavare alcun espressione per la $P(x)$. Vedremo in seguito come comportarci in questo caso, e come sviluppare delle ipotesi di lavoro ragionevoli.

5.3 La Distribuzione di Poisson

5.3.1 Considerazioni Generali ed un Paradosso

Abbiamo già introdotto la distribuzione di Poisson nella sezione (2.3). Riconsideriamo qui l'esempio che abbiamo descritto in (2.3), cioè quello di un evento elementare che, con il passare del tempo, ha una certa probabilità di verificarsi o di non verificarsi. Supponiamo che in un intervallo di tempo T si siano verificati K eventi elementari, cioè l'evento sia stato sperimentalmente osservato con una frequenza $f = \frac{K}{T}$. Ci proponiamo di calcolare la distribuzione di probabilità della della vera frequenza F del fenomeno.

Sotto l'ipotesi semplice (già discussa in (2.3)) che i singoli eventi elementari siano scorrelati tra di loro la distribuzione di probabilità del numero di eventi è una distribuzione di Poisson. In questo caso la probabilità $P(K|h)$ dipende da un solo parametro, $\lambda = Tf$. Le formule ricavate in sezione (2.3)) per la distribuzione di Poisson ci dicono che

$$P(K|\lambda) = \frac{\lambda^K}{K!} \exp(-\lambda) \ , \tag{5.24}$$

dove λ ha qui il significato del numero medio di eventi attesi nel periodo di tempo T.

Sia $A(\lambda)$ la probabilità a priori del parametro λ (la probabilità a priori delle ipotesi), che caratterizza la nostra distribuzione di probabilità degli eventi. Al momento non abbiamo ancora discusso quale sia una forma ragionevole per $A(\lambda)$, che è , ripetiamo, una distribuzione di probabilità a priori, ed andrà scelta indipendentemente dai dati sperimentali. Ovviamente se abbiamo già delle altre informazioni sul fenomeno, possiamo utilizzarle per determinare la funzione $A(\lambda)$; il problema serio è cosa scegliere per $A(\lambda)$ nel caso che in cui non abbiamo informazioni sui possibili valori di λ.

Applicando il principio di Bayes nella forma (5.18) si trova che

$$P(\lambda|K) = \frac{\lambda^K \ e^{-\lambda} \ A(\lambda)}{\int_0^\infty d\lambda \ \lambda^K e^{-\lambda} \ A(\lambda)} \ . \tag{5.25}$$

Può sembrare ragionevole assumere (e questa sarà l'ipotesi fondante di questa sezione) che $A(\lambda)$ *abbia un valore costante*: questo equivale ad assumere che $A(\lambda)$ varia poco nella zona dove $P(\lambda|K)$ è concentrata. Il valore esatto della costante si semplificherà fra numeratore e denominatore, non entrerà nei nostri calcoli e non dovremo discuterne.

Sotto l'ipotesi quindi che

$$A(\lambda) = costante \ , \tag{5.26}$$

il principio di Bayes implica che

$$P(\lambda|K) = \frac{\lambda^K \ e^{-\lambda}}{\int_0^\infty d\lambda \ \lambda^K e^{-\lambda}} \ . \tag{5.27}$$

Per grandi valori di K (nel caso cioè di un gran numero di eventi) la formula precedente è ragionevole, in quanto $P(\lambda|K)$ è concentrata intorno al valore $\lambda = K$. Il valore medio di eventi aspettati nel periodo T ha una probabilità concentrata vicino al numero di eventi osservati.

Per piccoli valori di K, in particolar modo per $K = 0$ o 1, la scelta di $A(\lambda)$ diventa invece cruciale. Per sviluppare una comprensione quantitativa del fenomeno calcoliamo quindi il valor medio di λ, ovvero il valor medio del numero di eventi previsti, che indicheremo con Λ. Utilizzando la relazioni fra funzioni Gamma di Eulero date in sezione (3.5.5) si trova che

$$\Lambda \equiv \langle\lambda\rangle \equiv \frac{1}{K!} \int_0^\infty d\lambda \ \lambda^{K+1} e^{-\lambda} = K + 1 \ , \tag{5.28}$$

La formula precedente non è sensata, e costituisce il paradosso anticipato nel titolo della sezione: ci aspettiamo che in assenza di altre informazioni la relazione corretta sia $\Lambda = K$ (tranne forse che nel caso $K = 0$, di cui discuteremo meglio nella prossima sezione). La formula precedente è particolarmente irragionevole per $K = 0$ (cioè nel caso di nessun evento osservato), in quanto in questo caso implica che il valor medio degli eventi previsti sia uguale ad 1.

5.3.2 La Scelta della Probabilità a Priori: Soluzione del Paradosso

La soluzione all'apparente paradosso (i paradossi sono apparenti per definizione) della sezione precedente consiste nel notare che quando abbiamo affermato che la probabilità a priori di λ è costante abbiamo involontariamente aggiunto ai dati del problema dell'informazione non voluta senza rendercene conto.

È chiaro d'altronde che scrivere la probabilità a priori di λ implica necessariamente l'apporto di informazioni. Il problema che vorremmo affrontare è trovare una probabilità a priori $A(\lambda)$ che corrisponda al meglio all'affermazione *non abbiamo informazioni sul sistema.*

In quest'ottica la scelta di $A(\lambda)$ costante non è ragionevole. Possiamo infatti, con una piccola variazione del procedimento, ottenere risultati diversi, altrettanto irragionevoli. Supponiamo ad esempio che a priori la distanza temporale media tra due eventi, $\frac{T}{\lambda}$, sia distribuita uniformemente. In questo caso la funzione $A(\lambda)$ risulta proporzionale a $\frac{1}{\lambda^2}$ (si veda la sezione (3.5.2), con $y = \frac{1}{x}$). Si ha quindi che

$$P(\lambda|K) \propto \lambda^{K-2} e^{-\lambda} \ . \tag{5.29}$$

Per $K = 0$ (dove non ci sono stati eventi) questa distribuzione non è normalizzabile, il che è un bene in quanto una distribuzione di probabilità non normalizzabile non è consistente. In altri termini, in assenza di altre informazioni, non possiamo ragionevolmente fare predizioni sul numero medio di eventi quando non ne abbiamo osservato neanche uno. Sfortunatamente $P(\lambda|K)$ resta non normalizzabile anche per $K = 1$, il che non è ragionevole. Inoltre la formula precedente implica che

$$\Lambda = K - 1 \ , \tag{5.30}$$

il che fa a pugni con il buon senso.

La domanda *"quale è la scelta più ragionevole della funzione $A(\lambda)$ in assenza di informazioni sul sistema?"* non è particolarmente ben posta. Possiamo tuttavia provare a dare una risposta utilizzando i seguenti criteri:

a) Possiamo esplicitare le predizioni implicate dalle diverse possibili scelte di $A(\lambda)$, e confrontarle con le predizioni del buon senso.

b) I risultati ottenuti devono essere il più possibile stabili rispetto a cambiamenti delle definizioni di partenza (per esempio i risultati non dovrebbero cambiare se si considera come quantità ignota la frequenza o i tempi medi di attesa) o del modo di classificare gli eventi.

c) Non è possibile trovare una distribuzione di probabilità ragionevole, nell'intervallo $(0, \infty)$, che non fissi la scala e sia contemporaneamente normalizzabile. Tuttavia è ragionevole esigere che la divergenza dell'integrale $\int_0^\infty d\lambda \ A(\lambda)$ sia la più piccola possibile.

In accordo con questi tre criteri possiamo fare l'ipotesi che *il logaritmo di λ sia distribuito uniformemente*: non avendo informazioni a priori sul fenomeno supponiamo che tempi caratteristici dell'ordine di 10^{-6} secondi siano probabili come tempi dell'ordine di 10^6 secondi. L'affermazione *"non conosco l'ordine di grandezza del fenomeno"*, ovvero *"nel nostro fenomeno i diversi ordini di* *grandezza intervengono in modo equiprobabile"* esprime bene la nostra ignoranza *massimale* delle caratteristiche del fenomeno.

Sotto questa assunzione abbiamo che

$$dA(\lambda) \propto \frac{d\lambda}{\lambda} \ , \tag{5.31}$$

e calcolando la normalizzazione si ottiene che

$$P(\lambda|K) = \frac{\lambda^{K-1}}{\Gamma(K)} e^{-\lambda} \ . \tag{5.32}$$

Di seguito alcune considerazioni su questo risultato:

- Questa formula è in buon accordo con il senso comune: per $K = 0$ la probabilità non è normalizzabile (non abbiamo informazioni sul fenomeno), e per $K = 1$ il valor medio di λ è 1, esattamente come avrebbe suggerito l'uomo della strada. Inoltre in generale abbiamo che

  $$\Lambda = K \ , \tag{5.33}$$

  come ci aspettiamo.

- Una distribuzione logaritmica per λ è coincide con una distribuzione logaritmica per il tempo medio di attesa $\frac{T}{\lambda}$: i risultati non cambiano se consideriamo le frequenze o i tempi di attesa.

- La normalizzazione di una distribuzione logaritmica diverge solo logaritmicamente, cioè molto lentamente, e non è molto lontana dall'essere normalizzabile. Altre distribuzioni di probabilità semplici (ad esempio distribuzioni di probabilità che si comportano come potenze) divergono molto più velocemente.

In molti casi una scelta uniforme in scala logaritmica risulta essere quella più appropriata. In appendice mostreremo che esistono dei criteri matematici che selezionano una misura *naturale* sullo spazio dei parametri e questa misura è proprio quella che abbiamo scelto (uniforme su scala logaritmica) nel caso della distribuzione gaussiana.

Un'applicazione semplice ed interessante del metodo Bayesiano è la seguente. Supponiamo di aver misurato una volta sola, con un solo esperimento, la variabile k (che può prendere per ipotesi valori interi positivi o nulli) e di aver avuto come risposta un valore $K \neq 0$. Supponiamo inoltre di sapere che la distribuzione di probabilità di k è una distribuzione Poissoniana determinata da un parametro caratteristico λ ignoto. Ci proponiamo di stimare la probabilità P_0 di trovare, in una successiva misura, il risultato $k = 0$.

Ingenuamente possiamo supporre che λ sia vicino a K. Per λ esattamente uguale a K la probabilità di avere zero eventi è data da

$$P_0 = e^{-K} \ . \tag{5.34}$$

Questa non è in realtà una stima corretta, ma soltanto una approssimazione. Il risultato esatto, che ora ricaveremo, è infatti

$$P_0 = 2^{-K} \ . \tag{5.35}$$

Il calcolo è molto semplice. La probabilità di trovare un dato valore di λ dopo una misura che ha avuto come risultato $k = K$ è data, sotto l'ipotesi dell'equiprobabilità dei logaritmi, dall'equazione

(5.32), e cioè $P(\lambda|K) = \frac{\lambda^{K-1}}{\Gamma(K)} e^{-\lambda}$. La probabilità che avvengano $k = 0$ eventi per λ fisso è $P_0(\lambda) = e^{-\lambda}$. Si ha quindi che

$$P_0 = \int d\lambda\ P(\lambda|K)\ P_0(\lambda) = \frac{1}{\Gamma(K)} \int d\lambda\ \lambda^{K-1} e^{-2\lambda} = 2^{-K}\ , \tag{5.36}$$

QED.

La stima eq. 5.34 è in certo senso corretta, in quanto va a zero per K va ad infinito, tuttavia se siamo interessati, come nel caso delle grandi deviazioni, ad avere una stima con un piccolo errore relativo, (ovvero stimare $\lim_{K\to\infty} K^{-1} \ln(P_0(K))$) il risultato ingenuo è completamente sbagliato.

5.3.3 Il Caso di Diverse Categorie

Una verifica della correttezza della scelta precedente può essere fatta applicandola ad un caso più generale.

Consideriamo il caso in cui l'esperimento consiste nel controllare se ognuno di due eventi di tipo (1) e di tipo (2) si è verificato o meno. Sia per ipotesi la distribuzione di probabilità di ciascuno dei due eventi una Poissoniana rispettivamente con parametri λ_1 e λ_2. Supponiamo di aver osservato K_1 volte il primo evento e K_2 volte il secondo evento. Se assumiamo a priori che i valori λ_i siano distribuiti logaritmicamente, ovvero che

$$A(\lambda_1, \lambda_2) \propto \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2}\ , \tag{5.37}$$

otteniamo che la probabilità dei due parametri λ_1 e λ_2 condizionata alla misura fatta è

$$P(\lambda_1, \lambda_2 | K_1, K_2) \propto \lambda_1^{K_1-1}\ \lambda_2^{K_2-1}\ e^{-\lambda_1-\lambda_2}\ . \tag{5.38}$$

Il numero medio di eventi nell'unità di tempo è $\lambda_1 + \lambda_2$. Di questi eventi λ_1 sono di tipo (1) mentre λ_2 sono di tipo (2).

In queste condizioni la probabilità di avere un evento di uno qualsiasi dei due tipi (non discriminiamo più, cioè , fra eventi di tipo (1) ed eventi di tipo (2)) è una distribuzione Poissoniana con parametro $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$. La distribuzione di probabilità a priori di λ è data da

$$A(\lambda)\ d\lambda = \int d\lambda_1\ d\lambda_2\ A(\lambda_1, \lambda_2)\ \delta(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda) \propto \frac{d\lambda}{\lambda}\ . \tag{5.39}$$

Analogamente troviamo che

$$P(\lambda|K_1, K_2)\ d\lambda = \int d\lambda_1\ d\lambda_2\ P(\lambda_1, \lambda_2|K_1, K_2) \delta(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda) \propto \lambda^{K_1+K_2-1} e^{-\lambda}\ . \tag{5.40}$$

Nell'equazione precedente l'integrale su λ_1 e λ_2 è logaritmicamente divergente. L'introduzione di un taglio superiore ed inferiore sull'integrale su queste due variabili rende l'integrale finito ed aggiunge un'ulteriore dipendenza da λ, dipendenza che si può trascurare quando λ rimane distante da questi due tagli.

Il numero medio di eventi attesi risulta lo stesso che avremmo ottenuto se non avessimo inizialmente introdotto una divisione in due categorie: questo fatto è di grande importanza. Solo nel caso di una distribuzione a priori logaritmica (se ci limitiamo a considerare distribuzioni di probabilità semplici) il risultato ha delle proprietà di stabilità di questo tipo.

Generalizziamo ora questo risultato al caso in cui gli eventi possano appartenere ad una fra M diverse categorie (il caso precedente corrisponde a $M = 2$).

Supponiamo di aver osservato K_i eventi nella categoria i-esima (per semplicità consideriamo solo il caso in cui tutti i K_i siano diversi da zero, ovvero consideriamo solo le categorie in cui si sia registrato almeno un evento). Il numero totale di eventi sarà dato da

$$K = \sum_{i=1}^{M} K_i \ . \tag{5.41}$$

Procedendo come nel caso precedente otteniamo che

$$P(\lambda|\mathbf{K}) \propto \prod_{i=1}^{M} \left(\lambda_i^{K_i-1} e^{-\lambda_i}\right) \ . \tag{5.42}$$

Possiamo indicare con p_i le frequenze relative, ovvero la probabilità che un evento appartenga alla i-esima categoria:

$$p_i = \frac{\lambda_i}{\lambda} \ , \tag{5.43}$$

dove

$$\lambda = \sum_i \lambda_i \ . \tag{5.44}$$

La formula (5.43) può essere anche scritta come

$$\lambda_i = p_i \ \lambda \ , \tag{5.45}$$

dove le p_i soddisfano il vincolo

$$\sum_i p_i = 1 \ . \tag{5.46}$$

Se passiamo dalla distribuzione di probabilità per le λ_i a quella per le p_i otteniamo, dopo aver integrato la variabile λ

$$P(\mathbf{p}|\mathbf{K}) \propto \delta(\sum_i p_i - 1) \prod_{i=1}^{M} p_i^{K_i-1} \ . \tag{5.47}$$

A volte siamo interessati a calcolare il valore aspettazione di una quantità $g(\mathbf{p})$, o più in generale a valutare la sua distribuzione di probabilità definita da

$$P(g|\mathbf{K}) = \int d\mathbf{p} \ P(\mathbf{p}|\mathbf{K}) \ \delta(g(\mathbf{p}) - g) \ . \tag{5.48}$$

Il modo più semplice per calcolare numericamente la probabilità $P(g|\mathbf{K})$, nel caso in cui non sia possibile portare a termine un calcolo analitico esatto, consiste nell'estrarre in modo casuale le frequenze relative $\mathbf{p}$, secondo la legge di probabilità (5.47), e calcolare l'istogramma risultante dei valori di $g(\mathbf{p})$.

5.4 Distribuzioni Gaussiane

Consideriamo ora, invece, in cui per ipotesi la distribuzione di probabilità degli eventi è Gaussiana. Supponiamo cioè di aver osservato N eventi, ciascuno caratterizzato dal risultato della misura, un numero reale x, e di avere l'informazione a priori che la distribuzione di probabilità è una Gaussiana centrata in a e di larghezza b, ovvero che

$$P(x|a,b) \propto \frac{1}{b}\ \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2b^2}\right)\ . \tag{5.49}$$

Tipicamente in questa situazione la quantità a ha il significato di valore vero di x, ovvero è il valore che si sarebbe misurato se gli errori statistici fossero stati ridotti a zero. Supponiamo che la distribuzione di probabilità a priori per i coefficienti a e b, $A(a,b)$ sia approssimativamente data da

$$A(a,b) \propto \frac{1}{b}\ . \tag{5.50}$$

Il termine $\frac{1}{b}$ è dovuto all'ipotesi a priori che tutti gli ordini di grandezza dell'errore siano equiprobabili. Potremo inoltre tranquillamente supporre che la distribuzione di probabilità a priori sia indipendente da a in quanto, come vedremo in seguito, la distribuzione di probabilità che otterremo sarà una funzione che va a zero molto velocemente quando a diventa molto diverso dal valor medio misurato sperimentalmente.

Procedendo in modo analogo a quello usato nella sezione precedente si ottiene che la probabilità dei parametri a e b condizionata ai risultati dell'esperimento è

$$\begin{aligned} P(a,b|X) = \frac{P(X|a,b)A(a,b)}{Z} &\propto \frac{1}{b}\prod_{k=1}^{N}\left(\frac{1}{b}\exp\left(-\frac{(x_{(k)}-a)^2}{2b^2}\right)\right) \\ &= b^{-N-1}\exp\left(-N\frac{(a-\overline{x})^2+\sigma^2}{2b^2}\right)\ . \end{aligned} \tag{5.51}$$

dove le quantità $\overline{x}$ e σ sono definite in (5.3,5.4). Nel derivare la formula precedente abbiamo utilizzato la relazione

$$N^{-1}\sum_{i=1,N}(x_{(k)}-a)^2 = (a-\overline{x})^2+\sigma^2 \tag{5.52}$$

La distribuzione di probabilità della quantità a si ottiene integrando rispetto alla variabile b. Si ha

$$P(a|X) = \int db\ P(a,b|X) \propto ((a-\overline{x})^2+\sigma^2)^{-\frac{N}{2}} \propto (1+\frac{(a-\overline{x})^2}{\sigma^2})^{-\frac{N}{2}}\ , \tag{5.53}$$

come si vede ad esempio riscalando la variabile di integrazione. Nel caso di un solo evento $P(a)$ non è normalizzabile, in accordo con il senso comune, che ci dice che in presenza di un solo evento non possiamo stabilire ragionevolmente un errore statistico. A partire da $N=2$ la probabilità $P(a|X)$ è ben definita, (per $N=2$ otteniamo una distribuzione di Cauchy) ma bisogna salire sino a $N=4$ per avere una $P(a|X)$ che sia a varianza limitata.

Per N sufficientemente elevato la funzione $P(a|X)$ è abbastanza concentrata attorno al suo valor medio, e quindi la dipendenza da a della probabilità a priori può essere trascurata. Nel limite di N che tende all'infinito la distribuzione $P(a|X)$ è concentrata nella zona in cui $(a-\overline{x})^2 \ll \sigma^2$. In questo limite si ha che

$$P(a) \approx \exp\left(-N\frac{(a-\overline{x})^2}{2\sigma^2} + O\left(\frac{(a-\overline{x})^4}{\sigma^4}\right)\right) \; . \tag{5.54}$$

Trascurando i termini correttivi otteniamo una distribuzione Gaussiana di larghezza $\frac{\sigma}{N^{\frac{1}{2}}}$, in accordo con la analisi semplificata cui abbiamo accennato nell'introduzione a questo capitolo.

Il valor medio esatto di $(a-\overline{x})^2$ (calcolato usando la (5.53)) vale

$$\frac{\sigma^2}{N-3} = \frac{(N-1)\Sigma^2}{N(N-3)} \approx \frac{\Sigma^2}{N}(1+\frac{2}{N}) \; . \tag{5.55}$$

Per vedere questo si può ad esempio notare che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy \; \left(1+y^2\right)^{-\frac{N}{2}} = \sqrt{\pi}\,\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} \text{ e } \int_{-\infty}^{+\infty} dy \; \left(1+y^2\right)^{-\frac{N}{2}} \; y^2 = \sqrt{\pi}\,\frac{\Gamma\left(\frac{N-3}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} \; , \tag{5.56}$$

ed utilizzare le relazioni che collegano le matrici Γ di Eulero che abbiamo dato in sezione (3.5.5).

Si noti che nelle code, lontano dal valore più probabile, la distribuzione di a (5.53) non è una distribuzione Gaussiana. È interessante riscrivere la (5.53) in una forma utile per calcolare le grandi deviazioni:

$$P(a) \propto \exp\left(-\frac{N}{2}\log\left(1+\frac{(a-\overline{x})^2}{\sigma^2}\right)\right) \; . \tag{5.57}$$

I risultati ottenuti utilizzando la formula precedente, (5.57), possono essere molto diversi da quelli che si ottengono dalle formule descritte nell'introduzione già quando si cerchi di calcolare la probabilità di eventi a quattro o cinque deviazioni standard dal valor medio per valori di N moderati.

5.5 Il Caso Generale di Una Sola Variabile

5.5.1 Difficoltà nel caso generale

Supponiamo di utilizzare le formule precedenti nel caso in cui la distribuzione di probabilità è data da una distribuzione di Cauchy

$$P(x) = \pi^{-1}\frac{b}{b^2+(x-a)^2} \tag{5.58}$$

È facile vedere che in N estrazioni ci sono eventi dove $x = O(N)$, per cui $\overline{x}$ non tende verso a e il valore tipico di σ e di ordine N. Il formalismo del paragrafo precedente da un valore medio di x che non converge quando N fa ad infinito e consistentemente produce un errore che non va a zero.

Un'informazione molto semplice, per esempio l'esistenza di un punto a di simmetria della funzione P, ovvero tale che $P(x) = P(2a-x)$, migliora le cose. Basta considerare la mediana dei dati sperimentali (vedi appendice per la definizione della mediana) $m(N)$ ed è facile vedere che nel limite N che tende ad infinito, la mediana, indipendentemente dalla forma della coda di probabilità tendo molto velocemente (con un errore dell'ordine di $N^{-1/2}$) ad a.

Se abbiamo anche l'informazione che la distribuzione di probabilita è una distribuzione di Cauchy stiamo a posto. Possiamo scrivere esattamente come nel caso gaussiano

$$P(a,b|X) \propto A(a,b)\prod_{i=1,N}\frac{b}{b^2+(x_i-a)^2} \tag{5.59}$$

anche se in questo caso non possiamo fare le semplificazioni che abbiamo fatto nel caso Gaussiano per ridurci ad una espressione semplice finale in cui appare un numero piccolo di quantità come la varianza o la media dei dati.

Il caso in cui non abbiamo nessuna conoscenza a priori della funzione $D(x)$ è chiaramente molto più difficile di quelli che abbiamo affrontato finora e verrebbe voglia di gettare la spugna. Dato che si tratta di un caso importante cercheremo nella prossima sezione di procedere lo stesso in maniera euristica, evitando di arrivare a delle conclusioni in contrasto con il senso comune.

5.5.2 Se la Distribuzione di Probabilità è ignota

Supponiamo di avere fatto N esperimenti, misurando N volte una quantità x, esattamente come nella sezione precedente (denoteremo il valore misurato nell'esperimento k-esimo con $x_{(k)}$). Assumiamo però adesso di non avere nessuna informazione sulla distribuzione di probabilità secondo la quale sono realmente distribuiti i dati, e di non poter neanche assumere che si tratti di una funziona continua.

In una situazione di questo tipo ci sono due alternative ovvie. La prima è rinunciare a studiare il problema, mentre la seconda, più ambiziosa, è basata sul formulare delle ipotesi ragionevoli che portino a risultati in accordo con il buon senso.

Una procedura utilizzata abitualmente, che risulta spesso ragionevolmente efficiente, consiste nell'analizzare un istogramma che rappresenti i dati sperimentali. Guidati da questo istogramma possiamo ipotizzare una forma esplicita (dipendente da alcuni parametri) per la distribuzione di probabilità, e determinarne poi i parametri mediante le procedure che abbiamo già discusso: possiamo procedere cioè in analogia con quanto fatto nel caso Gaussiano, con lo svantaggio che, se la distribuzione di probabilità ipotizzata non è particolarmente semplice, dovremo probabilmente rinunciare a portare a termine un calcolo esatto. In sostanza in questo modo di procedere abbiamo cercato di indovinare quale sia la giusta distribuzione di probabilità: il risultato, ovviamente, non sarà completamente affidabile, e resteranno dubbi sulla sua fondatezza. Vogliamo discutere qui, in alternativa, come sia possibile procedere partendo da un numero di ipotesi arbitrarie che sia il più piccolo possibile.

Muoviamoci dunque partendo dal considerare che in una situazione *estrema* come quella che stiamo discutendo non ci è possibile fare ipotesi ragionevoli sulla probabilità di ottenere un valore di x diverso da uno di quelli osservati. Ipotizzeremo dunque che la distribuzione di probabilità di x sia nulla per tutti i valori di x diversi da quelli osservati.

Sintetizziamo: abbiamo fatto N misure, e decidiamo di considerare una distribuzione di probabilità discreta: p_k sarà la probabilità di ognuno dei valori misurati (che assumeremo per ora siano tutti diversi) $x_{(k)}$, mentre la probabilità dei valori che non sono mai stati misurati è nulla (ipotesi indotta dal fatto che su questi valori non abbiamo alcuna informazione). Vale ovviamente il vincolo

$$\sum_{k=1}^{N} p_k = 1 \ . \tag{5.60}$$

I p_k sono i parametri liberi che caratterizzano la nostra distribuzione.

Recapitolando, dopo che abbiamo osservato N eventi, e misurato N valori di x, che per semplicità supponiamo tutti diversi, la distribuzione di probabilità che consideriamo è della forma

$$P(x) = \sum_{k=1,N} p_k \delta(x - x_k). \tag{5.61}$$

La scelta della funzione di probabilità è guidata (driven) dai i dati. Più i dati aumentano, più le funzioni delta diventano più fitte in maniera che nel limite $N \to \infty$ la funzione definita nell'equazione 5.61 può tendere ad una funzione continua.

Utilizzando il ragionamento descritto nelle sezioni precedenti risulta chiaro che la distribuzione a priori delle probabilità p_k è costante in scala logaritmica (dato che ignoriamo la distribuzione degli ordini di grandezza degli eventi), ovvero

$$A(p_k) \propto \prod_k \frac{1}{p_k} \ , \tag{5.62}$$

ed il principio di Bayes ci dice che

$$P\left(\{p_k\}|x\right) = \frac{P\left(x|\{p_k\}\right) A\left(p_k\right)}{Z} \ . \tag{5.63}$$

Assumiamo ora che i singoli eventi siano indipendenti. Abbiamo N eventi possibili, etichettati dalla variabile k, e ci interessa conoscere la probabilità che si siano verificati proprio gli eventi che abbiamo osservato. Ad esempio la probabilità che si verificasse N volte l'evento 1 sarebbe stata p_1^N, quella di $(N-1)$ volte l'evento 1 ed una volta l'evento 2 sarebbe stata $Np_1^{N-1}p_2$ e cosìvia. La probabilità che ognuno degli eventi k si sia verificato ν_k volte è quindi proporzionale a

$$\prod_{k=1}^{N} p_k^{\nu_k} \ . \tag{5.64}$$

La probabilità che ciascuno degli N eventi si verifichi una volta ($\nu_k = 1$ per tutti i k) è proporzionale a

$$\prod_{k=1}^{N} p_k \ . \tag{5.65}$$

Quindi la nostra $P\left(x|\{p_k\}\right)$ è la (5.65) mentre la probabilità a priori A è la (5.62): la probabilità dei coefficienti p_k condizionata ai risultati del nostro esperimento, $P\left(\{p_k\}|x\right)$ risulta dunque essere una costante.

Per calcolare la distribuzione di probabilità del valor medio di x notiamo che

$$\langle x \rangle \equiv X = \sum_{k=1}^{N} p_k x_{(k)} \ , \tag{5.66}$$

e quindi sotto le nostre ipotesi la sua distribuzione di probabilità risulta essere proporzionale (a meno di fattori di normalizzazione) a

$$P(X) \propto \int \left(\prod_{k=1}^{N} dp_k\right) \ \delta\left(\sum_{k=1}^{N} p_k - 1\right) \delta\left(\sum_{k=1}^{N} p_k x_{(k)} - X\right) \ . \tag{5.67}$$

La relazione (5.67) è un caso particolare del metodo generale del ripesaggio che consiste nel pesare i dati con dei pesi aleatori e considerare la distribuzione di probabilità risultante della quantità che vogliamo considerare. Il metodo del ripesaggio è molto comune e in seguito vedremo un altro esempio di questo metodo (un terzo metodo di ripesaggio, anch'esso molto usato, va sotto il nome di *jackknife*. In questo caso la relazione (5.67) è stata derivata assumendo per la probabilità a priori un'ipotesi sulla quale si potrebbe discutere a lungo. Indipendentemente dalla sua derivazione, comunque, (5.67) può essere usata come un punto di partenza per stimare la probabilità $P(X)$

nel caso in cui non abbiamo informazioni precise sulla forma funzionale della distribuzione delle x. Dobbiamo però verificare che i risultati ottenuti sono ragionevoli e inoltre verificare quanto perdiamo se utilizziamo questo metodo in casi in cui abbiamo a disposizione dei metodi più efficaci, come nel caso di variabili distribuite gaussianamente,

Come vedremo tra poco la (5.67) è capace di portarci a forme del tutto diverse di probabilità al variare della distribuzione osservata dei dati sperimentali e da risultati molto ragionevoli in quasi tutti i casi, senza produrre risultati di qualità scarsa rispetto ai metodi che utilizzano al forma della funzione di probabilità , nel caso che questa sia disponibile. Vedremo ora due esempi concreti che ci aiuteranno a chiarire meglio quest'aspetto.

5.5.3 Una Prima Verifica: la Distribuzione di Poisson

Supponiamo che la variabile x sia stata misurata N volte e sia risultata uguale a L in M casi e uguale a zero nei rimanenti $N-M$ casi con N molto maggiore di M e M non necessariamente grande. In altri termini l'evento $x=L$ è raro (ha una probabilitell'ordine di M/N. La kurtosis della distribuzione di probabilità di x e' molto elevata e quindi è molto diversa da una distribuzione gaussiana.

In questo caso si trova che abbiamo solo due probabilità (p_1 e p_2) che soddisfano il vincolo ($p_1+p_2=1$) e la distribuzione di probabilità di x ha la forma

$$P(x)=p_1\delta(x-L)+(1-p_1)\delta(x)\ . \tag{5.68}$$

La distribuzione di probabilità di p_1 è quindi

$$Q(p_{1)}\propto p_1^{M-1}(1-p_1)^{N-M-1}\ . \tag{5.69}$$

Nel limite in cui N è molto più grande di M la distribuzione di p_1 sarçncentrata nella regione dove $p_1=w/N$. La distribuzione di probabilità di w sarà quindi proporzionale a

$$w^{M-1}(1-w/N)^{N-M-1}\approx w^{M-1}\exp(-w)\ . \tag{5.70}$$

Dato che $X\equiv\langle x\rangle=p_1L=wLN^{-1}$, w è dato da XNL^{-1}, otteniamo che la probabilità di X è data da

$$P(X)=(\frac{XN}{L})^{M-1}\exp(-\frac{XN}{L})\ . \tag{5.71}$$

Il risultato è esattamente lo stesso di quello che si sarebbe ottenuto se avessimo preso in considerazione una distribuzione di Poisson per il verificarsi dell'evento $x=L$. Infatti nel limite N che va ad infinito la distribuzione binomiale collassa sulla distribuzione di Poisson e la distribuzione di probabilità probabilità del parametro che caratterizza la distribuzione di probabilità di Poisson (λ) nel caso in cui si siano osservati M eventi è sa stessa di w, ovvero è proporzionale

$$\lambda^{M-1}\exp(-\lambda). \tag{5.72}$$

5.5.4 Una Seconda Verifica: il Caso Gaussiano

Supponiamo che la distribuzione vera delle misure x sia una distribuzione Gaussiana. Vogliamo mostrare che, se applichiamo l'approccio discusso nelle sezioni precedenti, che non assume alcuna ipotesi a priori sul tipo di distribuzione di probabilità, per valori grandi di N troviamo che la distribuzione del valor medio $P(X)$, (5.67), è una distribuzione Gaussiana. Le correzioni non Gaussiane vanno a zero come $\frac{1}{N}$. Il nostro metodo, dunque, ricostruisce correttamente una distribuzione Gaussiana (cosìcome era stato per una Poissoniana)

Partiamo quindi dall'espressione ricavata in (5.67), ed utilizziamo la rappresentazione integrale della funzione delta (3.113). In questo modo (ignorando fattori moltiplicativi costanti che contribuiscono all normalizzazione) troviamo che

$$P(X) \propto \int \left(\prod_{k=1}^{N} dp_k\right) \int_{-\infty}^{\infty} dz \ \exp\Bigg)\left(iz\left(\sum_{k=1}^{N} p_k - 1\right)\right) \int_{-\infty}^{\infty} dw \ \exp\left(iw\left(\sum_{k=1}^{N} p_k x_{(k)} - X\right)\right) \ . \quad (5.73)$$

Per calcolare quest'integrale si può procedere integrando esplicitamente su tutte le variabili p_k, valutando poi l'integrale su z e w con il metodo del punto di sella, utilizzando esplicitamente le proprietà dei dati sperimentali.

Una procedura alternativa consiste nel calcolare, nel limite di N grande, i momenti della quantità X, e verificare che tendono ai momenti di una distribuzione Gaussiana.

Cominciamo considerando il caso dei primi due momenti. Utilizzando il fatto che

$$X\{p\} = \sum_{k=1}^{N} p_k \ x_{(k)} \quad (5.74)$$

otteniamo che:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &\equiv \int dX \ P(X) \ X = \frac{1}{N} \int \left(\prod_{k=1}^{N} dp_k\right) \ P(\{p_k\}) \ \sum_{k=1}^{N} p_k \ x_{(k)} \ , \\ \langle X^2 \rangle &\equiv \int dX \ P(X) \ X^2 = \frac{1}{N} \int \left(\prod_{k=1}^{N} dp_k\right) \ P(\{p_k\}) \left(\sum_{k=1}^{N} p_k \ x_{(k)}\right)^2 \ . \end{aligned} \quad (5.75)$$

Possiamo riscrivere le formule precedenti come

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= \sum_{k=1}^{N} \langle p_k \rangle \ x_{(k)} \ , \\ \langle X^2 \rangle &= \sum_{k_1=1}^{N} \sum_{k_2=1}^{N} \langle p_{k_1} p_{k_2} \rangle \ x_{(k_1)} x_{(k_2)} \ . \end{aligned} \quad (5.76)$$

Per calcolare queste due grandezze useremo la relazione (3.120). In primo luogo notiamo che la (3.120) implica che la distribuzione di probabilità $P(\{p_k\})$ va normalizzata con un fattore $(N-1)!$ (in modo che il suo integrale su tutti i p_k dia 1).

La distribuzione di probabilità di un singolo p_j, per esempio di p_1, viene quindi ottenuta (includendo la normalizzazione di cui dicevamo prima) integrando su tutti i p_k tranne che su p_1, ed è data da nel limite di N grande

$$P(p_1) = (N-1)! \int \left(\prod_{k=2}^{N} dp_k\right) \ \delta\left(\sum_{k=2}^{N} p_k - (1-p_1)\right) = (N-1)! \frac{(1-p_1)^{N-2}}{(N-2)!} \approx N e^{-Np_1} \ , \quad (5.77)$$

dove abbiamo usato ancora la relazione (3.120), applicata questa volta ad $N-1$ variabili di integrazione. Troviamo quindi che

$$\langle p_1 \rangle = \langle p_j \rangle = \frac{1}{N} \, , \tag{5.78}$$

per tutti i valori di j. Questa relazione è del tutto evidente; infatti i valor medi delle variabili p devono essere tutte uguali e, come conseguenza della relazione

$$\sum_i p_i = 1 \tag{5.79}$$

, tutte uguali a $1/N$. Nello stesso modo si trova che è valida la relazione (meno evidente della precedente):

$$P(p_1, p_2) = (N-1)! \int \left(\prod_{k=3}^{N} dp_k \right) \; \delta \left(\sum_{k=3}^{N} p_k - (1 - p_1 - p_2) \right) \approx N^2 e^{-Np_1 - Np_2} \, , \tag{5.80}$$

e quindi che

$$\langle p_i p_j \rangle = \frac{1}{N^2} \quad \text{per} \quad i \neq j \quad , \quad \langle p_j^2 \rangle = \frac{2}{N^2} \, . \tag{5.81}$$

Un calcolo più accurato fa vedere che se utilizziamo la condizione 5.79 per calcolare le correlazioni tra p differenti, le relazioni precedenti si possono scrivere come

$$\langle p_i p_j \rangle = \frac{1}{N^2} + \frac{1}{N^3} + O(\frac{1}{N^4}) \;\; \text{per} \;\; i \neq j \quad , \quad \langle p_j^2 \rangle = \frac{2}{N^2} + O(\frac{1}{N^3}). \tag{5.82}$$

In generale si vede che nel limite in cui N tende ad infinito le variabili p_k diventano variabili indipendenti con

$$\langle p_k^m \rangle = \frac{m!}{N^m} \, . \tag{5.83}$$

Utilizzando questi risultati troviamo che

$$\langle X \rangle = \sum_{k=1}^{N} \langle p_k \rangle x_{(k)} = \overline{x} \, , \tag{5.84}$$

dove ricordiamo che la barra indica la media sui dati sperimentali, e che (a meno di termini che vanno a zero più velocemente di $\frac{1}{N}$)

$$\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \frac{(\overline{x^2} - \overline{x}^2)}{N} \, . \tag{5.85}$$

Se usiamo la stessa tecnica per calcolare il valore di aspettazione di

$$\langle (X - \langle X \rangle)^4 \rangle \tag{5.86}$$

troviamo dopo un lungo calcolo (nell'ipotesi semplificatrice che $\overline{(x-\overline{x})^3}$ sia circa 0) che la kurtosis di X ($K(X)$) è data da

$$K(X) = 3 + \frac{1}{N}\ O\left(\frac{\overline{(x-\overline{x})^4}}{\overline{(x-\overline{x})^2}^2}\right)\ . \tag{5.87}$$

Se la kurtosis dei dati sperimentali è piccola rispetto a N (il che è certamente vero nel caso in cui la distribuzione vera delle x è Gaussiana e N grande) la Kurtosis di X è circa tre. Lo stesso argomento può essere fatto per i momenti di ordine superiore, e la distribuzione ottenuta per il valore medio X risulta Gaussiana. Questo è un successo: il nostro metodo, quando applicato a dati sperimentali Gaussiani, produce una distribuzione Gaussiana.

In generale possiamo dire che per distribuzioni dei dati sperimentali con Kurtosis non enormi (ed in particolare se i dati sono distribuiti Gaussianamente) il metodo produce distribuzioni Gaussiane. Al contrario, se le Kurtosis sono di ordine N (come nell'esempio precedente nel limite di N grande e M finito), la distribuzione $P(X)$ non è Gaussiana. La forma finale della distribuzione $P(X)$ dipende crucialmente dalle caratteristiche dei dati sperimentali.

5.5.5 Il metodo del ripesaggio

Un metodo che assomiglia molto a quello della sezione precedente, ma è lievemente più semplice da realizzare consiste nel ripesare i dati come nella formula 5.67, ma assegnando questa volta ai dati un peso che può essere 0 o 1 con uguale probabiltà. In altri termini si scelgono a caso circa il cinquanta per cento dei dati e si calcola la media della quantità x su quest'insieme. Successivamente si riscelgono a caso il cinquanta per cento dei dati e viene rifatta la media. Questa operazione viene ripetuta tante volte. Se indichiamo con X la media, otteniamo al variare degli dati scelti,una distribuzione $P(X)$ che dovrebbe essere la distribuzione di probabilità della media X condizionata ai dati sperimentali. Esattamente come nel caso precedente è facile vedere che si riproducono i risultati corretti nel caso di una distribuzione Gaussiana.

Questo metodo non è molto differente dal precedente e quasi sempre i risultati sono simili. Uno dei vantaggi tuttavia, è che la presenza di un evento anomalo (per esempio un 10^{-6} che è diventato un 10^6 a causa di un errore di trascrizione) viene evidenziato molto bene: anche dopo la media su metà dei dati, i risultati sono molto diversi a seconda che il campione scelto contenga o meno l'evento anomalo. Se anche per valori di N grandi l'istogramma di X ottenuto con questo metodo presenta due picchi distinti di peso circa uguale, ci sono ragioni molto forti per credere che ci sia un dato anomalo rispetto agli altri che, se presente, domina la media. Ovviamente è anche possibile che l'evento anomalo non sia un errore di trascrizione, ma un fenomeno reale. In questo caso i metodo evidenzia correttamente il fenomeno e da un risultato per l'errore che non può mettersi nella forma standard $a \pm e$ a meno di non fare grosse semplificazioni.

Vediamo un esempio concreto: supponiamo di aver misurato N volte la variabile x e di aver trovato 1 volta L e $N-1$ volte 0. Il metodo precedente ci da una distribuzione di probabilità della media X piatta nell'intervallo $[0 : LN^{-1}]$. Questo metodo ci da

$$P(X) = \frac{1}{2}\delta(X) + \frac{1}{2}(X - LN^{-1}). \tag{5.88}$$

I due risultati sono qualitativamente simili e la tendenza del secondo metodo a produrre picchi spuri sparisce rapidamente coll'aumentare del numero di dati significativi.

figure analisi per il valor medio di x partendo da 10 e 20 esempi con quattro metodi Gaussiano convenzionale, ripesaggio, selezione dei dati, conoscenza della distribuzione di probabilita i vari casi Cauchy, Gaussiana, esponenziale, binomiale. La stessa cosa per la mediana solo nel caso di Cauchy. Commenti, forse da fare dopo aver visto le figure.

5.6 Il Caso Vettoriale

Supponiamo adesso di aver misurato N volte un vettore $\overrightarrow{x}$ ad M componenti ($x^{\alpha}_{(k)}$, $\alpha = 1, M$, $k = 1, N$). I metodi introdotti nelle sezioni precedenti possono essere applicati senza difficoltà a questa situazione (tranne che per quel che riguarda alcuni sviluppi di tipo algebrico che diventano qui molto più complessi).

5.6.1 Il Caso Gaussiano

Cominciamo discutendo il caso, semplice, in cui possiamo assumere che i dati siano distribuiti in modo Gaussiano. La distribuzione sarà quindi per ipotesi di tipo Gaussiano, e dovremo ottimizzare i parametri che la caratterizzano. In altri termini supponiamo di sapere che

$$P\left(x^\alpha | a^\alpha, B^{\alpha,\beta}\right) = \frac{(2\pi)^{N/2}}{(\det(B))^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\sum_{\alpha,\beta}(x^\alpha - a^\alpha\right) B^{\alpha,\beta}\left(x^\beta - a^\beta\right)\right) . \tag{5.89}$$

Il nostro scopo è di ricostruire i parametri della distribuzione di probabilità a partire dai dati. Se procediamo esattamente come nel caso scalare di una singola quantità misurata possiamo provare a scrivere

$$P\left(a^\alpha, B^{\alpha,\beta} | X\right) \propto A(a,B) \det(B)^{-1/2} \prod_{k=1,N} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M}\left(x_k^\alpha - a^\alpha\right) B^{\alpha,\beta}\left(x_k^\beta - a^\beta\right)\right) . \tag{5.90}$$

Abbiamo qui vari problemi non banali: la scelta della probabilità a priori per le variabili B, che formano una matrice M, l'estrema difficoltà di integrare analiticamente (e anche numericamente) la distribuzione probabilità delle B, se non banale, per ottenere la distribuzione nelle sole variabili a.

Vogliamo incominciare lo studio del caso vettoriale procedendo nel modo più semplice possibile allo scopo di evidenziare alcune fra le caratteristiche nuove che si presentano quando si misurano più dati contemporaneamente.

Notiamo per prima cosa che

$$\begin{aligned} \langle x^\alpha \rangle &= a^\alpha \\ C^{\alpha,\beta} &= \langle x^\alpha x^\beta \rangle - \langle x^\alpha \rangle \langle x^\beta \rangle \end{aligned} \tag{5.91}$$

dove $C^{\alpha,\beta}$ è la matrice di covarianza che (come dimostrato nell'appendice de capitolo 3) è l'inverso della matrice B:

$$B^{\alpha,\beta} = \left(C^{-1}\right)^{\alpha,\beta} , \tag{5.92}$$

I parametri a^α e $C^{\alpha,\beta}$, analogamente a quanto visto nel caso scalare, possono essere stimati da in maniera imparziale da

$$a^\alpha = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} x^\alpha_{(k)} \equiv \overline{x^\alpha} , \tag{5.93}$$

e

$$C^{\alpha,\beta} = \frac{1}{N-1}\sum_{k=1}^{N}\left(x^\alpha_{(k)} - a^\alpha\right)\left(x^\beta_{(k)} - a^\beta\right) = \overline{\left(x^\alpha_{(k)} - a^\alpha\right)\left(x^\beta_{(k)} - a^\beta\right)} . \tag{5.94}$$

Per N sufficientemente grande possiamo provare ad evitare tutte le complicazioni associate al fatto che non conosciamo i parametri B, assumendo che il loro valore ottenuto a partire dalla stima

(5.94) per la matrice di covarianza sia quello corretto. Fisseremo quindi la matrice B utilizzando le equazioni (5.94) e (5.92). Dopo questa semplificazione (fatta quasi con l'accetta) possiamo scrivere

$$\begin{aligned} P\left(a^\alpha|X\right) &\propto \prod_{k=1,N} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M}\left(x_k^\alpha - a^\alpha\right) B^{\alpha,\beta}\left(x_k^\beta - a^\beta\right)\right) \\ &\propto \exp\left(-\frac{N}{2}\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M}\left(\overline{x}^\alpha - a^\alpha\right) B^{\alpha,\beta}\left(\overline{x}^\beta - a^\beta\right)\right) \end{aligned} \tag{5.95}$$

dove nei fattori di proporzionalità abbiamo inserito fattori moltiplicativi che non dipendono da a.

Nel caso generale la matrice di covarianza (e quindi la matrice B che è la sua inversa) non sarà diagonale e la distribuzione di probabilità delle singole componenti del vettore a non può scriversi in maniera fattorizzata. In altri termini sia i dati, che le nostre stime, presentano delle correlazioni tra vari termini. Possiamo dire che il valore stimato è per le a coincide proprio con le $\overline{x}$, ma per gli errori dobbiamo introdurre la matrice degli errori quadri

$$E_{\alpha,\beta} = N^{-1} C_{\alpha,\beta} \tag{5.96}$$

Proviamo ad usare i risultati ottenuti per stimare il valore medio $\langle g\rangle$ e l'errore associato e_g. un generica funzione $g(\{a^\alpha\})$. In generale avremo che data una funzione f arbitraria della g possiamo scrivere che e

$$\langle f(g)\rangle = \int \left(\prod_{\alpha=1}^{M} da^\alpha\right) \; P(\{a^\alpha\}) \; f(g(\{a^\alpha\})0 \approx f(g(\{\overline{x}^\alpha\})) + O(N^{-1}) \tag{5.97}$$

Abbiamo quindi che

$$\langle g\rangle \approx g(\{\overline{x}^\alpha\}) + O(N^{-1}) \tag{5.98}$$

Questo risultato è evidente: il problema un poco più delicato è il calcolo dell'errore associato a g. Notiamo preliminarmente che le quantità $a_\alpha - \overline{x}_\alpha$ sono piccole $(O(N^{-1/2})$ possiamo scrivere che

$$g(\{a^\alpha\}) = g(\{\overline{x}^\alpha\}) + \sum_\alpha g'^\alpha \tag{5.99}$$

dove

$$g'^\alpha \equiv \left.\frac{\partial g}{\partial x_\alpha}\right|_{\{x^\alpha\}=\{\overline{x}^\alpha\}} . \tag{5.100}$$

In questa approssimazione g è la somma di variabili gaussiane e quindi 'è distribuito in maniera gaussiana. L'errore associato a g si può quindi calcolare valutando la sua varianza. Si ottiene quindi

$$e_g^2 = \int \left(\prod_{\alpha=1}^{M} da^\alpha\right) P(\{a^\alpha\}) \left(g(\{a^\alpha\}) - \langle g\rangle\right)^2 \approx \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M} g'^\alpha\, C^{\alpha,\beta}\, g'^\beta \; = \sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M} g'^\alpha\, E^{\alpha,\beta}\, g'^\beta \tag{5.101}$$

Abbiamo quindi ottenuto la formula di propagazione degli errori nel caso di variabili correlate. Utilizzare in modo operativo la formula precedente può risultare poco pratico, soprattutto se $g(\overline{x})$ non è una funzione semplice e le sue derivate non possano essere calcolate facilmente. Inoltre c'è sempre il pericolo, che non è facile esorcizzare per M grande che i termini proporzionali a $\frac{\partial^2 g}{\partial x_\alpha x_\beta}$ che abbiamo trascurato in quanto di ordine N^{-2}, non siano alla fine completamente trascurabili.

Figura: distribuzione di x e y $\exp(-x^2 - y^2 - 10(x-y)^{2)}$ *estrazione di 20 termini e calcolo di $x - y$ con il metodo di propagazione degli errori esatto (e trascurando i termini fuori diagonale). Lo stesso col metodo generale della sezione successiva.*

5.6.2 Il Metodo del Ripesaggio in Generale

Una tecnica semplice da utilizzare consiste nell'applicare anche al caso vettoriale il metodo generale che abbiamo introdotto nella sezione (5.5), dove non si ha bisogno di supporre a priori che la distribuzione di probabilità dei dati sia una distribuzione Gaussiana. In questo modo si superano alcune delle difficoltà algebriche presenti nel metodo descritto nel paragrafo precedente nella scelta della distribuzione di probabilità a priori delle variabili B. Come nella sezione precedente ci riproproniamo di calcolare il valore di una funzione $g(X)$, dove X è un vettore M dimensionale che il valor medio di un vettore x rispetto ad una legge di probabilità $D(x)$ ignota.

$$X^\alpha = \int dx D(x) x^\alpha . \tag{5.102}$$

Le nostre sole conoscenze sulla probabilità D sono che in N casi si sono presentati (o sono stati misurati) i vettori x_k, le cui componenti verranno indicate con x_k^α. L'indice k e α prendono quindi N e M valori rispettivamente.

Nel caso relativamente semplice in cui sappiamo che che la distribuzione di probabiltà D può essere parametrizzata come $D(x|C)$, dove C è un insieme di parametri di controllo, possiamo scrivere che la probabilità di C, condizionata ai dati sperimentali è data da

$$P(C) \propto A(C) \prod_{k=1,N} D(x_k|C) \tag{5.103}$$

dove $A(C)$ è la distribuzione a priori dei parametri C. Per ogni valore di C possiamo calcolare il corrispondente valore di X e quindi risalire alla distribuzione di probabilità di X.

Qui vogliamo considerare il caso in cui non abbiamo questa informazione e siamo quindi costretti ad utilizzare il metodo del ripesaggio. In analogia al caso scalare otteniamo che una stima della distribuzione di probabilità di ciascuna componente di X, condizionata ai dati sperimentali, può essere ottenuta scrivendo

$$X^\alpha\left(\{p_k\}\right) = \sum_{k=1}^{N} p_k \; x_{(k)}^\alpha \;, \tag{5.104}$$

e facendo variare le p_k in maniera opportuna, ovvero con una distribuzione di probabilità $\left(P\left(\{p_k\}\right)\right)$ descritta nella sezione precedente. Consideriamo ora la funzione $g\left(X\right)$. Possiamo scriverne il valor medio di g e l'errore associato come

$$\begin{aligned}
\langle g\left(X\right)\rangle &= \int \left(\prod_{k=1}^{N} dp_k\right) \; P\left(\{p_k\}\right) \; g\left(X\left(\{p_k\}\right)\right) \\
&\simeq g\left(\int \left(\prod_{k=1}^{N} dp_k\right) \; P\left(\{p_k\}\right) \; X\left(\{p_k\}\right)\right) \;, \\
e_g^2 &= \langle g\left(X\right)^2\rangle - \langle g\left(X\right)\rangle^2 \;, \\
\langle g\left(X\right)^2\rangle &= \int \left(\prod_{k=1}^{N} dp_k\right) \; P\left(\{p_k\}\right) \; g\left(X\left(\{p_k\}\right)\right)^2
\end{aligned} \tag{5.105}$$

Per grandi valori di N le variabili X saranno distribuite gaussianamente se la kurtosis dei dati non è eccessivamente grande. In questo caso le stesse considerazioni analizzate nella sezione precedente mostrano che e_g è l'errore gaussiano associato alla quantità g. Nel caso generale che stiamo analizzando qui, dove la distribuzione di probabilità non è assunta Gaussiana per ipotesi, l'analisi dell'istogramma dei valori di g fornisce una stima della probabilità di g fedele anche per quel che riguarda la descrizione della coda della distribuzione. Il metodo che abbiamo descritto ha il vantaggio di essere di semplice uso anche nel caso di un numero elevato di variabili e di funzioni g molto complesse.

Si noti che l'uguaglianza approssimata

$$\langle g\left(X\right)\rangle \simeq g\left(\langle X\rangle\right) \tag{5.106}$$

è vera solo nell'ipotesi che il numero di prove N sia molto grande e che gli errori siano molto piccoli. In questo caso il vettore $X(\{p_k\})$ è concentrata intorno al valor medio. Infatti nel caso unidimensionale, se la funzione g è liscia e gli errori sono gaussiani possiamo scrivere che

$$\langle g\left(x\right)\rangle \simeq g\left(\langle x\rangle\right) + \frac{1}{2}\frac{d^2 g}{dx^2}\bigg|_{x=\langle x\rangle}(e_x)^2 \tag{5.107}$$

In generale bisogna stare attenti a non confondere la media sui dati sperimentali della funzione $g(x)$ (ovvero $\langle g\left(x\right)\rangle$) con la funzione $g(x)$ valutata sulla media (ovvero $g\left(\langle x\rangle\right)$. In tutta generalità non è mai vero (tranne che nel caso in cui la funzione g è lineare) che

$$\langle g\left(x\right)\rangle = g\left(\langle x\rangle\right) \ . \tag{5.108}$$

Consideriamo ad esempio il caso in cui x ha una sola componente e può prendere i due soli valori ± 1, con uguale probabilità $\frac{1}{2}$, e $g(x) = x^2$. In questo caso $\langle x\rangle = 0$, e $g(\langle x\rangle) = 0$, mentre $\langle x^2\rangle = 1$ e $\langle g(x)\rangle = 1$. Se consideriamo le medie empiriche su N dati sperimentali otteniamo che $\overline{x} = O(N^{-\frac{1}{2}})$ e quindi $g(\overline{x}) = O(N^{-1})$, mentre $g(\overline{x^2}) = 1$, esattamente per ogni valore di N.

5.6.3 Una Variazione sul Tema

Un metodo molto semplice per calcolare il valore di aspettazione di una funzione $\langle g\rangle$ e stimare l'errore associato e_g, nel caso di un numero di eventi N sufficientemente grande, consiste nello scrivere N come $N = KL$, dove sia K che L sono sufficientemente grandi: i dati vengono divisi in L gruppi di K elementi. Si introducono i valori medi calcolati sugli L gruppi, X_l, $l = 1, \cdots, L$ (omettiamo in questa sezione gli indici che caratterizzano i vettori X^α). Le quantità

$$g_l \equiv g(X_l) \tag{5.109}$$

sono uguali a $g(X)$ a meno di termini di ordine $K^{-\frac{1}{2}}$ (ricordiamo che X è la media sulle N misure). L'errore ed i valor medi ottenuti col metodo precedente coincidono con

$$\langle g\rangle = \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L} g_l \ , \quad e_g^2 = \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L}\left(g_l - \langle g\rangle\right)^2 \ , \tag{5.110}$$

a meno di termini che vanno a zero con L e K. Infatti il teorema del limite centrale ci assicura (per funzioni g ragionevoli) che la distribuzione di probabilità delle g_l è , per K sufficientemente grande, una distribuzione Gaussiana.

Quest'ultimo metodo e facile ad utilizzare per grandi valori di N (per esempio $N > 100$) avendo la cura di verificare sempre che la differenza tra

$$\frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L} g_l \qquad \text{e} \qquad g(X) \tag{5.111}$$

sia molto più piccola dell'errore stimato.

Un ulteriore vantaggio di questo metodo risulta essere di grande utilità quando i dati sperimentali non sono indipendenti, ma esistono correlazioni temporali non nulle fra diverse misure della stessa quantità. Se la correlazione è non nulla solo per una distanza fra le misure (che sono etichettate da un indice sottoscritto in parentesi) non troppo grande, cioè se le misure $x_{(k)}$ e $x_{(j)}$ sono correlate solo se $|k-j|$ è abbastanza piccolo (per esempio se la correlazione va a zero più velocemente di $|k-j|^{-1}$) le correlazioni tra le quantità g_l vanno a zero come K^{-1}. Grazie a questo fatto la divisione dei dati in vari blocchi riconduce il caso di dati non indipendenti a quello di dati indipendenti.

In pratica quando non si disponga di una stima a priori precisa della correlazione fra i dati, conviene utilizzare il metodo per diversi valori di L (ad esempio con $L = 1,\ 2,\ 4,\ 8,\ 16,\ 32\ \cdots$, sempre rispettando la condizione $L \ll N$). Tipicamente in caso di dati non indipendenti le stime degli errori risulteranno sottostimate per valori di L piccoli, mentre saranno quelle corrette a partire un valore di L sufficientemente grande (a partire da un valore di L, cioè , che sia paragonabile al *tempo di correlazione* fra le misure: i metodi Monte Carlo descritti in sezione (10.2) sono per queste tecniche un campo di applicazione ideale).

Nel triste caso in cui l'errore continua ad aumentare al variare di L (fino al valore massimo ottenuto per un valore di L compatibile con la condizione $L \ll N$), in maniera tale da rendere impossibile l'estrapolazione per $L \to \infty$, i dati ottenuti dalle misure sono talmente non indipendenti (o in altri termini il tempo di correlazione fra le misure è molto grande), da rendere molto difficile (o meglio impossibile) una stima attendibile dell'errore statistico: da misure fatte in queste condizioni non si impara molto.

Notiamo infine, a questo proposito, che ovviamente anche l'errore stimato al variare di L è una variabile aleatoria, soggetta a sua volta a fluttuazioni e ad una indeterminazione statistica che cresce al variare di L: bisognerà tenere presente questo fatto per non restare stupiti di fronte ad un possibile comportamento non monotono dell'errore stimato in funzione di L. L'indeterminazione statistica che affligge l'errore stimato può essere a sua volta stimata a partire dai dati sperimentali.

5.7 Il Metodo dei Minimi Quadrati

5.7.1 Il Caso di Dati Scorrelati

Consideriamo un processo di misura che coinvolga la determinazione di più variabili (il caso vettoriale che abbiamo discusso in precedenza). Fortunatamente è frequente il caso in cui argomenti teorici ci permettono di fissare la forma della dipendenza dei valori medi da alcuni parametri che determinano la distribuzione di probabilità. Consideriamo quindi le quantità x^α ed i loro valori medi

$$a^\alpha \equiv \int \left(\prod_{\alpha=1}^{M} dx^\alpha \right)\ D\left(\{x^\alpha\}\right)\ x^\alpha\ . \tag{5.112}$$

Assumeremo in tutta generalità che la dipendenza dei valori medi dall'insieme di parametri λ abbia la forma

$$a^\alpha = f^\alpha\left(\lambda\right)\ , \tag{5.113}$$

dove λ indica qui un insieme di L parametri da determinare. Indichiamo con λ^* il valore vero di λ, che ovviamente con conosciamo, ma di cui supponiamo l'esistenza. In altri termini vogliamo fare un *fit* ai dati e λ è il parametro del fit.

Trattiamo ad esempio il caso in cui la distribuzione dei dati sperimentali è Gaussiana per ipotesi, ed assumiamo per ora che le variabili etichettate dall'indice α non siano correlate fra loro. La probabilità dei valor medi a^α (condizionata ai dati sperimentali) sarà data, nel caso di un numero elevato di misure N, da

$$P\left(a^\alpha|\{x_{(k)}\}\right) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{M}\frac{\left(a^\alpha-\overline{x}^\alpha\right)^2}{e^{\alpha^2}}\right) \ , \tag{5.114}$$

dove ricordiamo che con le barre soprascritte stiamo indicando le medie sui dati sperimentali. Con e_α è l'errore associato alla variabile a_α:

$$(e^\alpha)^2 \equiv \frac{1}{N}\overline{\left(x^\alpha-\overline{x}^\alpha\right)^2} \ . \tag{5.115}$$

La distribuzione di probabilità dei nostri parametri λ sarà quindi data da

$$P\left(\lambda|\{x_{(k)}\}\right) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{M}\frac{\left(f^\alpha(\lambda)-\overline{x}^\alpha\right)^2}{(e^\alpha)^2}\right) \equiv \exp\left(-\frac{1}{2}E\left(\lambda,\overline{x}\right)\right) \ . \tag{5.116}$$

Se gli errori sono piccoli possiamo usare il metodo del punto di sella, sviluppando l'argomento dell'esponenziale in serie di Taylor vicino al suo minimo ($\frac{1}{(e^\alpha)^2}$ è in questo caso il parametro grande che rende valido lo sviluppo).

Cercheremo dunque il minimo della funzione $E(\lambda,\overline{x})$ come funzione di λ: diciamo Λ l'insieme dei valori dei parametri λ nel punto dove E è minimo al variare di λ a $\overline{x}$) fisso. Per N abbastanza grande Λ sarà vicino a λ^*, il valore dei parametri nella vera distribuzione di probabilità (a noi ignota). Il valore della funzione E per una data scelta dei parametri è detto χ^2: una determinazione dei parametri che consente una buona ricostruzione dei dati sperimentali ha tipicamente un valore di χ^2 basso (renderemo in seguito quest'affermazione più quantitativa). Tipicamente useremo la dizione χ^2 per indicare il valore di E sul minimo.

Consideriamo il caso in cui abbiamo un solo parametro λ. Sviluppiamo in primo luogo E intorno a Λ, cioè in potenze di $(\lambda-\Lambda)$. In questo caso, se la nostra ipotesi di partenza sulla distribuzione dei dati (5.113) non è insensata, le quantità $(f^\alpha(\Lambda)-\overline{x}^\alpha)$ sono piccole (tipicamente di ordine $N^{-\frac{1}{2}}$). Supponiamo anche che $\Lambda-\lambda^*$ sia dello stesso ordine di grandezza. Possiamo quindi sviluppare f^α come

$$f^\alpha(\lambda) \simeq \left.\frac{\partial f^\alpha}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=\Lambda}(\lambda-\Lambda) = (\lambda-\Lambda)\,F^\alpha = (\lambda-\Lambda)\,e^\alpha V^\alpha \ , \tag{5.117}$$

dove

$$F^\alpha = \frac{\partial f^\alpha}{\partial\lambda} \equiv e^\alpha V^\alpha. \tag{5.118}$$

La distribuzione di probabilità di λ risulta proporzionale a

$$P\left(\lambda|\{x_{(k)}\}\right) \propto \exp\left(-\frac{(\lambda-\Lambda)^2}{2}\sum_{\alpha=1}^{M}(V^\alpha)^2\right) \ . \tag{5.119}$$

La variabile λ ha quindi una distribuzione gaussiana e fluttuazioni tipiche di sono date da

$$\sigma^2(\lambda) = \left(\sum_{\alpha=1}^{M} (V^\alpha)^2 \right)^{-1} \tag{5.120}$$

Possiamo riassumere la situazione scrivendo che $\lambda = \Lambda \pm \sigma(\lambda)$.

Qual'è la distribuzione della funzione E calcolata al minimo, ovvero del χ^2 del fit? Per rispondere a questa domanda dobbiamo sviluppare intorno al minimo teorico λ^*. In questo caso si trova che

$$E(\lambda, \overline{x}) = \sum_{\alpha=1}^{M} (\delta y^\alpha - V^\alpha \delta\lambda)^2 \ , \tag{5.121}$$

dove δx^α è lo scostamento di $\overline{x^\alpha}$ dal suo valore atteso a^α, e $\delta\lambda$ è lo scostamento di λ dal suo valore teorico λ^* (ovvero $\delta\lambda \equiv \lambda(\overline{x}) - \lambda^*$). Per semplificare la notazione abbiamo introdotto la quantità $\delta y^\alpha \equiv \frac{\delta x^\alpha}{e^\alpha}$, che ha varianza 1.

Il valore del χ^2 sul minimo è dunque

$$\min_\lambda \left(\sum_{\alpha=1}^{M} (\delta y^\alpha - V^\alpha \delta\lambda)^2 \right) \ . \tag{5.122}$$

La quantità $\delta\lambda$ può essere determinata minimizzando l'espressione precedente, ed è data da

$$\delta\lambda = \frac{\sum_{\alpha=1}^{M} V^\alpha \ \delta y^\alpha}{\sum_{\alpha=1}^{M} (V^\alpha)^2} \ . \tag{5.123}$$

È possibile verificare che il valor medio di $\delta\lambda^2$ è dato proprio da $\sigma^2(\lambda)$, confermando in questo modo l'affermazione precedente sulle fluttuazioni della variabile λ.

Sostituendo il valore di $\delta\lambda$ (5.123) nell'espressione (5.122) troviamo che nel punto di minimo

$$\chi^2 = \sum_{\alpha=1}^{M} \delta {y^\alpha}^2 - \frac{\left(\sum_{\alpha=1}^{M} V^\alpha \delta y^\alpha \right)^2}{\sum_{\alpha=1,M} (V^\alpha)^2} \ . \tag{5.124}$$

Un calcolo più dettagliato, che illustreremo ora, mostra che χ^2 è proprio la somma dei quadrati di $M-1$ variabili indipendenti. Introduciamo il versore

$$\hat{n}^\alpha \equiv \frac{V^\alpha}{\left(\sum_\beta (V^\beta)^2 \right)^{\frac{1}{2}}} \ . \tag{5.125}$$

Il χ^2 può essere espresso come

$$\chi^2 = |\delta y|^2 - (\hat{n} \cdot \delta y)^2 \ . \tag{5.126}$$

Ruotiamo ora il nostro sistema di riferimento, in modo da far coincidere l'asse M con il versore $\hat{n}$. Indichiamo con r^μ le coordinate del vettore δy nella nuova base ($\mu = 1, \ldots, M$). Nel nostro nuovo sistema di riferimento la componente M-esima di r^μ è $r^M = (n \cdot \delta y)$. Ora quindi $|\delta y|^2 = |r|^2$ (visto che stiamo decomponendo lo stesso vettore su basi ortonormali diverse), ed il χ^2 è costruito sottraendo a questa somma la componente M-esima, cioè sommando le sole prime $(M-1)$ componenti. Mostriamo ora che le nuove variabili r^μ sono anch'esse distribuite in modo gaussiano (in quanto combinazioni lineari di variabili gaussiane), e sono fra loro indipendenti. Vediamo bene perché. Diciamo $R^{\mu,\alpha}$ la matrice di rotazione che fa passare dalle δy^α alle r^μ, ovvero

$$r^\mu = \sum_{\alpha=1}^{M} R^{\mu,\alpha} \ \delta y^\alpha \ . \tag{5.127}$$

Quindi si ha che

$$\overline{r^\mu r^\nu} = \sum_{\alpha=1}^{M} \sum_{\beta=1}^{M} R^{\mu,\alpha} \ R^{\nu,\beta} \ \overline{\delta y^\alpha \delta y^\beta} \ . \tag{5.128}$$

Ricordiamo che, come abbiamo notato esplicitamente, i vettori δy hanno autocorrelazione unitaria, cioè

$$\overline{\delta y^\alpha \delta y^\beta} = \delta_{\alpha,\beta} \ . \tag{5.129}$$

Quindi

$$\overline{r^\mu r^\nu} = \sum_{\alpha=1}^{M} R^{\mu,\alpha} \ R^{\nu,\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{M} R^{\mu,\alpha} \ \left(R^T\right)^{\alpha,\nu} \ . \tag{5.130}$$

Ma dato che R è una matrice di rotazione si ha che $RR^T = 1$, e che

$$\overline{r^\mu r^\nu} = \delta_{\mu,\nu} \ . \tag{5.131}$$

Abbiamo dimostrato quindi che

$$\chi^2 = \sum_{\mu=1}^{M-1} \left(r^\mu\right)^2 \ , \tag{5.132}$$

e cioè che χ^2 è la somma di $M-1$ variabili Gaussiane indipendenti di varianza 1.

In generale la distribuzione di probabilità della somma S dei quadrati di $M-1$ variabili Gaussiane con varianza unitaria è data da

$$\int dx^1 \dots dx^{M-1} \ \delta\left(S - \sum_{\mu=1}^{M-1} x^{\mu 2}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\mu=1}^{M-1} x^{\mu 2}\right) \propto S^{\frac{M-1}{2}-1} e^{-\frac{S}{2}} \ . \tag{5.133}$$

Inoltre il valor medio di S è $M-1$.

Utilizzando la stessa linea di ragionamento nel caso in cui la funzione di distribuzione vera dipenda da L parametri λ si ottengono delle formule simili, e si può concludere che

$$\langle \chi^2 \rangle = M - L \ , \tag{5.134}$$

e che la quantità χ^2 è la somma di $M-L$ variabili indipendenti.

Nel limite in cui $M-L$ è grande la quantità

$$\frac{\chi^2}{M-L} \ , \tag{5.135}$$

ovvero il χ^2 *per grado di libertà*, deve essere molto vicino a 1. Deviazioni da 1 di questa grandezza indicano molto spesso gravi problemi.

- Un valore di χ^2 per grado di libertà molto più grande di 1 suggerisce che la dipendenza dai parametri ipotizzata non sia corretta.

- Un valore di χ^2 per grado di libertà molto più piccolo di 1 suggerisce che i dati sperimentali siano correlati, e che bisogna ricorrere alle formule che ricaveremo nella prossima sezione.

Un metodo empirico molto usato per correggere le imprecisioni che portano ad un valore di χ^2 troppo alto (o basso), ed ottenere cosìuna stima dell'errore ragionevole, è il seguente. Come abbiamo visto la distribuzione di probabilità di λ è data da

$$P(\lambda) \propto \exp(-E(\lambda, \overline{x})) \ . \tag{5.136}$$

Il metodo consiste nel correggere questa probabilità, e nell'assumere che essa sia data invece da

$$P(\lambda) \propto \exp\left(-E(\lambda, \overline{x}) \ \frac{M-L}{\chi^2}\right) \ . \tag{5.137}$$

Ovviamente se la quantità (5.135) è molto vicina ad uno (come dovrebbe essere), le correzioni introdotte sono trascurabili. Si ottengono invece grandi correzioni se (5.135) differisce molto da 1.

Questo metodo è corretto solo se il valore anomalo di χ^2 è dovuto ad una sottostima (o sovrastima) generalizzata ed uniforme degli errori. Infatti la procedura che abbiamo descritto corrisponde a rinormalizzare tutti gli errori moltiplicandoli per una costante opportuna, in maniera tale che il valore di χ^2 risulti corretto. In generale il metodo non produce risultati corretti, e va applicato, non serve dirlo, *con un grano di sale*, ma può costituire, in mancanza di meglio, una prima stima ragionevole.

5.7.2 Il Caso di Dati Correlati

Il caso più interessante, che si realizza frequentemente e che è più difficile da trattare è quello di variabili correlate. Tipicamente se misuriamo ed analiziamo varie grandezze allo stesso tempo non si tratta di grandezze che non hanno nulla a che fare l'una con l'altra, ma di grandezze correlate. Se la matrice di covarianza dei dati è $C^{\alpha,\beta}$, gli stessi argomenti della sottosezione precedente portano alla conclusione che dobbiamo minimizzare

$$\chi^2 \equiv \sum_{\alpha=1}^{M} \sum_{\beta=1}^{M} \left(f^\alpha(\lambda) - \overline{x}^\alpha\right) B^{\alpha,\beta} \left(f^\beta(\lambda) - \overline{x}^\beta\right) \ , \tag{5.138}$$

dove B è la matrice inversa di C (che sostituisce il fattore $(e^\alpha)^{-2}$ che appariva nella trattazione di variabili non correlate). Il valor medio di χ^2 è dato anche in questo caso da

$$\langle \chi^2 \rangle = M - L \ . \tag{5.139}$$

Nel caso di variabili indipendenti la matrice di covarianza è diagonale e ritroviamo naturalmente i risultati noti.

In questo caso (come nel caso più semplice di variabili indipendenti che abbiamo trattato prima) possiamo tornare al nostro approccio generale, basato sull'introduzione di probabilità p_k perchè la misura prenda il valore $x_{(k)}$, che ci consente di costruire una procedura semplice per stimare gli errori che affliggono la stima data per il parametro λ (per semplicità di esposizione considereremo nel seguito il caso di un solo parametro libero λ, cioè di $L = 1$).

Procediamo come nei casi precedenti e ripesiamo di dati con dei pesi p_k, aleatori, scelti con la stessa distribuzione di prima introdotta nella sezione (5.5.2). Ogni evento riceve quindi un peso $\{p_k\}$ I valori di aspettazione ricavati dai dati sperimentali saranno detti come al solito X ed la loro distribuzione di probabilità può essere ottenuta al variare dei $\{p_k\}$ nell'equazione seguente:

$$X^\alpha\left(\{p_k\}\right) = \sum_{k=1}^{M} p_k \; x^\alpha_{(k)} \; . \tag{5.140}$$

Ora $\lambda = \lambda\left(\{p_k\}\right)$ può essere calcolato come il punto dove il χ^2 è minimo. Si considera cioè

$$\chi^2\left(\{p_k\}\right) \equiv \min_\lambda \left(\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M} \left(f^\alpha(\lambda) - X^\alpha\left(\{p_k\}\right)\right) B^{\alpha,\beta} \left(f^\beta(\lambda) - X^\beta\left(\{p_k\}\right)\right) \right) \; . \tag{5.141}$$

Come al solito l'istogramma di $\lambda\left(\{p_k\}\right)$ al variare dei coefficienti $\mathbf{p}$ ci fornisce la distribuzione di probabilità di λ. In altri termini dati i dati sperimentali possiamo fare un numero elevato di estrazione dei pesi p, per ciascuna estrazione associamo un valore di λ minimizzando il χ^2, se facciamo l'istogramma dei λ risultanti, questo da la distribuzione di probabilità di λ condizionata ai dati.

Nel caso in cui N è grande ed i dati sono distribuiti in maniera Gaussiana, troviamo che

$$\Lambda \equiv \langle\lambda\rangle = \int \left(\prod_{k=1}^{M} dp_k\right) \; P\left(\{p_k\}\right) \; \lambda\left(\{p_k\}\right) \; , \tag{5.142}$$

e

$$\sigma^2(\lambda) \equiv \left\langle (\lambda - \langle\lambda\rangle)^2 \right\rangle \; . \tag{5.143}$$

È spesso difficile sapere quale sia la vera forma della matrice di covarianza (cioè come siano veramente correlate la variabili misurate): discutiamo quindi quale sia l'approccio che porti comunque ad una scelta ragionevole di λ. Consideriamo il caso in cui le variabili X siano distribuite gaussianamente al variare delle p_k, in presenza di un solo parametro λ. Scegliamo una matrice in linea di principio arbitraria $D^{\alpha,\beta}$, e minimizziamo la quantità

$$\chi^2_D \equiv \sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M} \left(f^\alpha(\lambda) - X^\alpha\left(\{p_k\}\right)\right) D^{\alpha,\beta} \left(f^\beta(\lambda) - X^\beta\left(\{p_k\}\right)\right) \; . \tag{5.144}$$

In questo caso si vede che il valor di aspettazione (al variare delle $\{p_k\}$) della posizione del minimo non dipende da D. Si trova infatti che il minimo di χ^2_D viene assunto per

$$\delta\lambda = \frac{\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M} F^\alpha \; D^{\alpha,\beta} \; \delta X^\beta}{\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M} F^\alpha \; D^{\alpha,\beta} \; F^\beta} \; . \tag{5.145}$$

Questa relazione è analoga alla (5.123), valida per il caso di dati non correlati fra loro. δX è lo scostamento di X dal valore aspettato f, mentre F è, come prima, la derivata di f rispetto a λ calcolata sul minimo.

Un semplice calcolo mostra che il valor medio di $\delta\lambda^2$ è dato da:

$$\langle\delta\lambda^2\rangle_D = \frac{\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M}\sum_{\gamma=1}^{M}\sum_{\epsilon=1}^{M} F_\alpha \; D_{\alpha,\beta} \; C_{\beta,\gamma} \; D_{\gamma,\epsilon} F_\epsilon}{\left(\sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{\beta=1}^{M} F_\alpha \; D_{\alpha,\beta} \; F_\beta\right)^2} \; . \tag{5.146}$$

L'errore stimato dipende dalla scelta di D. È possibile dimostrare che la scelta $D = C^{-1}$ è quella che produce l'errore più piccolo, ed è semplice verificare che in questo caso

$$\frac{\partial\langle\delta\lambda^2\rangle_D}{\partial D_{\alpha,\beta}} = 0 \; . \tag{5.147}$$

Cioè per $D = C^{-1}$ si ottiene che

$$\langle \delta\lambda^2 \rangle_{C^{-1}} = \left(\sum_{\alpha=1}^{M} \sum_{\beta=1}^{M} F_\alpha \; C^{-1}_{\alpha,\beta} \; F_\beta \right)^{-1} \quad . \tag{5.148}$$

In altri termini possiamo dire che se non usiamo esattamente l'inversa della matrice di correlazione, non facciamo che aumentare l'errore stimato, rendendolo più grande di quello vero. Tipicamente una stima ragionevole della matrice di correlazione è sufficiente per ottenere un errore non troppo grande.

Nel caso in cui i dati non siano terribilmente correlati, buoni risultati sono dati perfino dalla semplice scelta di non considerare le loro correlazioni, assumendo

$$D^{\alpha,\beta} = \delta_{\alpha,\beta} e^{\alpha 2} \ , \tag{5.149}$$

dove $e^{\alpha 2}$ è l'errore associato alla variabile x^α.

Questa soluzione presenta però due svantaggi: gli errori stimati sono più grandi di quelli veri, ed il valore di χ^2 per grado di libertà non è più 1, per cui non possiamo più renderci conto della bontà delle assunzioni fatte nel caratterizzare la distribuzione di probabilità dei dati sperimentali. Per quanto possibile è sempre opportuno cercare di partire da una buona stima della matrice di covarianza dei dati sperimentali, e calcolare quindi il vero χ^2 (che è diverso dal χ^2_D con D non simile a C^{-1}). Inoltre usando un D molto diverso da C^{-1} sprechiamo dell'informazione contenuta nei dati. Avvertiamo tuttavia il lettore a fare attenzione nel calcolo dell'inversa della matrice di covarianza con un numero piccolo di dati. Infatti se il numero di volte in cui è stata effettuata la misura (N) è più piccola del numero (M) dei dati, la matrice di covarianza ha (per inevitabili motivi matematici) $M - N$ autovalori nulli e quindi il suo inverso è mal definito. Una cura particolare nel procedere è necessaria in questo caso molto delicato (per esempio conviene incrociare le dita prima di fare qualsiasi cosa).

FIGURA: prendiamo $f_i = \prod_{k=1,i} r_i \ i = 1, m$dove le r sono piatte su 0-1. Prendiamo un numero 10, 100 di casi e facciamo un fit esponenziale. chi quadro ingenuo, chi quadro fatto calcolando le correlazioni, ripesaggio con chi quadro e con chi quadro correlato.

5.8 Alcune Considerazioni sulla Scelta della Probabilità a Priori

Un possibile punto di partenza per determinare una scelta della probabilità a priori che corrisponde alla massima ignoranza consiste nel cercare di evitare di pesare in maniera eccessiva distribuzioni di probabilità che in fondo non sono molto differenti tra di loro. Questo problema è stato studiato in dettaglio. Qui presentiamo il risultato fondamentale (vedi cond-mat 9601030). I matematici infatti hanno visto che esiste una misura naturale sullo spazio delle distribuzioni di probabilità che è in qualche modo equidistribuita in maniera di pesare in modo omogeneo le varie ipotesi.

Consideriamo una distribuzione di probabilità $P(\overline{x}|\overline{h})$ che dipende da M parametri h_i. Dati due valori dei parametri $\overline{h}$ (siano essi $\overline{h}$ e $\overline{k}$) definiamo la funzione

$$S(\overline{h}|\overline{k}) = \int d\overline{x} P(\overline{x}|\overline{k}) \ln \left(\frac{P(\overline{x}|\overline{k})}{P(\overline{x}|\overline{h})} \right) \tag{5.150}$$

che gli esperti possono riconoscere come l'entropia della probabilità $P(\overline{x}|\overline{k})$ condizionata alla probabilità $P(\overline{x}|\overline{h})$.

Usando la condizione di normalizzazione della probabilità, è facile vedere che

$$S(\overline{k}|\overline{k}) = 0, \quad \frac{\partial S(\overline{h}|\overline{k})}{\partial k_i}\bigg|_{\overline{h}=\overline{k}} = 0 \tag{5.151}$$

Possiamo quindi considerare il termine successivo dello sviluppo in serie di Taylor e scrivere

$$S(\overline{h}|\overline{k}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1,M} g_{i,j}(\overline{h})\delta_i\delta_j + O(\delta^3) \tag{5.152}$$

dove

$$k_i = h_i + \delta_i. \tag{5.153}$$

La quantità $g_{i,j}(\overline{h})$ si puo anche riscrivere come

$$g_{i,j}(\overline{h}) = \int dx \frac{\partial P(\overline{x}|\overline{h})}{\partial h_i} \frac{\partial P(\overline{x}|\overline{h})}{\partial h_j} P(\overline{x}|\overline{h})^{-1}. \tag{5.154}$$

Calcoli più dettagliati fanno vedere che g è una metrica naturale sullo spazio dei parametri e quindi una distribuzione di probabilità naturale sullo spazio delle ipotesi è data proprio da

$$d\overline{h}\sqrt{\det g(\overline{h})}, \tag{5.155}$$

che è normalmente indicata come la distribuzione *a priori* di Jeffreys.

Una proposta da considerare seriamente consiste nel prendere in caso di ignoranza assoluta come misura di probabilità la distribuzione di Jeffreys.

I motivi profondi che giustificano questa scelta vanno al di là degli scopi elementari di questo libro. Ci limiteremo qui a verificare che otteniamo risultati simili a quelli che avevamo ottenuto con considerazioni euristiche in casi semplici. Ovviamente quest'ultimo metodo si può usare anche in casi ben più complicati ed ha il vantaggio di dare sempre lo stesso risultato se si cambia la definizione dei parametri (in altri termini il risultato finale è invariante sotto riparametrizzazioni). Infatti se consideriamo delle ipotesi $\overline{r}$ che sono funzioni di $\overline{h}$ e chiamiamo w la metrica di Jeffreys nello spazio delle $\overline{r}$, troviamo che

$$\det(w(\overline{r})) = J^2(\overline{r}) \det(g(\overline{h}(\overline{r}))) \tag{5.156}$$

dove J è il determinante Jacobiano della matrice $\frac{\partial h_i}{\partial r_k}$. Le due misure di Jeffreys nei due spazi

$$d\overline{h}\sqrt{\det g(\overline{h})} \quad e \quad d\overline{r}\sqrt{\det w(\overline{r})}, \tag{5.157}$$

sono quindi connesse dalle usuali regole che si applicano per il cambio di variabili. La scelta quindi della parametrizzazione dello spazio delle ipotesi, che causava tanti guai nell'approccio ingenuo, diventa qui irrilevante.

Vedremo nei capitoletti successivi il calcolo esplicito della metrica di Jeffreys in due casi semplici

5.8.1 La Distribuzione di Poisson

In questo caso possiamo considerare due distribuzioni di Poisson, caratterizzate dai parametri λ e μ che giocano lo stesso ruolo di $\overline{h}$ e $\overline{k}$. Abbiamo quindi che

$$S(\mu|\lambda) = \sum_n \exp(-\mu)\frac{\mu^n}{n!} \ln\left(\exp(\lambda-\mu)(\frac{\mu}{\lambda})^n\right) = \lambda - \mu\ln(\frac{\mu}{\lambda}). \tag{5.158}$$

As a consequence $g = \lambda^{-2}$ e la misura naturale è proprio λ^{-1}.

5.8.2 La distribuzione Gaussiana

Consideriamo il caso della distribuzione Gaussiana data da

$$P(x|a,b) = (\frac{1}{2\pi b^2})^{1/2} \exp(-\frac{(x-a)^2}{2b^2}). \tag{5.159}$$

Se a e b giocano il ruolo di prima e seconda coordinata otteniamo che

$$g_{12} = g_{21} = 0, \quad g_{11} = 2b^{-2}, \quad g_{22} = b^{-2}, \tag{5.160}$$

La misura naturale risulta essere quindi

$$\frac{da}{b}\frac{db}{b} \tag{5.161}$$

Rispetto all'analisi precedente il risultato ha lo stesso fattore $\frac{db}{b}$ dell'analisi ingenua, ma c'e un fattore b^{-1} davanti all'integrazione in a.

I risultati finali sono abbastanza simili a quelli precedenti e coincidono a meno del cambiamento $(N \to N+1)$ nella potenza: troviamo infatti

$$P(a|x) \propto ((a-\overline{x})^2 + \sigma^2)^{-\frac{N+1}{2}}. \tag{5.162}$$

Il lettore accorto avrà già notato che le formule che si ottengono per la misura sulle ipotesi dipendono tuttavia dalla misura sullo spazio degli osservabili (delle x in breve) e quindi questo punto di vista fornisce una misura naturale sullo spazio delle ipotesi solo a partire da ua misura *naturale* sullo spazio degli eventi.

5.8.3 Il paragone tra due ipotesi

Un problema molto difficile da risolvere è fare il paragone tra due teorie differenti e decidere in base ai dati sperimentali quale è la migliore. Spesso viene fatto un paragone in base al valore del χ^2 minimo, metodo che è solo parzialmente giustificato, anche nel migliore dei casi.

Proviamo ad affrontare questo compito in un caso semplice con un approccio di tipo strettamente Baysiano. Supponiamo di avere N misure del vettore x_k per $k = 0, 10$ e supponiamo di avere le seguenti due teorie che vogliamo confrontare;

1. La distribuzione di probabilità degli x_k è data da

$$\prod_{k=0,10} (\pi)^{-1/2} \exp(-(x_k - a)^2) \tag{5.163}$$

dove sappiamo a priori che $-1 < a < 1$.

2. La distribuzione di probabilità degli x_k è data da

$$\prod_{k=0,10} (\pi)^{-1/2} \exp(-(x_k - b - c\ k)^2) \tag{5.164}$$

dove sappiamo a priori che $-1 < b < 1$ e $1 < c < 1$.

Supponiamo che le due ipotesi abbiano a priori la stessa probabilità e che la distribuzione dei parametri sia data dalla misura di Jeffreys che indichiamo rispettivamente con $d\mu(a)$ e $d\mu(b,c)$, normalizzate in maniera tale che

$$\int d\mu(a) = 1 \qquad \int d\mu(b,c) = 1. \tag{5.165}$$

Otteniamo quindi che la distribuzione di probabilità delle due ipotesi è data rispettivamente nei due casi da

$$\begin{gathered} \frac{d\mu(a)\exp(-A(a))}{Z_1+Z_2} \\ \frac{d\mu(b,c)\exp(-B(b,c))}{Z_1+Z_2} \end{gathered} \tag{5.166}$$

dove

$$\begin{aligned} A(a) &= \sum_{i=1,N;k=0,10} (x_k^{(i)} - a)^2, \\ B(b,c) &= \sum_{i=1,N;k=0,10} (x_k^{(i)} - b - c\,k)^2. \end{aligned} \tag{5.167}$$

e

$$\begin{aligned} Z_1 &= \int d\mu(a)\exp(-A(a)) \\ Z_2 &= \int d\mu(b,c)\exp(-B(b,c)) \end{aligned} \tag{5.168}$$

È evidente a questo punto che la probabilità della prima ipotesi è data da

$$\frac{Z_1}{Z_1+Z_2.} \tag{5.169}$$

Dato che sia quantità ($A(a)$ e $B(b,c)$ sono essenzialmente i χ^2 dei fit, se trascuriamo i prefattori e approssimiamo l'integrale che definisce le Z col suo valore nel massimo, otteniamo il criterio del paragone del χ^2. Ovviamente il punto di vista qui esposto è molto più consistente dal punto di vista teorico.

Figura fare i calcoli dei μ, mettere N=100, per esempio, far variare b tra 0 e .2 con a=0 e vedere la differenza tra il risultato con il χ^2 e quello con questo metodo e commentare

Una simile tecnica per fare il confronto tra due ipotesi è applicabile nel caso che lo spazio delle ipotesi ammissibili sia tale che

$$\int d\overline{h}\sqrt{\det g(\overline{h})} < \infty, \tag{5.170}$$

evento che capita facilmente se abbiamo motivi teorici di restringere la regione di integrazione sulle $\overline{h}$ ad un insieme compatto dove la misura non è singolare. In questo caso la distribuzione di probabilità a priori sulle ipotesi può essere normalizzata a 1 o a 1/2 a seconda dei casi.

5.9 Un'Appendice sui Numeri Casuali

In molti contesti (si veda ad esempio il capitolo sui metodi Monte Carlo (10)) la generazione su calcolatori di *numeri pseudo-casuali* ha un ruolo cruciale. Vogliamo pertanto discuterne qui brevemente. Per dettagli più precisi rimandiamo il lettore al testo di Knuth [6], ed al testo di metodi numerici [9], che contiene un capitolo, e vari programmi specifici, sui numeri pseudo-casuali. Per motivi che chiariremo nel seguito il problema della generazione di numeri pseudo-casuali costituisce un campo in continua evoluzione: per questo ci sentiamo tenuti a citare un server *WWW*, [13], che segue in modo assiduo le evoluzioni del campo, e che è una fonte autorevole per nuovi risultati, nuove referenze, nuovi programmi.

In linea di principio noi saremmo interessati a delle serie di veri numeri casuali, che godano in modo esatto di proprietà teoriche da noi postulate. Un calcolatore elettronico non farà questo, rintracciando la sua indole di oggetto eminentemente deterministico per rifiutare ogni comportamento aleatorio: le sequenze di numeri generati da un programma di un calcolatore elettronico (non rotto) saranno sequenze puramente deterministiche di numeri, generate da un algoritmo complesso, capaci di confondere noi, ed il sistema che stiamo studiando, e di apparire come sequenze aleatorie.

In realtà la discussione sul senso di sequenza casuale o pseudo-casuale non riguarda solo la generazione di numeri aleatori su calcolatori, ma si applica più in generale alla discussione della gran parte dei fenomeni studiati dalle scienze naturali. Se dimentichiamo per un attimo la Meccanica Quantistica, che è oggi il nostro strumento intellettuale fondamentale per comprendere la natura, dove il comportamento aleatorio è ipotizzato come un meccanismo fondamentale delle leggi fisiche, e studiamo fenomeni che non avvengono su scale di energia troppo grandi, la situazione tipica è quella in cui un comportamento che definiamo come casuale è un comportamento sostanzialmente deterministico, governato però da leggi troppo complesse per noi. Nel caso del lancio di un dado, ad esempio, se fossimo in grado di scrivere con altissima precisione le condizioni iniziali, la forze impresse al dado, ed i dettagli della sua struttura, potremmo calcolarne con esattezza il risultato: il problema è , sulle scale di energia rilevanti nel processo, un problema eminentemente deterministico, che rappresenta però, a causa della sua grande complessità, il prototipo di un problema aleatorio (non entriamo qui nei dettagli dei cosiddetti *comportamenti caotici* che potrebbero aprire un altro ramo di questa discussione).

Probabilmente il modo di vedere la questione che meglio può far testo nel seguito è sostenere che una sequenza di numeri generata da un calcolatore mediante un dato algoritmo è una buona sequenza pseudo-casuale se è apparentemente indistinguibile da una seguenza casuale. In altri termini richiederemo che, data ad esempio una sequenza di numeri pseudo-random $\{r_k\}$ distribuiti uniformemente fra 0 ed 1, siano vere con ottima approssimazione (per funzioni f e g sufficientemente lisce) relazioni del tipo:

$$\begin{aligned}
\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{k=1,N} f(r_k) &= \int_0^1 dr\ f(r)\ ,\\
\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{k=1,N} g(r_k,r_{k+1}) &= \int_0^1 dr\ ds\ g(r,s)\ .
\end{aligned} \tag{5.171}$$

Ovviamente un buon programma che utilizza k bit di memoria non dovrebbe produrre una sequenza di numeri casuali periodica di lunghezza molto inferiore a 2^k, che il massimo teorico per il periodo. Il periodo, pur essendo finito, in molti casi si può considerare infinito a tutti gli scopi pratici in molti casi. Infatti mentre un generatore che usa un intero a 32 bit ha un periodo che è dell'ordine di 10^9, che non è un numero spaventosamente grande, generatori a 64 bits hanno periodi dell'ordine di 10^{18} ed è facile fare generatori che hanno periodi estremamente elevati. Un generatore che utilizzi per esempio 57 numeri ha 32 bit può avere un periodo dell'ordine di 10^{500}.. Il modo più semplice, e probabilmente più diffuso, per generare una sequenza di numeri pseudo-casuali distribuiti uniformemente nell'intervallo compreso fra 0 ed 1 è basato sul cosidetto metodo delle *congruenze* *lineari*. Si comincia con un valore iniziale ρ_0 (il *seme*) che inizializza la relazione iterativa), e poi il numero $i+1$-esimo è ottenuto, in funzione del numero i-esimo, come

$$\rho_{i+1} = (A\rho_i + B) \ \% \ \mu \ , \tag{5.172}$$

dove con % abbiamo indicato l'operazione di modulo, A è il cosidetto *moltiplicatore*, B è l'*incremento*, e μ è, appunto, il cosiddetto *modulo*. La scelta di valori "buoni" per i parametri A, B e μ è argomento molto delicato e soggetto eminentemente empirico: il campo della matematica applicata che ricorda più da vicino l'alta cucina è probabilmente proprio la scelta di coefficienti adeguati. Il problema è profondo, ed ha a che fare con l'enorme numerico di caratteristiche che andrebbero verificate prima di dichiarare un generatore accettabile. Lo spazio dei tests possibili è di dimensione infinita, e generatori del tutto adeguati per alcuni problemi possono fallire drammaticamente per altri problemi (può capitare ad esempio che un generatore che si era comportato bene per simulare reticoli di taglia fino a 31^3 collassi, mettendo in mostra drammatiche inadeguatezze, su un reticolo 32^3, che ha avuto la sfortuna di cogliere esattamente una qualche periodicità dell'algoritmo). Probabilmente empiricamente possono essere dette due cose: in primo luogo che in generatori "buoni" sono quelli che passano almeno i tests più diffusi, ed in secondo luogo che l'esperienza gioca in questo campo un ruolo cruciale. Se un generatore è stato usato in molte situazioni almeno le debolezze più facili da trovare saranno probabilmente escluse: tipicamente, con probabilità molto alta, un generatore inventato da noi, pensando di migliorare, finirà per manifestare dei problemi seri. In questo campo è meglio fidarsi del sapere accumulato. In generale, come sottolinea Knuth, i programmi per generare numeri a caso non devono essere scritti a caso. Infatti per un algoritmo che non ha profonde giustificazioni matematiche può capitare molto spesso che il periodo sia estremamente corto, per non parlare delle possibili correlazioni tra i numeri prodotti.

Una semplificazione ulteriore dei generatori a congruenze lineari si ottiene mettendo l'incremento B a zero, definendo cosìi generatori a *congruenze moltiplicative*

$$\rho_{i+1} = (A\rho_i) \ \% \ \mu \ , \tag{5.173}$$

dei quali discuteremo adesso.

Notiamo in primo luogo che sono possibili scelte drammaticamente cattive. Una scelta storica, che è stata usata per lungo tempo come generatore di macchina su molti calcolatori, è la famosa e nefasta

$$A = 65539 \quad \mu = 2^{31} \quad \textbf{da non usare!} \ . \tag{5.174}$$

Prima che ne fosse chiara l'inadeguatezza [9] questa implementazione ha piagato generazioni di simulazioni numeriche.

Un generatore molto usato in letteratura, che in qualche senso costituisce uno standard, è il semplice

$$A = 7^5 = 16807 \quad \mu = 2^{31} - 1 \quad , \tag{5.175}$$

del quale è positivo soprattutto sia stato usato molto, senza che siano state notate patologie troppo macroscopiche.

L'algoritmo semplificato definito in (5.173) può essere semplificato ulteriormente scegliendo per μ proprio 2 elevato al numero di bit che costituiscono una parola del nostro calcolatore (tipicamente, ai giorni nostri, 32 o 64): in questo caso l'operazione di modulo viene eseguita in modo automatico grazie al troncamento effettuato nell'hardware stesso del calcolatore. Un primo esempio, molto diffuso, di questo tipo, è

$$A = 69069 \quad \mu = 2^{32} \quad . \tag{5.176}$$

È frequentemente possibile mostrare, per questi generatori, che se $\rho_0 \neq 0$ il periodo è vicino il massimo possibile.

Si noti tuttavia che nel caso di quest'ultimo generatore si ha la relazione

$$\rho_{i+1} - \rho(i) = \rho_{i+1+m} - \rho(i+m) \tag{5.177}$$

per m relativamente bassi ($m = 2^{16}$), come è facile verificare e la cui prova è lasciata come esercizio al lettore con tendenze matematiche. Un simile colpo alla causualità della successione può essere del tutto irrilevante, (e lo è nella maggior parte dei programmi), ma in casi particolari può portare al disastro più completo.

In generale i generatori congruenziali sono relativamente privi di difetti quando μ è primo, tuttavia la scelta $\mu = 2^{32}$ rende i conti molto più veloci ed è spesso favorita.

Sui calcolatori più recenti è naturale ed economico lavorare con parole di 64 bit (dato che molti processori di ultima generazione sono basati su operazioni che agiscono su parole di 64 bit). In questo caso una scelta possibile e probabilmente ragionevole [13] è

$$A = 6364136223846793005 \quad \mu = 2^{64} \quad , \tag{5.178}$$

dove, ad esempio in linguaggio C, la variabile che contiene il numero pseudo-casuale va definita con un tipo a 64 bit veri (tipicamente la dichiarazione `unsigned long long` adempie a questo compito), ed il modulo è preso automaticamente. In questo caso la relazione (5.177) è valida, ma con $m = 2^{32}$ e quindi è potenzialmente molto meno pericolosa.

Su molti calcolatori ed in molti linguaggi è disponibile una funzione di macchina che genera numeri casuali: è bene non fidarsi di queste funzioni ad occhi chiusi, ma è di solito ragionevole usarle per la fase iniziale dello sviluppo di codici che abbiano bisogno di numeri pseudo-casuali. Ad esempio sovente in Fortran la sequenza di istruzioni

```
REAL A(1000), RAN
INTEGER I, IRR
IRR = 1234567
DO I = 1, 1000
  A(I) = RAN(IRR)
ENDDO
```

riempie il vettore A di numeri pseudo-casuali uniformemente distribuiti nell'intervallo $(0-1]$: questi valori dipendono dal valore iniziale di `IRR`. La sequenza così generata ha tipicamente un periodo molto lungo (quasi sempre dell'ordine di 2^{32}).

La generazione di numeri pseudo-casuali ha vari punti delicati. Ci limitiamo qui a segnalarne alcuni, lasciando all'esperienza che il lettore si farà il compito di accumulare altri brutti (e, perché no, bei) ricordi. Conviene in primo luogo, una volta inizializzato il generatore con un seme, estrarre un certo numero di valori da scartare (tipicamente un centinaio è una buona quantità). Questo perché le buone proprietà statistiche del generatore sono condivise da sequenze tipiche, all'equilibrio, mentre all'inizio la sequenza può essere molto atipica (si immagini di partire con il valore 1 per il bit più basso e 0 per tutti gli altri bit: anche se velocemente questa sequenza diventa tipica, ci si chieda all'inizio cosa ne è dei bit alti).

Punti delicati possono essere inoltre i bit bassi del numero (che a volta presentano una non-casualità difficile da sospettare a priori). Poco si sa sulle possibili correlazioni dei vari bit dei numeri pseudo-casuali: usare un numero pseudo-casuale per sperare di estrarne 32 o 64 bit casuali e non correlati risulta spesso essere una procedura non corretta. Un altro aspetto cruciale, da tenere sotto controllo, è quello della distribuzione di vettori formati da D successivi numeri pseudo-casuali: si associano i primi D numeri in un vettore d-dimensionale, quelli da $D+1$ a $2D$ in un secondo vettore e cosìvia. L'analisi delle correlazioni di questi punti in uno spazio D-dimensionale riserva spesso delle sorprese.

Un ultimo punto delicato cui vogliamo accennare riguarda la generazione in parallelo di numeri pseudo-casuali: pensiamo qui ad un calcolatore parallelo costituito da più processori che producono allo stesso tempo numeri pseudo-casuali che devono essere indipendenti. Qui bisogna prestare attenzione al problema di generare i semi necessari, uno per processore, in modo che le diverse sequenze parallele non risultino correlate.

Molto spesso servono dei numeri casuali nell'intervallo $[0-1]$. A questo scopo possiamo per esempio prendere in numero random generato con il generatore congruenziale e porre

$$r_i = \frac{\rho_i}{\mu} \tag{5.179}$$

Il lettore deve tener conto che i valori estremi dell'intervallo, ovvero 0 e 1, possono apparire tra i numeri generati a secondo di come sono definite le variabili. nel migliore dei mondi possibili, dove per $\mu = 2^{32}$ e la variabile r e in doppia precisione (64 bit) (anche le divisioni sono fatte in doppia precisione) i numeri reali ottenuti vanno da $\frac{1}{mu}$ a $1 - \frac{1}{mu}$.

Spesso una regola empirica per ottenere dei numeri casuali migliori, consiste nell'utilizzare due sequenze r e s di numeri casuali nell'intervallo [0-1] e prendere come numero casuale risultante la somma $r_i + s_i$ modulo 1. Quest'operazione spesso distrugge possibili correlazioni presenti in ciascuna delle due sequenze, ma deve essere fatta riflettendo bene a quello che si fa, avendo bene in mente i difetti o le correlazioni di ciascuna delle due sequenze, per evitare di correre il rischio di esaltare i difetti invece di migliorarli. In questo campo conviene evitare di procedere a caso.

Consideriamo infine un problema che si ha spesso bisogno di risolvere: dati dei numeri pseudo-casuali distribuiti uniformemente fra 0 ed 1, $\{\rho\}$, vogliamo ottenere una sequenza di numeri pseudo-casuali $\{R\}$ distribuiti in modo differente, secondo la distribuzione di probabilità $P(R)$. Ci aiutano qui le considerazioni fatte nell'appendice (3.5.2). Consideriamo qualche caso specifico di grande importanza.

- Se vogliamo ottenere che

  $$P(R) = e^{-R} , \quad \text{con} \;\; 0 < R < \infty , \tag{5.180}$$

  dobbiamo porre $R = -\log(\rho)$.

- Nel caso in cui vogliamo ottenere valori distribuiti Gaussianamente abbiamo bisogno di due numeri ρ_1 e ρ_2 uniformi indipendenti (ma otterremo in cambio due valori distribuiti Gaussianamente: in alcuni casi è opportuno usarne uno solo). Sia cioè

  $$P(R) = \frac{e^{-\frac{R^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} , \quad \text{con} \quad -\infty < R < \infty . \tag{5.181}$$

  I due valori R_1 ed R_2 risultano distribuiti secondo la (5.181):

$$R_1 = (-2 \log \rho_1) \cos (2\pi\rho_2) \quad , \; R_2 = (-2 \log \rho_1) \sin (2\pi\rho_2) \ . \tag{5.182}$$

Questo è il caso tipico in cui è facile commettere un errore.

FIGURA da fare.

Nella figura vediamo l'istogramma del numero random $R1$ dove abbiamo usato per ρ_1 e ρ_2 due numeri random generati in sequenza dal buon generatore congruenziale (5.175) e abbiamo usati 10^9 eventi, circa tutto il periodo. Siamo ovviamente ciechi a probabilità più piccole di 10^{-9}, ma è facile vedere che il disastro comincia a probabilità dell'ordine di 10^{-4}. L'origine del disastro è evidente. Affinché il numero R_1 sia grande il numero ρ_1 deve essere piccolo, ma non appena $\rho_1 << 16807^{-1}$, anche ρ_2 sarà piccolo e quindi il $\cos(2\pi\rho_2$ molto vicino a 1, causando quindi un buco assoluto per valori fortemente negativi e un eccesso a valori positivi. La soluzione più semplice consiste nell'usare due sequenze diverse per ρ_1 e ρ_2, ottenute dallo stesso generatore, ma inizializzato con semi diversi, o con con due generatori diversi (meglio). Il generatore a 64 bit che abbiamo appena descritto sembra essere immune da questa patologia.

Il lettore rifletta su questo fatto: il generatore sbagliato funziona perfettamente nella regione dove la probabilità è grande e sbaglia solo sulle code, dove la probabilità e piccola. Può quindi passare alla grande tutti i test che sono sensibili al grosso della distribuzione di probabilità , ma fallire nella maniera più completa se viene usato per generare eventi rari. La bontà del generatore dipende in maniera cruciale dal l'uso che ne viene fatto.

- Consideriamo in ultimo il caso in cui chiediamo che

$$P(R) = \frac{R^n e^{-R}}{n!} \ , \quad \text{con} \ \ 0 < R < \infty \ . \tag{5.183}$$

Qui abbiamo bisogno di $n + 1$ numeri pseudo-casuali indipendenti distribuiti uniformemente, e

$$R = -\sum_{i=1}^{n+1} \log (\rho_i) \ . \tag{5.184}$$

- Vettori distribuiti uniformemente sulla sfera unitaria a N dimensioni si ottengono estraendo con una distribuzione gaussiana le N componenti e normalizzando a 1 il risultato. Infatti la distribuzione di probabilità proporzionale

$$\exp\left(-\sum_{i=,N} x_i^2\right) = \prod i =, N \left(\exp\left(-x_i^2\right)\right) \tag{5.185}$$

si fattorizza nel prodotto di N distribuzioni di probabilità indipendenti (una per ciascuna variabile) ed è invariante per rotazioni. Come notato da Maxwell questa tipo distribuzione di probabilità è l'unica distribuzione di probabilità che è contemporaneamente fattorizzata e invariante per rotazioni.

5.10 La definizione della mediana

Data una distribuzione di probabilità $P(x)$ la mediana m è quel valore di x tale che $\int_{-\infty}^{m} P(x) = \int_{m}^{\infty} P(x) = 1/2$. Dato un insieme di valori, la mediana m e quel numero, tale che il numero di valori inferiori o uguali a m è uguale a al numero di valori superiori o uguali a m.

la definizione precedente può essere vuota o ambigua. Vediamo due casi

1. Se la distribuzione di probabilità è $P(x) = .7\delta(x) + .3\delta(x-1)$ nessun numero soddisfa la definizione precedente. Infatti $\int_{m}^{\infty} P(x)$ salta in maniera discontinua da .7 a .3 quando m passa da un valore minore ad un valore maggiore di zero.

2. Se la distribuzione di probabilità è $P(x) = .5\delta(x) + .5\delta(x-1)$ tutti i numeri compresi tra 0 e 1 soddisfano la definizione precedente.

Una definizione più precisa consiste nel considerare la seguente funzione:

$$A(y) = \int dx P(x)|x-y| \tag{5.186}$$

e di considerare il minimo assoluto della funzione $A(y)$. Si noti infatti che se la funzione $A(y)$ è differenziabile, la sua derivata è data da

$$A'(y) \equiv \frac{dA}{dy} = \int_{-\infty}^{y} P(x) - \int_{y}^{\infty} P(x) \tag{5.187}$$

e la condizione che $A'(y) = 0$ coincide con la precedente definizione della mediana. Ovviamente, se la funzione $P(x)$ contiene funzioni delta, la derivata di A può non esistere, ma la condizione di minimo è ben definita (una funzione continua che va a più infinito ad infinito deve pur avere un minimo). Quindi nel primo caso la mediana e zero, come si può verificare facilmente.

Tuttavia è possibile che la funzione $A(y)$ non ha un minimo globale isolato: infatti nel secondo caso la funzione $A(y)$ è costante nell'intervallo $[0-1]$. E' facile dimostrare che l'insieme dei minimi globali della funzione $A(y)$ deve essere un intervallo e in questo caso l'ambiguità si risolve definendo la mediana come il baricentro di detto intervallo. Nel secondo caso la mediana risulta essere $1/2$.

Questa definizione della mediana può estendersi anche al caso a più dimensioni, definendola come il minimo della funzione

$$A(y) = \int d^D x P(x)|x-y|, \tag{5.188}$$

dove X e y sono vettori D dimensionali.

È interessante notare che la media usuale può essere definita come il punto di minimo della funzione

$$A_2(y) = \int dx P(x)|x-y|^2. \tag{5.189}$$

Possiamo quindi generalizzare la definizione di media introducendo una media di ordine k come il minimo di

$$A_k(y) = \int dx P(x)|x-y|^k. \tag{5.190}$$

Per $k = 1$ ritroviamo la mediana e per $k = 2$ la media.

Chapter 6

Cammini Aleatori

6.1 Cammini Aleatori in un Mezzo Omogeneo

6.1.1 Il Caso Reticolare

Consideriamo una particella che può muoversi su un reticolo ipercubico in D dimensioni[1]. Supponiamo che, ad ogni istante di tempo (che consideriamo qui, per ora, discreto), la particella si muova casualmente di un passo di lunghezza unitaria in una delle $2D$ possibili direzioni (sono permesse due scelte, quella con verso positivo e quella con verso negativo, per ognuno dei D versori). Assumiamo che ognuna delle $2D$ possibili scelte sia equiprobabile. Vogliamo calcolare la probabilità $P(m, N)$ che dopo N passi la particella si trovi nel sito m (dove m è una D-pla di interi), sapendo che al tempo iniziale la particella è localizzata con certezza nel punto $m = 0$ (cioè $P(m, 0) = \delta_{m,0}$, dove con la delta di Kroneker intendiamo il prodotto delle delta di ciascuna delle coppie di componenti). È facile convincersi che $P(m, N)$ è data da

$$P(m, N) = \frac{\mathcal{C}(m, N)}{(2D)^N} \; , \tag{6.1}$$

dove $\mathcal{C}(m, N)$ è il numero di cammini di N passi che partono dall'origine e arrivano nel punto m. Dopo N passi possiamo infatti aver percorso $(2D)^N$ diversi (dobbiamo scegliere una su $2D$ possibilità al primo passo, ancora una su $2D$ al secondo passo e così via), e ci interessa la probabilità che uno di questi cammini ci abbia portato al sito m.

Per ricavare esplicitamente la funzione $P(m, N)$ dobbiamo fare qualche calcolo in più. Notiamo per cominciate che la probabilità $P(m, N)$ di trovarsi nel punto m dopo N passi soddisfa la relazione di ricorsione:

$$P(m, N+1) = \sum_l J(|m - l|) P(l, N) \; , \tag{6.2}$$

dove la funzione $J(|m - l|)$ vale $\frac{1}{2D}$ se $|m - l| = 1$, cioè se il vettore l individua un sito primo vicino di quello indicato dal vettore m, e 0 altrimenti. Al passo zero la particella è, come abbiamo detto, nell'origine, e cioè

$$P(m, 0) = \delta_{m,0} \; . \tag{6.3}$$

[1] I punti di un reticolo ipercubico in uno spazio D-dimensionale sono individuati da un vettore formato da D componenti a valore intero. In dimensione $D = 2$ si ha un reticolo quadrato, in $D = 3$ un reticolo cubico.

È conveniente introdurre la trasformata di Fourier $\tilde{P}(q, N)$, che è data da

$$\tilde{P}(q, N) = \sum_m e^{iq\cdot m} P(m, N) \ . \tag{6.4}$$

La particella nello spazio delle coordinate vive su un reticolo: la trasformata di Fourier è quindi una funzione periodica con periodo 2π, ed è univocamente fissata dai suoi valori nella prima zona di Brillouin, ovvero per un reticolo cubico

$$-\pi < q_\alpha \leq \pi \quad \text{per} \quad \alpha = 1, \ldots, D \ . \tag{6.5}$$

La trasformata inversa (3.5.3) è data da

$$P(m, N) = \frac{1}{(2\pi)^D} \int_B d^D q \ e^{-iq\cdot m} \tilde{P}(q, N) \ , \tag{6.6}$$

dove l'integrale è fatto solo sulla prima zona di Brillouin. Possiamo ora portare nello spazio di Fourier la relazione ricorsiva che abbiamo scritto prima utilizzando una procedura di convoluzione (si veda (3.68)). Trasformiamo con Fourier la (6.2), trovando

$$\sum_l e^{iq\cdot l} P(l, N+1) = \sum_l e^{iq\cdot l} \sum_m J(|m-l|) P(m, N) \ . \tag{6.7}$$

La somma su l dà

$$\sum_l e^{iq\cdot l} J(|m-l|) = \frac{e^{iq\cdot l}}{D} \sum_{\alpha=1}^{D} cos\,(q_\alpha) \ . \tag{6.8}$$

Si ottiene quindi che

$$\tilde{P}(q, N+1) = \tilde{J}(q) \tilde{P}(q, N) \ , \tag{6.9}$$

dove

$$\tilde{J}(q) = \frac{1}{D} \sum_{\alpha=1}^{D} \cos(q_\alpha) \ . \tag{6.10}$$

Utilizzando la condizione al contorno $\tilde{P}(q, 0) = 1$ si ha che

$$\tilde{P}(q, N) = \tilde{J}(q)^N \ . \tag{6.11}$$

Questa relazione consente di ricavare la (6.1), e può consentire di renderne il senso più esplicito. Ad ogni passo corrisponde un'applicazione di $\tilde{J}(q)$, che dà $2D$ contributi, e costruisce un fase che caratterizza ogni cammino (i cammini chiusi, che ritornano al punto iniziale, hanno una fase 1). Il lettore interessato può verificare esplicitamente che utilizzando la formula multinomiale per calcolare $J(q)^N$ si ottiene la relazione scritta all'inizio della sezione tra $P(m, N)$ e $\mathcal{C}(m, N)$ (un suggerimento: aiuta utilizzare il fatto che $(2\pi)^{-D} \int_B dq \exp(-iq \cdot m) = \delta_{m,0}$).

Ci interessa ora stimare il comportamento della funzione $P(m, N)$ per valori di N grandi, cioè nel caso in cui si siano già fatti molti passi. La funzione $\tilde{J}(q)$ è una somma di coseni, ed è quindi uguale a 1 in modulo solo nei punti $q = (0, 0, \ldots, 0)$ e $q = (\pi, \pi, \ldots, \pi)$. Per $N \to \infty$ questi due punti daranno il contributo dominante (il prodotto di tanti fattori minori di 1 darà un contributo infinitesimo).

Cominciamo valutando il contributo dato a $P(m,N)$ dalla regione di integrazione con tutti i q_α vicini a zero. Espandendo il coseno in potenze di q abbiamo che in questa regione

$$P(m,N) = \frac{1}{(2\pi)^D}\int_B d^Dq\; e^{-iq\cdot m}\left(\frac{1}{D}\sum_{\alpha=1}^{D}\cos q_\alpha\right)^N \simeq \frac{1}{(2\pi)^{2D}}\int_B d^Dq\; e^{-iq\cdot m}\left(1-\frac{N}{2D}q^2\right)\;, \quad (6.12)$$

e cioè che

$$P(m,N) = \frac{1}{(2\pi)^{2D}}\int_B d^Dq\; e^{-iq\cdot m-\frac{N}{2D}q^2+NO(q^4)} = \left(\frac{D}{2\pi N}\right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{m^2D}{2N}+O\left(\frac{m^4}{N^3}\right)}\;. \quad (6.13)$$

Notiamo che stiamo usando esattamente la tecnica che abbiamo introdotto per dimostrare il teorema del limite centrale (3.2). L'altro contributo asintoticamente non nullo è quello che si ottiene sviluppando intorno al punto $q=(\pi,\pi,\dots,\pi)$: otterremo qui un termine uguale a quello visto prima, moltiplicato però per una fase che dipende dal sito (per un argomento vicino a π il coseno è vicino a -1). In definitiva

$$P(m,N) \propto \left(\frac{D}{2\pi N}\right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{m^2D}{2N}}\left(1+(-1)^{N+\sum_\alpha m_\alpha}\right)\;. \quad (6.14)$$

Il termine aggiuntivo garantisce che se N è pari la probabilità di essere nel sito m è diversa da zero solo per valori pari di $\sum_\alpha m_\alpha$, mentre se N è dispari la probabilità è diversa da zero solo per valori dispari di $\sum_\alpha m_\alpha$. Il termine aggiuntivo diventa sostanzialmente trascurabile (e viene spesso eliminato a priori) non appena ci occupiamo di domande concernenti ad esempio il valore della probabilità mediata su una regione spaziale grande, cioè su una regione delle m grande. Si noti infatti che

$$\sum_m (-1)^{\sum_\alpha m_\alpha} f\left(\frac{m}{L}\right) \quad (6.15)$$

va a zero esponenzialmente con L (è di ordine $\exp(-\lambda L)$, dove λ è una costante opportuna) se f è una funzione analitica.

È interessante notare che per valori piccoli di N la distribuzione di probabilità non è isotropa. Ad esempio in due dimensioni la probabilità di andare in 5 passi dall'origine al punto $(0,5)$ è 4^{-5} ed è diversa dalla probabilità di andare in 5 passi al punto $(4,3)$, che è nulla. Tuttavia per grandi valori di N, nella regione dove la probabilità è concentrata, ovvero per $x=O(N^{\frac{1}{2}})$, i termini non invarianti per rotazione vanno a zero come $\frac{1}{N}$. Risultati simili si possono ottenere anche per cammini aleatori definiti su altri tipi di reticoli, oppure sul continuo, come vedremo nella sezione successiva. Notiamo che le oscillazioni di periodo due sono caratteristiche di alcuni reticoli, per esempio nel caso di reticoli triangolari queste oscillazioni sono assenti.

Prima di far questo vediamo che cosa succede nella regione delle grandi deviazioni. Ci domandiamo quale è la probabilità di avere un media dopo N passi uguale a λ_α per ciascuna delle D direzioni.

Procedendo come nel caso dimensionale dobbiamo risolvere il sistema di equazioni di punto di sella

$$\frac{\mathrm{sh}(q_\alpha)}{\sum_{\gamma=1,d}\mathrm{ch}(q_\gamma)} = \lambda_\alpha \quad (6.16)$$

equazioni che hanno soluzioni (che indichiamo con $q(\lambda)$ solo quando

$$\sum_{\alpha=1,d} |\lambda_\alpha| \leq 1 \tag{6.17}$$

in accordo con il fatto che dopo N passi dobbiamo avere

$$\sum_{\alpha=1,d} |x_\alpha| \leq N \ . \tag{6.18}$$

La probabilità che la media sia λ è data da

$$\exp(-NS(\lambda)) \ , \tag{6.19}$$

dove

$$S(\lambda) = \ln\left(d^{-1} \sum_{\alpha=1,d} \mathrm{ch}(q(\lambda)_\alpha) - \sum_{\alpha=1,d} q_(\lambda)\alpha\lambda_\alpha\right) \ . \tag{6.20}$$

L'osservazione interessante è che la funzione $S(\lambda)$ non è in generale invariante per rotazioni, lo ridiventa solo per λ piccolo.

6.1.2 Il Caso Continuo

Nel caso di cammini definiti su uno spazio continuo diciamo $J(x)$ la probabilità di percorrere la distanza x in un passo. Supponendo che al tempo zero la particella sia localizzata nell'origine, argomenti simili ai precedenti ci fanno concludere che

$$\begin{aligned} P(x,N) &= \frac{1}{(2\pi)^D}\int d^Dq \ e^{-iq\cdot x}\tilde{J}(q)^N \ , \\ \tilde{J}(q) &= \int d^Dx \ e^{iq\cdot x} J(x) \ . \end{aligned} \tag{6.21}$$

Se la distribuzione $J(x)$ è isotropa almeno in modo approssimato, ovvero

$$\begin{aligned} \int d^Dx \ J(x) \ x_\alpha &= 0 \ , \\ \int d^Dx \ J(x) \ x_\alpha x_\beta &= \nu \ \delta_{\alpha,\beta} \ , \end{aligned} \tag{6.22}$$

si trova che per piccoli q la funzione $\tilde{J}(q)$ è data da

$$\tilde{J}(q) = 1 - \frac{\nu}{2}q^2 + O(q^3) \ . \tag{6.23}$$

Esattamente come nel caso precedente si ottiene che per grandi N

$$\begin{aligned} P(x,N) &= \frac{1}{(2\pi)^D}\int d^Dq \ e^{-iq\cdot x - \frac{N\nu}{2}q^2 + O(q^3)} \\ &= \left(\frac{\nu}{2\pi N}\right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{\nu x^2}{2N} + O\left(\frac{x^3}{N^2}\right)} \ . \end{aligned} \tag{6.24}$$

6.2 Cammini Aleatori in Mezzi non Omogenei

Consideriamo adesso un problema più complicato, in cui la probabilità di andare dal punto m al punto $l+m$ dipende da m, e viene indicata come $J(m,l)$ (nel caso precedente questa probabilità dipendeva solo dal modulo della differenza m tra il punto iniziale e il punto finale). Ovviamente si dovrà avere che

$$\sum_l J(m,l) = 1 \ , \tag{6.25}$$

dato che con probabilità 1 la particella va in uno dei siti permessi. La relazione ricorsiva (6.2) diventa qui

$$P(m, N+1) = \sum_l J(m,l) P(m-l, N) \ , \tag{6.26}$$

cioè la somma dei termini in cui si è andati in N passi al sito $m-l$ e poi, nell'ultimo passo, si va da l ad m.

Definiamo ora due quantità che saranno importanti nel seguito, quando studieremo la struttura delle probabilità di transizione per un numero di passi, N, grande:

$$\begin{aligned} c_\alpha(m) &\equiv \sum_l J(m,l) l_\alpha \ , \\ \nu_{\alpha,\beta}(m) &\equiv \frac{1}{2}\left[\sum_l J(m,l) l_\alpha l_\beta - c_\alpha(m) c_\beta(m)\right] \ . \end{aligned} \tag{6.27}$$

Le quantità $c_\alpha(m)$ e $\nu_{\alpha,\beta}(m)$ hanno il significato fisico di una *velocità media* e di una *costante di diffusione*. Se indichiamo il valore aspettato della funzione $f(m)$ calcolato rispetto alla distribuzione di probabilità $P(m,N)$ con

$$\langle f(m) \rangle_N \equiv \sum_m f(m) P(m,N) \ , \tag{6.28}$$

è facile vedere che se la probabilità è concentrata in una regione dove $c_\alpha(m)$ e $\nu_{\alpha,\beta}(m)$ sono costanti, e cioè dove non dipendono da m e vengono dette rispettivamente c_α e $\nu_{\alpha,\beta}$, si ha che

$$\begin{aligned} \langle m_\alpha \rangle_N &= N c_\alpha \ , \\ \langle (m_\alpha - \langle m_\alpha \rangle_N)(m_\beta - \langle m_\beta \rangle_N) \rangle_N &= N \nu_{\alpha,\beta} \ . \end{aligned} \tag{6.29}$$

Ci interessa studiare il comportamento della funzione $P(m,N)$ per valori grandi del numero di passi N e della distanza raggiunta m. I risultati della sezione (6.1.1) (si veda ad esempio la relazione (6.14)) mostrano che la regione di interesse è quella in cui m^2 è di ordine $O(N)$: analizzeremo quindi il comportamento della $P(m,N)$ in questa regione. Allo scopo di formalizzare questo limite conviene introdurre un parametro a, che verrà mandato a zero quando N tende ad infinito. Più precisamente poniamo

$$x \equiv am \ , \quad t \equiv a^2 N \tag{6.30}$$

e studiamo il limite per $a \to 0$ della probabilità $P(x,t)$ definita come

$$P_{(a)}(x,t) = \lim_{a\to 0} \frac{1}{a^D} P\left(\frac{x}{a}, \frac{t}{a^2}\right) \ , \tag{6.31}$$

dove è interessante notare che il fattore a^{-D} è essenziale per preservare la corretta normalizzazione della probabilità: $\int d^D x \ P_{(a)}(x,t) = 1$.

Supponiamo inoltre che la funzione $J(m,l)$ dipenda debolmente da m, in modo tale che

$$J_a(\frac{x}{a}, l) \equiv J(x,l) \ , \tag{6.32}$$

risulti una funzione che ha un limite ben definito per a che tende a zero. Richiedere che in questo limite la probabilità sia ben definita e che la velocità media in unità di t e x sia data da $\frac{c_\alpha(x)}{a}$ implica che c_α sia dell'ordine di a. Definiamo quindi la grandezza

$$v_\alpha(x) \equiv \frac{c_\alpha(x)}{a} \ . \tag{6.33}$$

Per semplicità di trattazione assumeremo inoltre che il coefficiente di diffusione abbia un limite finito per a che tende a zero, sia isotropo ed indipendente da x. Definiamo quindi

$$\nu_{\alpha,\beta}(x) \equiv \nu \delta_{\alpha,\beta} \ . \tag{6.34}$$

Per determinare le equazioni di evoluzione nel limite di a piccoli è utile trasformare le equazioni ricorsive (6.2) dalla forma a differenze finite ad una forma differenziale. Con la nostra nuova notazione abbiamo che

$$P_{(a)}(x, t+a^2) = \sum_m J_{(a)}(x-la, l) P_{(a)}(x-la, t) \ . \tag{6.35}$$

Sviluppando in serie di potenze in a troviamo che

$$P_{(a)}(x,t) + a^2 \frac{\partial P_{(a)}(x,t)}{\partial t} = \sum_l \left(\left(J_{(a)}(x,l) - a l_\alpha \frac{\partial J_{(a)}(x,l)}{\partial x_\alpha} \right) \right. \tag{6.36}$$

$$\left. \left(P_{(a)}(x,t) - a l_\alpha \frac{\partial P_{(a)}(x,t)}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{2} a^2 l_\alpha l_\beta \frac{\partial P_{(a)}(x,t)}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \right) \right) + O(a^3) \ . \tag{6.37}$$

Trascurando i termini di ordine superiore ed utilizzando il fatto che $\sum_l J(m,l) l_\alpha$ è di ordine a, si ottiene la cosiddetta *equazione di Fokker-Planck*:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(v_\alpha(x) P(x,t) \right) + \nu \Delta P(x,t) \ . \tag{6.38}$$

Nel limite in cui la diffusione è trascurabile ($\nu = 0$) si ottiene l'equazione usuale per il moto deterministico di particelle in un campo di velocità, ovvero

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(v_\alpha(x) P(x,t) \right) \ . \tag{6.39}$$

Il termine di diffusione $\nu \Delta P(x,t)$ è connesso al carattere casuale del cammino aleatorio. È interessante notare che l'equazione di Fokker-Planck può essere riscritta come

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\hat{v}_\alpha(x,t)P(x,t)\right) \ , \tag{6.40}$$

dove

$$\hat{v}(x,t) \equiv v - \nu \ \mathrm{grad} \log\left(P(x,t)\right) \ . \tag{6.41}$$

Nel contesto appropriato il nuovo termine può essere interpretato come il contributo di una *pressione osmotica*. In un gas perfetto la pressione è proporzionale alla densità (nel nostro caso il termine P) moltiplicata per la temperatura. In un flusso diffusivo può essere definita una pressione utilizzando questa proporzionalità: ad esempio la pressione prodotta da una sostanza dissolta in acqua è connessa ad un termin di densità.

6.3 Cammini Aleatori con Trappole

Consideriamo una variante sul tema. Il nostri viaggiatore si muove a caso in un mezzo isotropo e in ogni punto è definita una probabilità $w(i)$ di interrompere il viaggio (del tipo trappola da cacciatori o porta sull'iperspazio per tornare a casa). Nel caso più semplice avremo che

$$P(m, N+1) = (1 - w(m)) \sum_l J(|m-l|)P(l, N) \ , \tag{6.42}$$

Ovviamente in questo caso la probabilità totale ($P(N) = \sum_m P(m,N)$) può diminuire con il tempo.

Se in qualche punto mettiamo delle condizioni assorbenti (ovvero dei punti con $w = 1$) la probabilità totale è la probabilità di non passare per quei punti.

È interessante notare che se facciamo il limite per a che tende a zero mettendo $w(i) = a^2 V(x)$ (essendo $x = ai$ come nel caso precedente otteniamo al posto dell'abituale equazione di Fokker Plank (con $v = 0$) l'equazione

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -V(x)P(x,t) + \nu \Delta P(x,t) \ . \tag{6.43}$$

che è l'equazione di Schroedinger a tempi immaginari.

Per tempi molto grandi la probabilità di sopravvivenza, ovvero la probabilità totale è proporzionale a $\exp(-tE_0)$ dove E_0 è l'energia dello stato fondamentale dell'equazione di Schroedinger. Per esempio esempio nel caso unidimensionale la probabilità che un cammino che parte dall'origine rimanga sempre nell'intervallo $-[-L/2 : L/2]$ è data da

$$\exp(-\frac{\nu t \pi^2}{L^2}) \tag{6.44}$$

dove $\frac{\nu\pi^2}{L^2}$ è l'energia dello stato fondamentale dell'equazione ci Schrödinger in una buca infinita di potenziale (condizioni al contorno nulle).

6.4 Soluzione dell'Equazione di Fokker-Planck

In generale lo studio delle soluzioni dell'equazione di Fokker-Planck è molto complicato. Considereremo qui il caso più semplice, in cui la velocità v è l'opposto del gradiente di un potenziale.

Fisicamente questa situazione è realizzata quando si considera moto di particelle microscopiche soggette ad un potenziale esterno in un fluido viscoso. In questo caso il contributo casuale alle equazioni del moto è dovuto al *moto Browniano*. Definiamo quindi la velocità v_α come

$$v_\alpha = -\frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\alpha} \,. \tag{6.45}$$

In assenza di diffusione il moto della particella risulta in questo caso diretto verso il minimo (o uno dei minimi) del potenziale. In queste condizioni anche in presenza di diffusione l'equazione di Fokker-Planck si semplifica enormemente. Infatti è facile vedere che

$$p_0(x) = \frac{\exp\left(-\frac{V(x)}{\nu}\right)}{Z} \,, \tag{6.46}$$

è una soluzione stazionaria (indipendente del tempo) dell'equazione di Fokker-Planck. Infatti

$$v_\alpha p_0(x) - \nu \partial p_0(x)/\partial x_\alpha = 0. \tag{6.47}$$

Se esiste un scelta della quantità Z tale che $\int dx p_0(x) = 1$ [2] , si può dimostrare che $p_0(x)$ è la sola soluzione indipendente dal tempo e che per qualunque condizione iniziale[3] si ha che

$$\lim_{t\to\infty} p(x,t) = p_0(x). \tag{6.48}$$

Nel seguito supporremo per semplicità che il potenziale $V(x)$ va ad infinito quando x va ad infinito e ciò avviene in maniera sufficientemente rapida.

L'idea di base della dimostrazione consiste nel trasformare l'equazione di Fokker Plank nella forma $\partial\rho/\partial t = -H\rho$, dove H è un operatore autoaggiunto. Questo scopo può essere raggiunto ponendo

$$p(x,t) = p_0(x)^{1/2}\rho(x,t). \tag{6.49}$$

Dei semplici ma noiosi calcoli mostrano che ρ soddisfa l'equazione

$$\partial\rho/\partial t = \nu\Delta\rho - U(x)\rho \tag{6.50}$$

dove

$$U(x) = \nu/4\sum_\alpha(\partial V/\partial x_\alpha)^2 - 1/2\Delta V. \tag{6.51}$$

l'operatore H risulta essere l'operatore di Schroedinger corrispondente al potenziale $U(x)$ ($H = -\Delta + U(x)$). Se V va velocemente ad infinito, anche U va velocemente ad infinito e l'equazione di Schroedinger ha uno spettro puramente discreto.

È facile verificare che $p_0(x)^{1/2}$ è un autovalore normalizzabile (se Z è finita) dell'Hamiltoniana H con autovalore nullo ($Hp_0(x)^{1/2} = 0$). La funzione $p_0(x)^{1/2}$ è reale e positiva e l'Hamiltoniana è H reale; un teorema noto (conseguenza della formulazione variazionale) afferma che la funzione d'onda dello stato fondamentale deve essere positiva. Dato che non possono esistere due funzioni d'onda ortogonali positive, $p_0(x)^{1/2}$ deve essere lo stato fondamentale. Se indichiamo con λ_n e con $\psi_n(x)$ gli autovalori e le autofunzioni dell'operatore H, otteniamo che $\rho(x,t)$ può scriversi come

[2] In tal caso $Z = \int dx \exp(-V(x)/\nu)$.

[3] Non consideriamo il caso di potenziali singolari.

$$\rho(x,t) = \sum_n c_n \exp(-t\lambda_n)\psi_n(x),$$
$$c_n = \int dx \rho(x,0)\psi_n(x). \tag{6.52}$$

Nel limite in cui t tende ad infinito otteniamo che

$$\rho(x,t) = \psi_0(x) + O(\exp(-\lambda_1 t)). \tag{6.53}$$

La probabilità $p(x,t)$ per grandi tempi tende a $\psi_0(x)^2$, con correzioni che vanno a zero come $\exp(-\lambda t)$S.

6.5 L'equazione di Langevin

Lo scopo di questa sezione è di scrivere una legge di evoluzione direttamente per la $x(t)$, dove x effettua un moto Browniano in un mezzo anisotropo. Supponiamo che al tempo t_0 la particella stia al punto x_0, vogliamo calcolare la probabilità di trovare la particella al punto $x_0 + \delta x$ al tempo $t_0 + \delta t$, con δx e δt piccoli. Nel limite in cui δt tende a zero possiamo trascurare la dipendenza di v da x e porre $v(x) \propto v(x_0) = v_0$. L'equazione di Fokker Plank diventa in questo caso:

$$\partial P/\partial t = \nu \Delta P - v_0 \cdot \mathrm{grad} P, \tag{6.54}$$

la cui soluzione (con condizione iniziale $P(x,t_0) = \delta(x - x_0)$ è data da

$$P(x_0 + \delta x, t_0 + \delta t) = cost/(\delta t)^{-D/2} \exp(-(\delta x - v\delta t)^2/(2\nu\delta t)). \tag{6.55}$$

In altri termini la variabile δx è distribuita in maniera gaussiana, con varianza $(2\nu\delta t)^{1/2}$ e media $v = \delta t$.

Possiamo scrivere che

$$\delta x = v(x)\delta t + \nu^{1/2}\delta W \tag{6.56}$$

dove δW è una variabile gaussiana con varianza $(2\delta t)^{1/2}$. L'equazione precedente è chiamata equazione di Langevin e descrive il moto di una particella che diffonde un un campo di velocità. Formalmente nel limite $\delta t \to 0$ possiamo scrivere

$$dx/dt = v(x) + \nu^{1/2} dW/dt = v(x) + \nu^{1/2} b(t), \tag{6.57}$$

dove la funzione $b(t)$ è distribuita gaussianamente, con valor medio 0 e con covarianza:

$$\langle b(t_1) b(t_2) \rangle = 2\delta(t_1 - t_2). \tag{6.58}$$

Si può verificare facilmente che

$$\delta W(t_0) = \int_{t_0}^{t_0+\delta t} b(\tau) d\tau \tag{6.59}$$

ha varianza $(2\delta t)^{1/2}$. Inoltre i δW a tempi diversi sono scorrelati (infatti $\langle \delta W(t_0) \delta W(t_1) \rangle = 0$ per $|t_0 - t_1| \rangle \delta t$), l'equazione di Langevin descrive correttamente il moto di particelle di piccolo raggio in un viscoso in presenza di forze esterne. In tal caso dobbiamo porre $v(x) = AF(x)$ dove F è la forza esterna e A è una costante che dipende dalla raggio delle particelle e dalla viscosità del mezzo. Nel caso che il mezzo viscoso sia a temperatura T, e la forza F sia il gradiente di un potenziale $V(x)$, la distribuzione di probabilità stazionaria deve essere $\exp(-V(x)/kT)$ e ciò è possibile solo se

$$\nu = AkT. \tag{6.60}$$

Avremo quindi che in un tempo t la particella in assenza di forza esterna farà una distanza x con

$$\langle x^2 \rangle = \mathcal{D}t, \quad \mathcal{D} = AkT. \tag{6.61}$$

Questa relazione fra la risposta della particella ad una forza esterna (e quindi con la viscosità (A) del mezzo) e la costante di diffusione del moto Browniano è uno dei più brillanti risultati di Einstein e permette di misurare la costante di Boltzmann mediante osservazione su corpi macroscopici.

L'equazione 6.57 è puramente formale in quanto non esiste nessuna funzione degna di questo nome che abbia le proprietà richieste: $\langle \eta(0)^2 \rangle = \infty$ e $\eta(t)$ dovrebbe essere sempre infinita. Inoltre δx è di ordine $t^{1/2}$ e $x(t)$ non è una funzione differenziabile[4]. Una trattazione matematicamente consistente può essere ottenuta considerando δt finito ed effettuando il limite $\delta t \to 0$ solo alla fine. È anche possibile regolarizzare la funzione δ, scrivendo:

$$\langle \eta(t_1)\eta(t_2) \rangle = \exp(-(t_1 - t_2)^2/2\epsilon)/(2\pi\epsilon)^{1/2} \tag{6.62}$$

e mandando successivamente ϵ a zero. Una discussione dettagliata di questo problema ci porterebbe a studiare il calcolo differenziale stocastico, ma questo va al di là dei limiti del nostro corso.

[4]Tecnicamente la funzione $x(t)$ è di Holder di ordine $1/2$.

Chapter 7

Reazioni a Catena e Funzioni Generatrici

7.1 Definizione del problema

Supponiamo di considerare un sistema definito per valori del tempo k discreto, il cui stato interno può essere caratterizzato da un numero $n(k)$, che spesso indica il numero di elementi che il sistema possiede al tempo k. Supponiamo che in una unità di tempo ciascuno degli elementi del sistema possa trasmutarsi in m elementi, con una probabilità fissa $P(m)$. Il numero totale di elementi al tempo $n+1$ sarà dato da

$$n(k+1) = \sum_{i=1,n(k)} m(i) \ , \tag{7.1}$$

dove ciascun $m(i)$ è estratto indipendentemente con la probabilità P.

Due esempi semplici:

- La quantità $n(k)$ rappresenta il numero di neutroni in un materiale fissile. Dopo un'unità di tempo, ciascun neutrone può aver prodotto a causa di collisioni m neutroni (lui compreso) con probabilità $P(m)$. I neutrone può anche essere assorbito, senza produrre neutroni oppure può perdersi nello spazio esterno. Entrambi gli eventi contribuiscono a $P(0)$.

- La quantità $n(k)$ rappresenta il numero di coppie di conigli (o il numero di amebe) e $P(m)$ è la probabiltà che una coppia di conigli generi m coppie di conigli (oppure un ameba generi m amebe) in una generazione. Rispetto al mondo reale stiamo facendo varie approssimazioni: i conigli nascono a coppie di sesso differente (il che non è sempre vero), tutte le coppie di conigli partoriscono simultaneamente, non ci sono effetti dovuti all'età dei conigli, non ci sono fattori limitanti legati al numero totale di conigli. Nonostante tutte queste approssimazioni questo tipo di modello può essere considerato un'approssimazione ragionevole per catturare il comportamento qualitativo del sistema.

Supponiamo per semplicità si partire dalla situazione in cui $n(0) = 1$. Chiamiamo $P^k(n)$ la probabilità di avere n elementi al tempo k. Vogliamo calcolare la $P^k(n)$ e in particolare siamo interessati al comportamento di $E^k = P^k(0)$, che rappresenta la probabilità di estinzione ovvero al comportamento di $S^k = 1 - E^k$. Infatti se a un dato momento $n(k) = 0$, n rimarrà uguale a zero anche nel futuro.

Ci sono tre casi possibili, come dimostreremo in seguito

- La quantità S^k tende a zero molto velocemente (più esattamente esponenzialmente). In quest caso la reazione è detta sottocritica.

- La quantità S^k tende a un valore positivo diverso da zero; S^k non è identicamente uguale a 1 in questo caso sopracritico in cui il numero medio di particelle cresce esponenzialmente in quanto c'e sempre la possibilità che la reazione si sia estinta durante i primi passi. Il tasso di estinzione $T^k = E^k - E^{k-1} =$ tende a zero esponenzialmente. Solo in questa situazione la reazione a catena si può autosostenere una volt innescata. E' evidente che a causa della crescita esponenziale, in breve tempo n diventerà estremamente grande e le assunzioni sull'assenza di fattori autolimitanti non sarà più vera.

- La quantità S^k tende a zero, ma piu' lentamente di un esponenziale (più precisamente come k^{-2}. Questa situazione è detta critica e nello spazio dei parametri separa il caso sottocritico dal caso sopracritico

7.2 Prova del teorema fondamentale

Per provare il teorema annunciato nella sezione precedente dobbiamo ottenere un'espressione esatta per la probabilità di avere n oggetti al tempo k. Se supponiamo al tempo zero di avere un solo oggetto otteniamo che la funzione generatrice al tempo 1 è data da $P(s)$. Il teorema della probabilità composta (vedi appendice) ci assicura che al tempo 2

$$P^2(s) = P(P(s)) \tag{7.2}$$

e più in generale avremo la formula di ricorsione

$$P^k(s) = P(P^{k-1}(s)) = P^{k-1}(P(s)) \tag{7.3}$$

La formula di ricorsione ci assicura che

$$\begin{aligned} P^k(1) &= 1 \\ \left.\frac{dP^k(1)}{ds}\right|_{s=1} &= \mu^k \end{aligned} \tag{7.4}$$

dove

$$\left.\frac{dP(1)}{ds}\right|_{s=1} = \mu \tag{7.5}$$

La prima delle equazioni 7.4 ci assicura che la probabilità è ben normalizzata, mentre la seconda equazione ci dice che il valor medio di n al tempo k è dato da

$$\langle n \rangle_k = \mu^k \tag{7.6}$$

A questo punto è facile intuire, come dimostreremo fra poco che il caso sottocritico, critico e sopracritico corrispondono rispettivamente ai casi dove μ è rispettivamente minore, uguale o maggiore di 1.

Infatti dato che

$$\langle n \rangle_k = \sum_{n=0,\infty} P^k(n)n \geq \sum_{n=1,\infty} P^k(n) = S^k \tag{7.7}$$

ne consegue che per $\mu < 1$ S^k va esponenzialmente a zero.

In generale possiamo proceder in maniera sistematica. osserviamo in maniera preliminare che

- La quantità $P^k(0)$ e uguale a $E^k = 1 - S^k$.

- Le quantità E^k formano una successione monotona crescente (l'estinzione è irreversibile) limitata superiormente da uno e quindi esiste necessariamente un limite E per queste quantità quando $k \to \infty$.

- La relazione di ricorrenza implica che $P^k(0) = E^k = P(E^{k-1})$.

Mettendo tutto insieme troviamo che E deve soddisfare la seguente equazione

$$E = P(E) \tag{7.8}$$

Se l'equazione ha una soluzione unica nell'intervallo $[0:1]$ abbiamo trovato il valore di E, altrimenti dobbiamo riflettere.

A questo punto notiamo che la funzione $P(s)$ è una funzione convessa per s non negativo. Infatti

$$\frac{d^2P}{ds^2} = \sum_{m=2,\infty} m(m-1)s^{m-2}p(m) \geq 0 \tag{7.9}$$

. Una funzione convessa fra le altre cose soddisfa le seguenti proprietà:

- E' sempre più grande della tangente in un suo punto

- Una retta può intersecare una curva convessa al massimo in due soli punti.

Dato che $P(1) = 1$, è evidente che $E = 1$ e una soluzione dell'equazione 7.8. Dobbiamo limitarci a vedere se ce ne sono altre (al massimo ce ne potrà essere una). Se $P'(1) = \mu < 1$ la curva $y = P(x)$ sta più in alto della sua tangente in 1, ovvero la linea $y = \mu(x-1)+1$ e quindi non può avere intersezioni per $0 \leq x < 1$ con la retta $x = y$.

Lo stesso è vero per $\mu = 1$ (stiamo escludendo il caso banale dove $P(s) = s$). Al contrario per $\mu > 1$ otteniamo che $p(x) < x$ per x lievemente più piccolo di 1 mentre per $x = 0$ se escludiamo il caso banale $P(0) = 0$ abbiamo che $p(x) > x$ per x vicino a zero. Per continuità l'equazione $P(x) = x$ deve avere una soluzione nell'intervallo aperto $[0:1]$. Chiamiamo x^* questa soluzione. Dato che la funzione $P(x)$ è crescente, $P(0) < P(x^*)$ e quindi avremo che $E^1 < P(x^*) = x^*$. Lo stesso ragionamento implica che anche $E^2 < x^*$. In breve tutti gli E^k sono strettamente minori di $x^* < 1$, quindi il loro limite per $k \to \infty$ deve essere x^*, e non può essere 1.

Rimane da risolvere il problema di come il limite è raggiunto. Chiamiamo x_∞ la soluzione dell'equazione $x = P(x)$ alla quale la successione E^k tende. Per k grande la differenza $E^k - x_\infty = \delta(k)$ sarà piccola. Possiamo quindi sviluppare in potenza di δ. se ci fermiamo al primo ordine otteniamo

$$\delta(k+1) = A\delta(k) + O(\delta^2) \tag{7.10}$$

dove

$$A = \left.\frac{P(x)}{dx}\right|_{x=x_\infty} \tag{7.11}$$

In entrambi i casi non critici $A < 1$ (nel caso sotto critico $A < 1$ per costruzione, nel caso sopracritico le equazioni precedenti implicano che $A < 1$ e quindi l'avvicinamento al limite asintotico avviene esponenzialmente. L'unico caso delicato è quello critico dove $A = 1$. In questo caso si ottiene che

$$\delta(k+1) = \delta(k) - B\delta(k)^2 + O(\delta(k)^3) \tag{7.12}$$

dove

$$B = \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}|x = 1 = \frac{1}{2}(\langle n^2 \rangle - \langle x \rangle^2) \tag{7.13}$$

dove il valore di aspettazione 'è calcolato rispetto alla distribuzione di probabilità p.

La soluzione asintotica dell'equazione 7.12 è data da

$$\delta(k) = \frac{1}{Bk^2} \tag{7.14}$$

L'interpretazione della formula precedente è chiara. Il valor medio di n è costante e uguale a 1. Tuttavia ci sono fluttuazioni (in quanto B non è zero. Le fluttuazioni producono eventi rari con probabilità certamente molto minore di $\frac{1}{Bk^2}$ con $n >> 1$ e eventi tipici, con probabilità $1 - \frac{1}{Bk^2}$. Uno studio dettagliato del comportamento della distribuzione asintotica in è possibile, ma non verrà fatto.

7.3 Appendici

7.3.1 Funzioni generatrici

La funzione generatrice $F(s)$ associata ad una serie f_n è definita come

$$F(s) = \sum_{n=0,\infty} f_n s^n, \tag{7.15}$$

dove la serie è convergente per s sufficientemente piccolo se (come supporremo sempre) le f_n non crescono più velocemente di un esponenziale in n. Nel caso in cui le f_n siano limitate possiamo mettere $s = \exp(i\theta)$ la funzione generatrice diventa la trasformata di Fourier. Ovviamente la funzione generatrice è definita per $|s| < 1$ anche in quei casi in cui la trasformata di Fourier può aver problemi di convergenza.

Anche nel caso delle funzioni generatrici esiste una formula di inversione.

$$f(k) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{ds}{s} s^{-k} F(s) \tag{7.16}$$

L'integrale è fatto su un cammino che circonda l'origine in senso antiorario e non racchiude nessuna singolarità della funzione $p(s)$. La dimostrazione è una conseguenza immediata del teorema dei residui. Nel caso che stiamo considerando il cammino d'integrazione può essere portato fino al cerchio $|s| = 1$, ritrovando in questo modo la formula d'inversione per la trasformata di Fourier.

Esattamente nello stesso modo che abbiamo visto per le trasformate di Fourier, supponiamo che la quantità x sia data da

$$x = y + z \tag{7.17}$$

dove x, y e z sono numeri interi non negativi, che le quantità y e z siano indipendenti tra di loro e che x, y e z avvengano rispettivamente con probabilità $a(x)$, $b(y)$ and $c(z)$. Se chiamiamo con $A(s)$, $B(s)$ e $C(s)$ le rispettive funzioni generatrici troviamo dopo un semplice conto che

$$A(s) = B(s)C(s)\ . \tag{7.18}$$

7.3.2 Probabilità composte

Il teorema della probabilità composta afferma che se numero x è dato dalla somma di m numeri indipendenti x_i, dove i va da 1 a n,

$$x = \sum_{i=1,m} x_i \ , \tag{7.19}$$

e ciascun numero x_i ha una probabilità $p(x_i)$ di verificarsi e il numero m ha una distribuzione d probabilità $q(m)$, la funzione generatrice $R(s)$ della probabilità $r(x)$ è data da

$$R(s) = Q(P(s)) \ . \tag{7.20}$$

La dimostrazione è facile. Notiamo innanzitutto che dato che l'occorrenza contemporanea di due diversi valori di m è impossibile. La variabile m etichetta quindi un sistema completo di eventi autoescludenti. Possiamo quindi scrivere

$$r(x) = \sum_{m=0,\infty} q(m)p(x|m) \tag{7.21}$$

Possiamo quindi passare alle funzioni generatrici utilizzando il fatto che la funzione generatrice della somma è data dal prodotto delle funzioni generatrici e che la funzione generatrice (rispetto a x) di $p(x|m)$ è data dall'applicazione ripetuta dell'equazione 7.18 ed è quindi uguale a $P(s)^m$. Otteniamo quindi che

$$R(s) = \sum_{m=0,\infty} q(m)P(s)^m = Q(P(s)) \tag{7.22}$$

L'uso delle funzioni generatrici permette quindi di scrivere in maniera molto semplice e compatta il risultato per un problema apparentemente molto complicato.

Chapter 8

Eventi Ricorrenti

8.1 Definizioni

Consideriamo un sistema con un tempo discreto etichettato da un indice n. Supponiamo per semplicità di considerare il caso in cui l'evento può avvenire a un tempo n qualunque ed l'evento è avvenuto al tempo 0. Si dice che l'evento è un evento ricorrente se la probabilità di avvenire al tempo n dipende sono all'ultimo tempo a cui l'evento è avvenuto (sia esso k) e i tempi di tutti gli eventi avvenuti prima di k non hanno importanza per predire il futuro dopo il tempo k.

Gli eventi ricorrenti sono il primo esempio che incontriamo di un processo correlato privo di memoria. Serve conoscere solo l'ultima occorrenza dell'evento per predire il futuro e tutta la storia precedente all'ultimo evento non è importante.

8.1.1 Esempi

Vedi Feller

8.2 Classificazione degli eventi

8.2.1 Eventi periodici e aperiodici

La prima distinzione che dobbiamo fare è tra eventi periodici e aperiodici. Qui il nome inganna; un evento è periodico solo se *può* avvenire a distanze temporali fisse, non (come ci aspetteremmo) se accade a sempre a distanze fisse. Una domenica di sole può avvenire solo a distanze multiple di sette giorni, ma il sole non deve necessariamente essere presente per tutte le domeniche: quest'evento (domenica di sole) si dice periodico (probabilmente un nome più adatto è periodicizzato invece che periodico). Un evento che non ha vincoli precisi è aperiodico.

Un altro esempio di evento ricorrente periodico il seguente: l'evento avviene quando dopo n tiri a pari o dispari il numero di pari usciti nel passato è uguale ai dispari: quest'evento può avvenire solo per n pari. Lo studio di eventi periodici può facilmente ridursi allo studio di eventi non periodici. Se m è il periodo basta considerare gli eventi che si verificano ai temp mk e prendere k come nuovo tempo.

8.2.2 Eventi certi, nulli e transienti

Indichiamo con $p(k)$ la probabilità che l'evento avvenga la tempo k. Se assumiamo che l'evento avviene al tempo zero, avremo che $p(0) = 1$.

Ci sono due possibilità

- le probabilità $p(k)$ va zero cosi velocemente che la somma $\sum_{k=1,N} p(k)$ rimane finito quando N tende ad infinito. In questo caso si parla di eventi transienti in quanto in media accadono un numero finito di volte.

- le probabilità $p(k)$ è tale che $\sum_{k=1,\infty} p(k) = \infty$. In questo caso si parla di eventi ritornanti o certi in quanto accadono un numero infinito di volte.

Possiamo fare tre distinzioni ulteriori nel caso ritornante

- $\lim_{N\to\infty} N^{-1} \sum_{k=1,N} p(k) = 0$. In questo caso l'evento è detto ritornante nullo. Un esempio è dato $p(K) \propto k^{-1/2}$.

- $\lim_{N\to\infty} N^{-1} \sum_{k=1,N} p(k) > 0$. In questo caso l'evento è detto ritornante ergodico. Un esempio di questo caso si verifica se $p(k) \to cost > 0$ quando $k \to \infty$.

- L'ultima possibilità teorica è che $\lim_{N\to\infty} N^{-1} \sum_{i=1,N} p(k)$ non esista, ma dimostreremo più tardi che questa possibilità non si può verificare .

8.3 Relazioni fondamentali

8.3.1 Probabilità di primo ritorno

Un ruolo fondamentale negli eventi ricorrenti è giocato dalla probabilità di primo ritorno, ovvero dall probabilità $f(n)$ che avvenga per la prima volta un evento al tempo $k+n$ se è avvenuto un evento al tempo k. Ovvero $f(n)$ è la probabilità avvenga un evento al tempo k, che avvenga un evento al tempo $k+n$ e che non avvengano eventi in tutti i tempi compresi tra k e $k+n$. Convenzionalmente possiamo porre $f(0) = 0$.

Le due probabilità p e f non sono indipendenti tra di loro. Infatti dato $n > 0$ le situazioni in cui il primo ripetersi dell'evento è k con $0 < k \leq n$ sono eventi mutualmente esclusivi, ciascuno di esse con probabilità $f(k)p(n-k)$. L

Possiamo scrivere per m positivo

$$p(n) = \sum_{k=1,n} f(k)p(n-k) = \sum_{k=0,n} f(k)p(n-k) \tag{8.1}$$

dove la seconda uguaglianza segue dal fatto che $f(0) = 0$.

Possiamo rendere l'equazione precedente valida anche per $n = 0$ aggiungendo un termine extra

$$p(n) = \sum_{k=0,n} f(k)p(n-k) + \delta(n) \tag{8.2}$$

Le equazioni precedenti permettono di calcolare le p date le f in maniera ricorsiva partendo $p(1)$ e poi andando avanti. Nello stesso modo possiamo calcolare le f a partire dalle p. Infatti la formula precedente può scriversi come

$$f(n) = p(n) - \sum_{k=0,n-1} f(k)p(n-k) + \delta(n) \tag{8.3}$$

Buona parte della teoria degli eventi ricorrenti si basa sull'equazione base e sul fatto che sia le p che le f sono quantità che non possono essere mai negative. Infatti una scelta arbitraria delle p porterebbe naturalmente ad avere delle f a volte negative.

8.3.2 Funzioni generatrici

La relazione tra le p e le f si può scrivere in forma semplice e compatta se introduciamo le funzioni generatrici $P(s)$ and $F(s)$

$$\begin{aligned} P(s) &= \sum_{k=0,\infty} p(k)s^k \\ F(s) &= \sum_{k=0,\infty} f(k)s^k. \end{aligned} \tag{8.4}$$

Dato che le p e le f sono sempre minori di 1 e che

$$F = F(1) = \sum_{k=1,\infty} f(k) \leq 1 \tag{8.5}$$

(come abbiamo visto le $f(k)$ rappresentano eventi mutualmente esclusivi) abbiamo che $P(s)$ e $F(s)$ sono funzioni analitiche nel disco aperto $|s| < 1$ e $|F(s)| \leq 1$ for $|s| = 1$.

La relazione eq.(8.1) per le funzioni generatrici si scrive in maniera semplice come

$$P(s) = P(s)F(s) + 1 \;\Leftarrow\; P(s) = \frac{1}{1 - F(s)} \tag{8.6}$$

È evidente che $P(1) = \infty$ se e solo se $F(1) = 1$. L'evento quindi è transiente ($P(1) = \sum_{k=0,\infty} p(k) < \infty$) solo se $F(1) = \sum_{k=0,\infty} f(k) < 1$: la probabilità di avere un primo ritorno è minore di uno. Al contrario l'evento è ritornante o certo se $F(1) = \sum_{k=0,\infty} f(k) = 1$: la probabilità di avere un ritorno è 1 e quindi l'evento si ripresenterà nel futuro con certezza.

Dalle definizioni precedenti segue che un evento è periodico con periodo m se le $f(n)$ e le $p(n)$ sono uguaglio per n non multiplo di m. Ovviamente si indica come periodo il più grande dei possibili periodi.

8.3.3 Teorema fondamentale

In questa sezione vogliamo dimostrare per eventi ricorrenti certi ($\sum_n f(n) = 1$) aperiodici la probabilità P_i^n per grandi n soddisfa

$$\begin{aligned} \lim_{n\to\infty} p(n) &= 1/\mu, \\ \mu &= \sum_n f(n)n. \end{aligned} \tag{8.7}$$

A questo scopo dimostriamo per prima cosa che il limite in media della probabilità è dato dalla forma precedente:

$$\lim_{n\to\infty}{}^C p(n) \equiv \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1,n} p(k) = 1/\mu, \tag{8.8}$$

dove con $\lim^C$ indichiamo il limite nel senso del Cesàro. A questo scopo utilizziamo un teorema (la cui dimostrazione è in appendice) che afferma per serie $p(n)$ limitate

$$\lim_{n\to\infty} p(n) = \lim_{s\to 1}(1-s)\sum_{k=1,\infty} p(k)s^k = \lim_{s\to 1^-}(1-s)P(s). \tag{8.9}$$

Per s vicino a 1 abbiamo che

$$F(s) = 1-(1-s)\mu + F_2(1-s)^2 + ... \tag{8.10}$$

dove abbiamo supposto per semplicità di dimostrazione che

$$F_2 \equiv \sum_{k=1,\infty} p(k)k(k-1) \tag{8.11}$$

sia finito. In questo caso sviluppando la $F(s)$ in serie di Taylor vicino a $s=1$ otteniamo che

$$P(s) = 1/(1-F(s)) = (\mu(1-s))^{-1} - F_2/\mu^2 + ... \tag{8.12}$$

dove con i puntini indichiamo termini che vanno a zero per s che tende a 1 [1]. Si ha quindi il risultato atteso.

Allo scopo di ottenere risultati più dettagliati sul comportamento asintotico delle $p(n)$ è utile considerare la trasformata di Fourier

$$\tilde{P}(\theta) = P(\exp(i\theta)) \tag{8.13}$$

e utilizzare la formula inversa

$$p(n) = 1/(2\pi)\int d\theta \exp(-in\theta)\tilde{P}(\theta). \tag{8.14}$$

è evidente che nel cerchio unitario $|s|<1$ le funzioni $F(s)$ e $P(s)$ sono analitiche e che la serie per $F(s)$ converge per anche per $|s|=1$. Si ha inoltre che per $|s|<1$

$$|F(s)| < \sum_{k=1,\infty} f(k)|s|^k < \sum_{k=1,\infty} f(k) = 1. \tag{8.15}$$

Le singolarità della $P(s)$ sulla circonferenza unitaria corrispondono ai punti dove $F(s)=1$.

Ci si rende conto facilmente che dato che tutte le $f(k)$ sono positive o nulle la relazione $F(\exp(i\theta))=1$ può sussistere solo se tutti i termini non nulli della serie

$$\sum_{k=1,\infty} f(k)\exp(ik\theta) \tag{8.16}$$

hanno la stessa fase, cioè zero. Infatti abbiamo che

$$Re(F(\exp(i\theta))-1) = Re(\sum_{k=1,\infty} f(k)(\exp(ik\theta)-1)) = \sum_{k=1,\infty} f(k)(cos(k\theta)-1)). \tag{8.17}$$

L'espressione più a destra nella formula precedente è una somma di termini non positivi o nulli può essere uguale a zero, solo se tutti i termini sono nulli. Di conseguenza la relazione

$$F(\exp(i\theta)) = 1 \tag{8.18}$$

[1] Nel caso in cui la serie che definisce F_2 fosse stata divergente, ci sarebbero state delle singolarità addizionali a $s=1$, ma sempre meno forti di un polo.

implica che

$$f(k)(cos(k\theta)-1)=0 \;\; \forall k \; . \tag{8.19}$$

A questo punto abbiamo gli strumenti per dimostrare che una singolarità a θ diverso da zero è possibile solo nel caso periodico. Per prima cosa notiamo che se θ non è della forma $2\pi/m$, con m intero $(cos(k\theta)-1)$ non sarà mai zero e quindi tutte le f dovrebbero essere uguali a zero, cosa non possibile per ipotesi (la loro somma è uguale a 1). Se invece θ è della forma $2\pi/m$ $f(k)$ può essere diversa da zero per k multiplo di m quindi siamo nel caso periodico. Nel caso aperiodico l'unica singolarità possibile della $\tilde{P}(\theta)$ è a $\theta=0$.

Consideriamo quindi solo il caso aperiodico (il caso periodico si tratta facilmente restringendo lo studio a tempi che sono multipli di m e riportandosi al caso aperiodico). Definiamo la serie $g(n)$ come lo scostamento di $p(n)$ dal suo valore asintotico:

$$p(n)=\mu^{-1}+g(n). \tag{8.20}$$

La funzione generatrice delle g ($G(s)$) è dato da

$$G(s)=P(s)-(\mu(1-s))^{-1}. \tag{8.21}$$

La funzione $G(s)$ è finita a $s=1$ (ivi vale $-F_2/\mu^2$) e non è divergente sul resto del cerchio unitario. Si tratta di una funzione limitata a norma L^2 finita:

$$\int d\theta |G(\exp(i\theta))|^2 < \infty. \tag{8.22}$$

Per uno dei teoremi fondamentali della trasformata di Fourier si ha quindi che

$$\sum_{k=1,\infty} g(k)^2 = 2\pi \int d\theta |G(\exp(i\theta))|^2 < \infty, \tag{8.23}$$

il che dimostra ampiamente che $g(k)$ tende a zero per k grandi. La non negatività delle $f(k)$ ha giocato un ruolo cruciale nella dimostrazione.

Una relazione che ci sarà utile nella dimostrazione del teorema del limite centrale per eventi ricorrenti è la seguente:

$$G(1)=\sum_{k=1,\infty} g(k) = -F_2/\mu^2. \tag{8.24}$$

8.4 Appendice: un piccolo ma utile teorema

In questa appendice ci proponiamo di dimostrare il seguente teorema

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1,n} p(k) = \lim_{s\to 1^-} (1-s) \sum_{k=1,\infty} p(k)s^k \tag{8.25}$$

valido per successioni $p(k)$ limitate. Più precisamente vogliamo dimostrare che se il limite presente in uno dei due lati dell'equazione esiste, anche l'altro limite esiste e i due limiti sono uguali.

Procediamo nella prima direzione. Assumiamo che

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1,n} p(k) = A \tag{8.26}$$

e cerchiamo di dimostrare $\lim_{s\to 1^-}(1-s)\sum_{k=1,\infty} p(k)s^k$.

La relazione precedente implica che dato un ϵ arbitrariamente piccolo, esiste un $n(\epsilon)$ tale che

$$|\frac{1}{n}\sum_{k=1,n} p(k) - A| < \epsilon \tag{8.27}$$

per tutti gli $n > n(\epsilon)$.

Utilizzando la relazione $(1-s)^{-1} = \sum_{k=0,\infty} s^k$ abbiamo che (per $|s| < 1$):

$$\begin{aligned}|\sum_{k=0,\infty} p(k)s^k - \frac{A}{1-s}| = |\sum_{k=0,\infty} p(k)s^k - \sum_{k=0,\infty} As^k| = |\sum_{k=0,\infty}(p(k)-A)s^k| \leq \\ |\sum_{k=0,n(\epsilon)} |p(k)-A|s^k + \epsilon \sum_{k=n(\epsilon),\infty} s^k \leq n(\epsilon) + \frac{\epsilon}{1-s}\ ,\end{aligned} \tag{8.28}$$

dove abbiamo utilizzato il fatto che $|p(k) - A|s^k < 1$.

Si quindi ha che

$$|(1-s)\sum_{k=1,\infty} p(k)s^k - A| < \epsilon + n(\epsilon)(1-s) \tag{8.29}$$

e quindi

$$|\lim_{s\to 1}(1-s)\sum_{k=1,\infty} p(k)s^k - A| < \epsilon\ , \tag{8.30}$$

da cui segue (essendo *eps* arbitrario):

$$\lim_{s\to 1}(1-s)\sum_{k=1,\infty} p(k)s^k = A\ . \tag{8.31}$$

QDE

La dimostrazione inversa è lievemente più complicata. Può essere fatta in vari modi e accenniamo solamente ai passaggi principali senza entrare nei dettagli. Il teorema sui residui (vedi equazione 7.16) ci dice

$$n^{-1}\sum_{k=1,n} p(k) = n^{-1}\frac{1}{2\pi i}\oint \frac{ds}{s^2}\frac{1-s^{-n}}{1-s^{-1}}P(s), \tag{8.32}$$

dove il cammino d'integrazione gira intorno all'origine in senso antiorario e sta dentro il cerchio unitario.

Dato che le $p(k)$ sono limitate si ha che per $|s| < 1$

$$|P(s)| < B + \frac{C}{1-|s|} \tag{8.33}$$

essendo B e C costanti opportune.

È facile vedere che per n grande la funzione $\frac{1-s^{-n}}{1-s^{-1}}P(s)$ ha un massimo stretto a $s = 1 - \frac{2}{n}$ e un conto dettagliato mostra che nel limite $n \to \infty$ il contributo dominante all'integrale, che non viene soppresso dal fattore $\frac{1}{n}$ viene proprio da questo punto di sella. Per ottenere questa risultato basta fare l'integrale complesso lungo la circonferenza $|s| = 1 - \frac{2}{n}$. Facendo le stime opportune si trova il risultato voluto.

Più in generale esiste un teorema che afferma che se la serie $p(k)$ soddisfa le stesse condizioni di prima e la funzione $L(x)$ è sufficientemente regolare è tale che

$$\int_0^\infty L(x) = 1, \tag{8.34}$$

essendo l'integrale assolutamente convergente, si ha che, se esiste,

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\sum_{k=1,\infty}L(tk)p(k) \tag{8.35}$$

non dipende da L.

Il teorema precedente si trova considerando i due casi particolari $L(x) = \theta(1-x)$ e $L(x) = \exp(-x)$.

Chapter 9

Catene di Markov

9.1 Proprietà generali

Consideriamo un sistema in cui il tempo è descritto da una variabile discreta. Supponiamo inoltre che lo stato del sistema sia anch'esso descritto da una variabile intera che può assumere o un numero finito o un numero infinito di valori. La storia del sistema sarà quindi descritta da una una funzione $k(n)$ che indica lo stato del sistema al tempo k.

Consideriamo l'evoluzione del sistema, che supporremo probabilistica. Assumiamo che la probabilità che il sistema al tempo $n+1$ sia nello stato i dipenda solo dallo stato del sistema al tempo n, (cioè k) e non dalla storia precedente. In questo caso il sistema forma una catena di Markov. In altri termini una catena di Markov è un sistema con un numero numerabili di stati interni, che si evolve probabilisticamente con un tempo discreto. Il sistema è privo di memoria (la probabilità di transizione non dipende dalla storia), il che implica che la descrizione del sistema, sa sua classificazione in stati è abbastanza fine da determinare la sua successiva evoluzione.

Un ruolo particolarmente importante è data dalla probabiltà di transizione dallo stato k un tempo allo stato i al tempo successivo. Indichiamo con $P_{k,i}$ questa probabilità di transizione. Come conseguenza del fatto che la probabilità deve essere normalizzata a 1. La matrice P deve soddisfare la seguente relazione per qualunque k:

$$\sum_i P_{k,i} = 1, \tag{9.1}$$

dove la somma su i si estende a tutti gli stati della catena (in futuro in tutti i casi in cui non indichiamo i limiti, le somme sugli stati si estenderanno a tutti gli stati possibili). In generale una matrice (finita o infinita) che soddisfa la relazione (9.1) viene chiamata una matrice stocastica in quanto è una possibile matrice di transizione per una catena di Markov. Infatti ad ogni matrice che soddisfi l'equazione (9.1) può venire associata una catena di Markov.

Le relazioni precedenti implicano che la probabilità di avere una data storia per n passi, supponendo che il sistema sia nello stato $k(0)$ al tempo zero è data da:

$$p(k(1), k(2), ..., k(n)) = P_{k(0),k(1)}\ P_{k(1),k(2)}\ ...\ P_{k(n-1),k(n)} \tag{9.2}$$

La formula precedente implica sommando sugli stati intermedi che la probabilità di passare dallo stato k allo stato i in n passi ($P^{(n)}_{k,i}$) è data da

$$P^{(n)}_{k,i} = (P^n)_{k,i} \tag{9.3}$$

dove P^n è l'ennesima potenza della matrice P e $(P^n)_{k,i}$ è l'elemento di matrice di P^n. Ovviamente la matrice $P^{(1)}$ coincide con la matrice P.

9.2 Esempi

Vedi Feller

9.3 Classificazione delle Catene di Markov

Allo scopo di semplificare la trattazione delle catene di Markov è conveniente introdurre una prima classificazione.

Una catena è detta decomponibile se si possono dividere gli stati in due sottoinsiemi A e B tali che non sia possibile fare transizioni da A a B e viceversa. In questo caso la matrice P può essere pensata come il prodotto tensoriale di due matrici che agiscono su due spazi indipendenti. Una catena di Markov è detta indecomponibile se non è decomponibile. Lo studio di una catena decomponibile si può separare nello studio separato delle due catene di Markov che agiscono separatamente in A e B. Molto spesso verranno quindi considerate catene indecomponibili. Ogni catena di Markoff può essere decomposta nella somma numerabile di catena indecomponibili.

Una catena è detta riducibile se si possono dividere gli stati in due sottoinsiemi A e B tali che non sia possibile fare transizioni da A a B mentre le transizioni da B a A possono essere presenti. In questo caso possiamo definire una catena di Markov limitata ad all'insieme A. Naturalmente una catena è irriducibile se non è riducibile. In generale una catena di Markov può contenere una o più sottocatene irriducibili.

Ad una catena di Markov possiamo associare un grafico in maniera tale che gli stati della catena sono i nodi del grafico e le transizioni permesse sono indicate con linee orientate da un nodo all'altro. Una catena di Markov

9.3.1 Esempi di catena decomponibili

Vedi Feller

9.3.2 Esempi di catena riducibili

Vedi Feller

9.3.3 Classificazione degli eventi

È facile vedere che dato uno stato k arbitrario e fisso l'evento *la catena di Markov sta al tempo n nello stato k* soddisfa tutte le condizioni per essere un evento ricorrente al variare di n. In particolare la condizione di assenza di memoria per la catena di Markov implica la condizione di assenza di memoria tipica degli eventi ricorrenti. La quantità $P_a^{(n)} \equiv P_{a,a}^{(n)}$ soddisfa tutte le condizioni nella definizione di eventi ricorrenti. Ciascuno stato stato a può essere classificato a seconda della natura dell'evento ricorrente associato e quindi dalle proprietà di primo ritorno . Avremo quindi eventi periodici e aperiodici, eventi transienti, e eventi ritornanti, quest'ultimi divisi in eventi nulli e eventi ergodici.

L'uso dei risultati ottenuti nel capitolo precedente sugli eventi ritornanti permette una trattazione molto semplice (dovuta a Feller) delle catene di Markov, sia per catene finite dimensionali che per catene infinite dimensionali. Alcuni risultati validi essenzialmente per catene finite dimensionali si possono trovare alla fine di questa sezione.

9.4 Teoremi fondamentali

9.4.1 Natura degli eventi in catene irriducibili

Ci proponiamo di dimostrare che tutti gli eventi sono dello stesso tipo in catene di Markov irriducibili.

Consideriamo due stati della catena a e b. La condizione di irriducibilità implica che esiste un numero m tale che $P^{(m)}_{a,b}$ è diversa da zero. Infatti consideriamo l'insieme $A(m)$ costituito da tutti gli stati raggiungibili partendo da a in m passi e definiamo l'insieme A come l'unione di tutti gli $A(m)$. È immediato che non ci possono essere transizioni tra un elemento do A e un elemento che non appartiene ad A. Infatti, un elemento d è raggiungibile partendo da un elemento c appartenente ad A, deve esistere un m tale che c è raggiungibile in m passi a partire da a e quindi d è raggiungibile in $m+1$ passi. La condizione di irriducibiltà implica che l'insieme A coincide con la catena stessa, dunque qualunque stato b appartiene ad A e di conseguenza esiste un numero m tale che $P^{(m)}_{a,b}$ è diversa da zero. Nello stesso modo esiste un numero n tale che $P^{(n)}_{b,a}$ è diversa da zero.

In generale la probabilità di andare da a a a in $l+m+n$ passi sarà minore o uguale alla probabilità che il sistema vada da a a b in m passi, ritorni in b in l passi e successivamente vada da b a a in n passi. Infatti la possibile esistenza di altri percorsi alternativi da a a a non può che aumentare la probabilità. Abbiamo quindi

$$P^{l+m+n}_{a,a} \leq P^m_{a,b} P^l_{b,b} P^n_{b,a} = \alpha P^l_{b,b}. \tag{9.4}$$

Nello stesso modo abbiamo che

$$P^{l+m+n}_{b,b} \leq \beta P^l_{a,a} \tag{9.5}$$

dove sia α che β sono costanti non nulle.

Le due relazioni precedenti implicano che il comportamento asintotico per grandi l di $P^l_{a,a}$ e $P^l_{b,b}$ è lo stesso. Quindi a e b devono essere o entrambi transienti, o persistenti nulli o ergodici. Inoltre è anche evidente che possono essere o entrambi periodi o entrambi aperiodici.

Possiamo anche facilmente dimostrare che

$$P^{l+m}_{a,b} \leq P^m_{a,b} P^l_{b,b} = \gamma P^l_{b,b}, \tag{9.6}$$

quindi la probabilità di transizione ha lo stesso fato delle probabilità di ritorno.

Nello stesso modo è facile dimostrare che in una catena irriducibile gli eventi sono tutti periodici o tutti aperiodici. In conclusione dato che in una catena irriducibili tutti gli eventi hanno la stessa natura, la classificazioni degli eventi si riporta alla catena intera, che sarà quindi periodica o aperiodica, ergodica, nulla e transiente.

Un piccolo corollario del teorema precedente implica che in una catena irriducibile *finita* tutti non è possibile che gli stati siano transienti o ritornanti nulli. Infatti la condizione di normalizzazione della probabiltà implica che

$$\sum_b P^n_{a,b} = 1 \tag{9.7}$$

La somma su b si estende su un numero finito di stati. Possiamo quindi nella formula seguente scambiare il limite $n \to \infty$ con la sommatoria e ottenere:

$$1 = \lim_{n\to\infty} \sum_b P^n_{a,b} = \sum_b \lim_{n\to\infty} P^n_{a,b} \tag{9.8}$$

Il lato destro dell'equazione precedente sarebbe nullo se gli stati fossero transienti o ritornanti nulli.

Che cosa possiamo dire di catene riducibili? Utilizzando argomenti simili a quelli dell'appendice possiamo dimostrare che se consideriamo l'insieme degli eventi che non appartengono a nessuna delle sottocatene irriducibile, quest'insieme deve essere composto necessariamente da eventi transienti, quindi le eventuali componenti ergodiche devono essere costituite dalle sottocatene irriducibili.

9.4.2 Teoremi limiti per per catene irriducibili ergodiche

Consideriamo una catena irriducibile aperiodica ergodica (il caso periodico si può trattare facilmente con la stessa tecnica osservando il sistema solo a tempi multipli del periodo).

Ci proponiamo di dimostrare una serie di teoremi.

1. La quantità $\lim_{n\to\infty} P^n_{a,b}$ non dipende dal punto di partenza a e può essere indicata con u_b.
2. Le quantità u_b soddisfano la seguente equazione lineare
$$\sum_a u_a P_{a,b} = u_a. \tag{9.9}$$
3. Se consideriamo lo spazio delle serie u che appartengono a l^1, ovvero tali $\sum_b |u_b| < \infty$, la soluzione dell'equazione precedente è unica a meno di una normalizzazione.
4. Si ha inoltre che $\sum_b u_b = 1$, ovvero le u sono delle probabilità normalizzate.

I teoremi precedenti sono ovviamente falsi per una catena irriducibile (infinita) in cui tutti gli stati siano transienti. Infatti un questo caso avremmo che $u_b = 0$ per qualsiasi b. Formalmente la dimostrazione dei teoremi precedenti può farsi banalmente scambiando limiti con sommatorie infinite e questa operazione non sempre lecita, diventa legale solo nel caso di catene ergodiche.

Incominciamo con la dimostrazione del primo teorema. In generale possiamo scrivere che
$$P^n_{a,b} = \sum_{m=1,n} f^m_{a,b} P^{n-m}_{b,b} \tag{9.10}$$
dove $f^m_{a,b}$ è la probabilità che il sistema passi da a a b per la prima volta al tempo m.

In una catena irriducibile ergodica il passaggio per ogni stato in particolare b è certo, indipendentemente dal punto iniziale. La dimostrazione di questo risultato, intuitivamente evidente, è rimandata all'appendice. Questo risultato implica che
$$\sum_{m=1,\infty} f^m_{a,b} = 1 \tag{9.11}$$
Se formalmente effettuiamo il limite $n \to \infty$ nell'equazione (9.10 otteniamo che
$$P^n_{a,b} = \sum_{m=1,\infty} f^m_{a,b} u_b = u_b \tag{9.12}$$
dove abbiamo posto
$$\lim_{n\to\infty} P^{n-m}_{b,b} \equiv u_b \tag{9.13}$$
Dobbiamo dimostrare che il passaggio precedente è lecito, cosa non evidente in quanto abbiamo scambiato un limite con una somma infinita.

A questo scopo notiamo che se dato l esiste un $\epsilon(l)$ tale che

$$|P^n_{a,b} - \sum_{m=1,l} f^m_{a,b} P^{n-m}_{b,b}| < \epsilon(l), \tag{9.14}$$

in quanto il termine mancante, ovvero $\sum_{m=l+1,\infty} f^m_{a,b} P^{n-m}_{b,b}$ è più piccolo di $\epsilon(l) \equiv \sum_{m=l+1,\infty} f^m_{a,b}$, dato che le $P_{b,b}$ sono certamente minori di uno. Inoltre $\epsilon(l)$ tende a 0 quando $l \to \infty$, in quanto la serie $\sum_{m=1,\infty} f^m_{a,b}$ è convergente. Se passiamo al limite nell'equazione precedente (passaggio legale in quanto contiene una sommatoria finita) otteniamo che

$$|\lim_{n\to\infty} P^n_{a,b} - \sum_{m=1,l} f^m_{a,b} u_b| < \epsilon(l). \tag{9.15}$$

Mandando l ad infinito e quindi ϵ a zero otteniamo che

$$|\lim_{n\to\infty} P^n_{a,b} - u_b| = 0, \tag{9.16}$$

ovvero è il risultato atteso.

In questo modo abbiamo dimostrato il primo teorema. Per dimostrare il teorema successivi è conveniente introdurre un piccolo lemma: se le quantità G^n_a non sono negative

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{a=1,\infty} G^n_a \geq \sum_{a=1,\infty} \lim_{n\to\infty} G^n_a \tag{9.17}$$

Infatti come per la dimostrazione del teorema precedente possiamo scrivere

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{a=1,\infty} G^n_a \geq \lim_{n\to\infty} \sum_{a=1,k} G^n_a = \sum_{a=1,k} \lim_{n\to\infty} G^n_a. \tag{9.18}$$

Effettuando il limite $k \to \infty$ nella formula precedente otteniamo il lemma annunciato precedentemente.

Consideriamo la seguente relazione

$$\sum_a P^n_{c,a} P_{a,b} = P^{n+1}_{c,b} \tag{9.19}$$

Utilizzando il lemma precedente abbiamo che

$$u_b = \lim_{n\to\infty} P^{n+1}_{c,b} \geq \sum_a \left(\lim_{n\to\infty} P^n_{c,a}\right) P_{a,b} = \sum_a u_a P_{a,b} \tag{9.20}$$

Ovvero

$$u_b - \sum_a u_a P_{a,b} \geq 0 \tag{9.21}$$

Tuttavia la somma su b del lato destro della precedente equazione è zero (si utilizza la relazione $\sum_b P_{a,b} = 1$. La somma di termini non negativi può essere nulla solo se tutti i termini sono nulli, è quindi abbiamo dimostrato che $u_b = \sum_a u_a P_{a,b}$.

Supponiamo che esista un vettore v_a (che soddisfi la condizione $\sum_a |v_a| < \infty$) tale che

$$\sum_a v_a P_{a,b} = v_b \tag{9.22}$$

Applicando l'equazione precedente n volte avremo che

$$\sum_a v_a P^n_{a,b} = v_b \tag{9.23}$$

Possiamo considerare il limite $n \to \infty$ e dato che la somma è assolutamente convergente portare il limite dentro la sommatoria. Abbiamo quindi che

$$v_b = \lim_{n\to\infty} \sum_a v_a P^n_{a,b} = \sum_a v_a u_b \tag{9.24}$$

Abbiamo quindi che $v_b \propto u_b$. Sommando su b e dividendo per $\sum_a v_a$ otteniamo che $\sum_a u_a = 1$. Abbiamo quindi dimostrato sia il punto 3 che il punto 4.

9.5 Catene finite

Nel caso di una catena di Markov finita (ovvero con un numero finito di stati) si possono ottenere risultati molto precisi utilizzando il teorema spettrale per matrici non Hermitiane. A volte le tecniche che qui utilizziamo si possono estendere anche al caso infinito, (e questo sarà fatto nel capitolo successivo in un caso particolare), ma questa estensione non è sempre possibile.

Consideriamo il caso di una catena con un numero finito di stati (N) e supponiamo che la matrice P abbia N autovalori reali distinti fra di loro, che sono gli zeri del polinomio caratteristico $\det(P-\lambda) = \det(P^* - \lambda)$, dove P^* è la matrice trasposta di P. Il caso di autovalori degeneri è lievemente più complicato e non verrà trattato qui. Introduciamo gli N autovalori a destra (d) e a sinistra (s) che soddisfano le seguenti equazioni

$$\begin{aligned} \sum_k P_{i,k} d(j)_k &= q(j) d(j)_i, \\ \sum_i s(j)_i P_{i,k} &= q(j) s(j)_k. \end{aligned} \tag{9.25}$$

Come si può dimostrare facilmente gli autovettori a destra sono ortogonali agli autovettori a sinistra corrispondenti ad autovalori differenti e possiamo imporre la condizione di ortonormalizzazione

$$\sum_k d(j)_k s(m)_k = \delta_{j,m}. \tag{9.26}$$

I vettori d e s vengono a volti chiamati una base sghemba, infatti ogni vettore $\overline{v}$ può scriversi come

$$\overline{v} = \sum_k \overline{d}_k (\overline{v}, \overline{s}_k) \tag{9.27}$$

dove con $(\overline{a}, \overline{b})$ indichiamo il prodotto scalare tra i vettori $\overline{a}$ e $\overline{b}$.

La matrice P si può scrivere come

$$P_{i,k} = \sum_j s(j)_i d(j)_k q(j). \tag{9.28}$$

Nello stesso modo otteniamo che la potenza ennesima della matrice è data da

$$(P(^n))_{i,k} = \sum_j d(j)_i s(j)_k q(j)^n. \tag{9.29}$$

Se indichiamo con $q(1)$ l'autovalore in modulo più grande della matrice P, che supponiamo per il momento unico otteniamo che per n grande

$$(P^n)_{i,k} \to d(1)_i s(1)_k q(1)^n \tag{9.30}$$

È immediato verificare che la condizione di normalizzatione della matrice P, ovvero $\sum_k P_{i,k} = 1$ implica che il vettore con componenti $d_k = 1$ è un autovettore destro con autovalore 1 (indichiamo con u_k il corrispondente autovalore sinistro. Autovalori in modulo più grandi di 1 non possono esserci, altrimenti la probabiltà divergerebbe per grandi n. Otteniamo quindi che nel caso di autovalore unico di modulo 1

$$(P^n)_{i,k} \to u_k \tag{9.31}$$

Più precisamente abbiamo

$$(P^n)_{i,k} = u_k + d(2)_i s(2)_k q(2)^n + O(q(3)^n) \tag{9.32}$$

dove abbiamo ordinato gli autovalori in ordine di modulo decrescente. Dato che

$$q(2)^n = e^{\log(q(2))n} , \tag{9.33}$$

la quantità $\tau \equiv (\ln(q(2))^{-1}$ è anche detta tempo di correlazione della catena, in quanto solo per $n >> \tau$, le condizioni iniziali vengono dimenticate.

Nel caso generale si ha che

$$(P^n)_{i,k} \simeq \sum_j d(j)_i s(j)_k \exp(i\phi(j)n), \tag{9.34}$$

dove la somma va su gli autovalori di modulo 1.

Catene riducibili o decomponibili corrispondono a più di un autovalore uguale a 1. Il caso in cui l'autovalore a 1 è non degenere corrisponde a catene irriducibili.

Nel caso di catene aperiodiche c'è un solo autovalore di modulo uno, al contrario per catene periodiche con periodo t ci sono t autovalori di modulo uno, dati dalla formula

$$q(j) = \exp\left(\frac{2\pi i(j-1)}{t}\right) \tag{9.35}$$

Anche nel caso di catene riducibili e decomponibili aperiodiche l'autovalore a 1 non sarà degenere. La struttura della catene, periodica o aperiodica, decomponibile o indecomponibile, riducibile o irriducibile si riflette fedelmente sulla struttura degli autovalori e autovettori di modulo 1, tuttavia per brevità non ci addentreremo in questo argomento.

In generale non è facile estendere questa trattazione al caso di catene infinite dimensionali in tutta generalità perché non esiste un'estensione del teorema spettrale per operatori limitati non autoaggiunti nel caso infinito dimensionale. Si noti in catene irriducibili infinite dimensionali è ben possibile che il tempo di correlazione τ sia infinito, ovvero che il limite asintotico delle probabilità viene raggiunto più lentamente di un esponenziale.

9.6 Esempi di Catene non di Markov

Possiamo fare esempi di catene che non sono di Markov.

- La probabiltà dell'evento $k(n+1)$, dipende sia da $k(n)$ e da $k(n-1)$. In questo caso possiamo ottenere una catena di Markov considerando come evento al tempo n la coppia di valori $k(n)$ e $k(n-1)$. .

- Consideriamo una cammino aleatorio in una dimensione e introduciamo delle scatole di dimensione L. Gli eventi sono la presenza del viaggiatore al tempo n nella k-essima scatola. In altri termini se $i(n)$ è la posizione del viaggiatore al tempo n, $k(n)$ è la parte intera di $L^{-1}i(n)$,ovvero il più grande intero minore uguale $L^{-1}i(n)$. Si può facilmente dimostrare che per $L > 2$ la catena risultante non è una catena di Markov.

In generale se partiamo da una catena di Markov e riduciamo lo spazio degli eventi, perdendo alcune informazioni, la catena risultante può non essere una catena di Markov, e al contrario, partendo da una catena non di Markov questa può diventare equivalente a una catena di Markov se ampliamo lo spazio degli eventi.

9.7 Appendice: Un semplice teorema

In questa appendice vogliamo dimostrare che in una catena di Markov irriducibile ergodica un'evento b arbitrario è certo indipendentemente dal punto di partenza. In altri termini vogliamo dimostrare che la probabilità di non passare mai per b partendo da a in N passi tende a zero quando N tende a infinito.

Abbiamo già visto che sotto le ipotesi precedenti esiste un m tale che la probabilità di andare da a a b in m passi ($P^m_{a,b}$) è non nulla. A maggior ragione esisterà un l ($l \le m$) tale che la probabilità di andare da a a b in l passi senza passare per a nei passi intermedi è diversa da zero (chiamiamola $1-\gamma$).

Supponiamo per assurdo che la probabilitá di non passare almeno una volta per b partendo da a non tenda a zero quando il tempo tende ad infinito. In questo caso, che vogliamo dimostrare infondato, la non solo la probabilità di andare da a a a in n passi non va a zero quando n tende ad infinito, ma anche la probabilitá di andare da a a a in n passi senza passare per b (R^n_a) non va a zero ad quando il tempo tende ad infinito.

Consideriamo le storie S_k in cui il sistema va da a a a senza passare per b e poi va da a a b in l passi senza passare per a. In altri termini k è l'ultimo tempo in cui il sistema è passato per a prima di andare a b in $l$passi. È evidente che storie caratterizzate da k diversi non possono essere contemporaneamente vere e quindi la probabilità che una almeno di queste storie si realizzi $Q(k)$ è data dalla somma delle probabiltà che ciascuna storia si realizzi. Otteniamo quindi che

$$Q(k) \ge \gamma \sum_{j=0,k} R^j_a \tag{9.36}$$

Dato che per ipotesi (assurda) R^j_a non tende a zero quando $j \to \infty$, il risultato della sommatoria diverge quando k va ad infinito e quindi il lato destro della precedente equazione diventa più grande di 1 per k sufficientemente elevato. Ciò non è possibile in quanto $Q(k)$ è una probabilità. L'ipotesi che abbiamo fatto (la probabilità di non passare almeno una volta per b partendo da a non tenda a zero quando il tempo tende ad infinito) risulta contradditoria. Ne consegue quindi che la probabilità di non passare almeno una volta per b partendo da a tende a zero quando il tempo tende ad infinito (la probabilità di passare almeno una volta per b partendo da a tende a uno quando il tempo tende ad infinito) e quindi il passaggio per b è un evento corto.

Chapter 10

Simulazioni Numeriche

10.1 Bilancio Dettagliato per Catene di Markov

La relazione della bilancio dettagliato riveste particolare importanza quando si vogliono utilizzare le catene di Markov per calcolare integrali (tipicamente, come vedremo in seguito, di alta dimensionalità).

Una catena di Markov soddisfa la relazione detta del *bilancio dettagliato* se esiste una funzione R_i, positiva, che non si annulla per nessun valore di i, tale che

$$R_i \; P_{i,k} = R_k \; P_{k,i} \; . \tag{10.1}$$

È conveniente introdurre le quantità $\rho_i = R_i^{1/2}$, anch'esse positive che soddisferanno le relazioni

$$\rho_i^2 \; P_{i,k} = \rho_k^2 \; P_{k,i} \; . \tag{10.2}$$

Si noti che il procedimento e' esattamente lo stesso di quello che abbiamo utilizzato per passare dall'equazione di Fokker-Plank a un'equazione di evoluzione del tipo $\dot{\rho} = -A\rho$, dove A è un'operatore simmetrico.

La condizione (10.2) è equivalente ad imporre che la matrice $P_{i,k}$ possa essere scritta come

$$P_{i,k} = \rho_i^{-1} M_{i,k} \; \rho_k \; , \tag{10.3}$$

dove $M_{i,k}$ è una matrice simmetrica. Sommando la relazione (10.2) su k si ottiene che

$$\sum_k \rho_k^2 P_{k,i} = \rho_i^2 \sum_k P_{i,k} = \rho_i^2 \; . \tag{10.4}$$

La condizione di bilancia dettagliata implica che, se $\sum_k \rho_k^2$ non è divergente, ρ_k^2 è proporzionale alla distribuzione di probabilità asintotica della catena. Le probabilità di transizione dopo n passi possono essere ottenute facilmente. Un semplice calcolo mostra che

$$P^n_{i,k} = \rho_i^{-1} M^n_{i,k} \; \rho_k \; . \tag{10.5}$$

Le potenze ennesime della matrice M possono essere ottenute utilizzando il teorema spettrale:

$$M^n_{i,k} = \sum_m \psi_i^{(m)} \psi_k^{(m)} \lambda^{(m)^n} \; , \tag{10.6}$$

dove

$$\sum_k M_{i,k}\ \psi_k^{(m)} = \lambda^{(m)}\psi_i^{(m)}\ . \tag{10.7}$$

Nel caso di una catena di Markov con un numero finito di stati la matrice M è una matrice finito-dimensionale; se la catena è anche irriducibile ed aperiodica si ha che

$$\lim_{n\to\infty} P_{i,k}^n = \lim_{n\to\infty} \rho_i^{-1} M_{i,k}^n\ \rho_k = \rho_k^2\ . \tag{10.8}$$

Ne consegue che deve esistere un solo autovalore di M uguale a 1 (che corrisponde ad un autovettore $\rho \approx \psi^{(1)}$). Tutti gli altri autovalori devono avere modulo più piccolo di 1. Se diciamo $\psi^{(2)}$ l'autovettore con autovalore in modulo più vicino a 1 (il secondo autovalore della matrice, dopo il più grande che vale certamente 1) otteniamo che per grandi n

$$P_{i,k}^n = \psi_k^{(1)^2} + \lambda^{(2)^n} \frac{\psi_i^{(2)}}{\psi_i^{(1)}} \psi_k^{(1)} \psi_k^{(2)} + O((\lambda^{(3)^n}))\ . \tag{10.9}$$

Si noti che la somma su k del termine proporzionale a $\lambda^{(2)}$ è automaticamente nulla a causa delle proprietà di ortonormalità degli autovettori ψ. Il tipo di manipolazione algebrica che abbiamo utilizzato è molto simile a quello introdotto per i processi di diffusione per campi di velocità che sono gradienti di potenziale. Questo fatto non deve stupire, in quanto un processo di diffusione su un reticolo è una catena di Markov: nel limite in cui il passo reticolare tende a zero la condizione di bilancia dettagliata per la catena di Markov corrispondente al processo di diffusione implica che il campo di velocità è necessariamente di tipo gradiente.

Nel caso infinito dimensionale la formula precedente si può estendere facilmente, bisogna tuttavia considerare la possibile esistenza di uno spettro continuo oltre allo spettro discreto (che adesso può contenere un numero infinito di autovalori). Nel caso in cui lo spettro continuo si estende fino a 1 oppure il punto 1 è un punto di accumulazione dello spettro discreto, le probabilità $P_{i,k}^n$ tendono al valore asintotico quando n va ad infinito più lentamente di un esponenziale (per esempio a potenza, come avviene nel caso del random walk).

I risultati esposti in questa sezione sono utili per costruire catene di Markov che conducano ad una forma prefissata della probabilità asintotica: ci saranno utili, appunto, a costruire processi che ci consentano di calcolare in modo efficiente integrali ad alta dimensionalità.

È interessante considerare le relazioni di Einstein per le probabilità di transizione tra due stati di i e j con energia rispettivamente $E(i)$ e $E(j)$ in un sistema ad una temperatura T:

$$P_{i,j} = \exp(-\beta(E(j) - E(i)))P_{j,i}\ , \tag{10.10}$$

dove $\beta = (kT)^{-1}$, dove k è la costante di Boltzmann. Queste relazioni coincidono con quelle del bilancio dettagliato, dove la funzione R_i è data da $\exp(-\beta E(i))$. In altre parole le relazioni di Einstein garantiscono che la distribuzione di probabilità asintotica è data proprio dalla distribuzione di Boltzmann $\exp(-\beta E(i))$.

10.2 Metodi Monte Carlo

10.2.1 Integrali in Poche e Molte Dimensioni

Il metodo Monte Carlo, che discuteremo qui, si rileva di grande utilità nel calcolo di integrali di alta dimensionalità: questa è una situazione comune nello studio di sistemi fisici, in cui la scala di riferimento per un sistema macroscopico è il numero di Avogadro, di ordine 10^{23}.

Cominciamo però considerando il semplice integrale unidimensionale

$$G \equiv \int_A^B g(x)\ dx\ . \tag{10.11}$$

Tipicamente una risoluzione numerica avviene attraverso un metodo alla quadrature, più o meno astuto. Si comincia scegliendo dei valori equispaziati di x_i sul supporto (metodi avanzati possono utilizzare valori degli x_i scelti a partire da considerazioni complesse). Si decompone quindi l'integrale in contributi infinitesimi, e si approssima l'integrale fra $-\epsilon$ e $+\epsilon$ secondo una qualche formula approssimata [9]. Ad esempio la *regola di Simpson* dà

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} g(x)\ dx = \frac{\epsilon}{3}(g(-\epsilon) + 4g(0) + g(-\epsilon)) + O(\epsilon^5)\ . \tag{10.12}$$

L'integrale finito (10.11) viene ottenuto come somma di N contributi del tipo (10.12), dove $N \sim \frac{1}{\epsilon}$. Notiamo subito che l'errore sull'integrale è di ordine N^{-4}, e diminuisce quindi abbastanza rapidamente all'aumentare dei punti con i quali approssimiamo il continuo (stiamo assumendo ovviamente che la funzione g abbia un comportamento ragionevolmente regolare).

Un'idea che a prima vista può sembrare peculiare è quella di scegliere i valori x_i a caso, uniformemente distribuiti nell'intervallo $[A, B]$: questa è l'idea base del metodo detto di *Monte Carlo* (per ragioni che possono esser dedotte come esercizio dai lettori più smaliziati), che porta a risultati di interesse molto maggiore di quel che potrebbe apparire da una prima valutazione. Scelti quindi i valori $\{x_i\}$ a caso, approssimiamo l'integrale G con

$$G \simeq \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g(x_i)\ . \tag{10.13}$$

Cerchiamo di dare una stima dell'errore che si ha sull'integrale approssimato in questo modo. Dato che abbiamo scelto a caso i valori di x_i è ragionevole considerare $g(x_i)$ come una variabile aleatoria, ed utilizzare per la nostra stima nel limite di N grande il teorema del limite centrale. Definiamo

$$\overline{g} \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g(x_i)\ ,\quad \overline{g^2} \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g(x_i)^2\ . \tag{10.14}$$

La varianza di $g(x_i)$ è $\sigma_g \equiv \sqrt{\overline{g^2} - \overline{g}^2}$, e l'errore sulla nostra stima di G risulta invece essere

$$\sigma_G \simeq \frac{\sigma_g}{N^{\frac{1}{2}}}\ . \tag{10.15}$$

L'errore è di ordine $N^{-\frac{1}{2}}$ (da confrontare con N^{-4} per la regola di Simpson). Questo è ovviamente un risultato non esaltante (per il nostro integrale unidimensionale la regola di Simpson risulta molto più efficace), destinato però a diventare molto più notevole nel caso di integrali multidimensionali. Prima di avventurarci a discuterne notiamo che l'errore è proporzionale a σ_g, che misura le fluttuazioni della funzione g: più piccola σ_g più piccolo l'errore. Questa considerazione sarà all'origine dell'approccio al metodo Monte Carlo detto dell'*importance sampling*, che discuteremo nel seguito.

Analizziamo quindi il comportamento di un integrale multidimensionale,

$$\int \left(\prod_{i=1}^{D} dx_i\right) g\left(\{x_i\}\right)\ , \tag{10.16}$$

in D dimensioni. Qui D sarà grande (sui nostri calcolatori abbiamo sovente a che fare con $D \simeq 10^8$): questa è una situazione comune in fisica, dove siamo interessati a descrivere un sistema con molti gradi di libertà.

Supponiamo di utilizzare una qualche regola di integrazione deterministica, approssimando il dominio di integrazione con N punti in totale: ognuna delle D dimensioni risulterà divisa in $N^{\frac{1}{D}}$ intervalli di spaziatura $\epsilon \sim N^{-\frac{1}{D}}$. Per esempio 1024 punti in $D = 10$ dimensioni ci danno 2 punti per dimensione.

Una cella elementare avrà volume ϵ^D. L'errore sull'integrale su una celletta elementare sarà $O(\epsilon^{D+\eta})$, dove η è un numero piccolo, di ordine uno, che dipende dal dettaglio della regole usata: η è per esempio 2 per la classica regola trapezoidale. L'errore totale commesso sull'integrale sarà quindi $N \cdot O(\epsilon^{D+\eta})$, che utilizzando la legge di scala per ϵ risulta essere di ordine $N^{-\frac{\eta}{D}}$. Visto che siamo interessati ad integrali di alta dimensionalità questa legge di scala risulta di una drammatica lentezza, ed il calcolo dell'integrale non può esser fatto utilizzando quest'approccio: la decrescita dell'errore con N è troppo lenta.

Nel metodo Monte Carlo, invece, l'errore decresce come $N^{-\frac{1}{2}}$, in modo indipendente da D. Ovviamente bisognerà tenere in conto prefattori che possono essere anche grandi, ma che comunque assumeremo essere di ordine uno. Per il metodo classico della regola trapezoidale, quindi, ad esempio, il fatto che $\eta = 2$ implica che il metodo Monte Carlo naive che abbiamo descritto qui è asintoticamente superiore (per grandi N) all'integrazione deterministica a partire da $D = 4$: è chiaro comunque che, visto che siamo interessati a valori di D che consentono di approssimare situazioni dominate dal numero di Avogadro, il gioco vale la candela.

Tuttavia spesso non è oro tutto quello che luccica. Supponiamo di considerare l'integrale

$$\int_{r<R} d^D x \exp(-\frac{1}{2}Dr^2) = S(D) \int_0^R dr r^{D-1} \exp(-\frac{1}{2}Dr^2) = S(D) \int_0^R \frac{dr}{r} \exp(-D(\frac{1}{2}r^2 - \ln(r)) \tag{10.17}$$

dove $r^2 = x^2$, $S(D)$ è la superficie della sfera in D dimensioni e consideriamo il caso $R > 1$. Il massimo dell'integrale è a $r = 1$ e per D grande il contributo dominante proviene dalla questa regione. Al contrario la maggior parte dei punti per D grande è concentrata nella regione $r \approx R$, ovvero vicino alla superficie della sfera. In conclusione il metodo Monte Carlo, applicato all'integrale precedente incomincia a funzionare solo quando il numero dei punti è almeno di ordine R^D e quindi abbiamo una probabilità non trascurabile di piazzare uno dei nostri punti scelti a caso nella regione rilevante. Ovviamente per D grande andiamo incontro al disastro.

Come vedremo questo è un fenomeno noto in meccanica statistica: quando lo spazio delle configurazioni ha un numero di dimensioni molto elevate, la distribuzioni di probabiltà si concentra spesso in una regione *piccola* dello spazio delle fasi che può non essere quella rilevante per il calcolo dell'integrale a cui siamo interessati. Per risolvere questa difficoltà è necessario utilizzare il metodo dell'*Importance Sampling*, descritto nella sezione successiva.

10.2.2 Importance Sampling

Nella sezione precedente abbiamo illustrato il fatto che l'errore commesso nel calcolo di un integrale mediante il metodo Monte Carlo diminuisce quando diminuisce σ_g, ossia quando la funzione da integrarsi ha un comportamento dolce (nel caso di una costante, ovviamente, un solo punto rappresentativo scelto a caso ci consente di ridurre l'errore a zero). Il problema sembra difficile da risolvere, dato che σ_g è una caratteristica intrinseca della funzione $g(x)$, e non può essere modificata. La risposta appropriata è , in questo caso, effettuare una trasformazione che ci conduca ad integrare un funzione diversa, caratterizzata da fluttuazioni minori.

Per far questo consideriamo una funzione di peso $\pi(x)$, tale che

$$\int_A^B \pi(x)\ dx = 1 \ \text{ e } \ \pi(x) > 0\ \forall x \in [A,B]\ . \tag{10.18}$$

Riscriviamo quindi

$$G \equiv \int_A^B \tilde{g}(x)\ \pi(x) dx\ , \tag{10.19}$$

dove abbiamo definito

$$\tilde{g}(x) \equiv \frac{g(x)}{\pi(x)}\ . \tag{10.20}$$

Calcolare (10.19) vuol dire scegliere i valori $\{x_i\}$ non piú con probabilità uniforme ma secondo la misura $\pi(x)dx$. Questa è l'idea alla base del cosiddetto *importance sampling*. In casi realistici non sappiamo calcolare esattamente questa misura, ma l'uso delle tecniche relative alle catene di Markov che abbiamo appena descritto ci consente di implementare l'algoritmo.

Ora l'errore sull'integrale sarà dominato dalla varianza di $\tilde{g}(x)$ invece che da quella di g. Se riusciamo a scegliere una funzione di peso $\pi(x)$ che sia grande dove $g(x)$ è grande e piccola dove $g(x)$ è piccola $\tilde{g}(x)$ risulterà essere una funzione dolce, la sua varianza sarà piccola e l'errore sulla stima dell'integrale sarà piccolo a sua volta.

In semplici esempi unidimensionali è possibile calcolare esattamente la probabilità dei valori x_i, $\pi(x)dx$. In generale, ed in quasi tutti i casi interessanti, questo non è possibile: useremo le tecniche discusse in precedenza che consentono di costruire una catena di Markov che converge ad una misura data per selezionare i punti del supporto secondo $\pi(x)dx$. Introdurremo l'algoritmo classico di Metropolis che consente proprio di effettuare quest'operazione in modo semplice.

In Meccanica Statistica questa formulazione è molto naturale. Ricordiamo che in questo caso gli integrali da calcolare sono tipicamente dei valori di aspettazione della forma

$$\frac{\int dC e^{-\beta H(C)} g(C)}{\int dC e^{-\beta H(C)}}\ , \tag{10.21}$$

dove con C abbiamo simbolicamente indicato i gradi di libertà rilevanti per il sistema fisico considerato, ed S è un funzionale che determina le proprietà di interazione fra le componenti elementari della teoria. Per esempio per un sistema composto da N particelle in tre dimensioni dC ha la forma $dx_1dy_1dz_1$, $dx_2dy_2dz_2$, ..., $dx_Ndy_Ndz_N$, ed $H(C)$ dipende dalle $3N$ variabili che caratterizzano i gradi di libertà del sistema. È chiaro che qui una scelta naturale per il fattore di peso è proprio il cosiddetto *fattore di Boltzmann* $\exp(-\beta H)$. Il fatto che normalmente i valori di aspettazione in Meccanica Statistica dipendano da una zona estremamente piccola dello spazio delle fasi rende in questo caso il metodo Monte Carlo molto efficiente: per avere una buona stima dell'integrale (10.21) è sufficiente campionare una parte piccola dei valori che possono assumere le variabili C.

10.2.3 L'Algoritmo di Metropolis

Dobbiamo quindi porci il problema di scegliere un campionamento del supporto che ci consenta di riprodurre la misura prescelta. Specializziamo la nostra discussione ad una forma del tipo (10.21), che è , come abbiamo discusso, tipica di problemi in Meccanica Statistica. In questo caso non siamo in grado, ovviamente, di esibire la forma esplicita della misura, e siamo intenzionati ad utilizzare le tecniche basate sulle catene di Markov che abbiamo descritto nelle sezioni precedenti. Per far questo scriviamo la condizione della bilancia dettagliata (10.2) nel caso della (10.21), ottenendo:

$$e^{-\beta H_i} P_{i,k} = e^{-\beta H_k} P_{k,i} \ , \tag{10.22}$$

dove $H_i \equiv H(C_i)$, e $H_k \equiv H(C_k)$. Una catena di Markov nello spazio delle configurazioni del sistema C che soddisfi la (10.22) e che sia ergodica (affinchè non esistano parti dello spazio delle fasi impossibili da raggiungere) ricostruisce la probabilità di equilibrio dettata dal fattore di Boltzmann, ovvero

$$\begin{aligned} P(C) &= Z^{-1} \exp(-\beta H(C)) \\ Z &= \sum_C \exp(-\beta H(C)). \end{aligned} \tag{10.23}$$

Questo punto di vista definisce l'algoritmo di integrazione che abbiamo detto di Monte Carlo come una procedura dinamica (in un tempo proprio della simulazione numerica, tempo che può avere o meno a che fare con un vero tempo fisico).

Definiamo *l'algoritmo di Metropolis* fornendo la prescrizione per passare da una configurazione C_1 ad una configurazione C_2. Si propone in primo luogo un configurazione di prova C_T: questa configurazione può esser scelta in modo abbastanza arbitrario, sotto la condizione che l'algoritmo di scelta sia simmetrico sotto lo scambio di C_1 e C_T. Abbiamo quindi introdotto una catena di Markov con una probabilità di transizione S_{C_1,C_1} simmetrica. Tipicamente in un modello di variabili definite su un reticolo si propone il cambiamento di una singola variabile di sito. La scelta di C_T influenza l'efficienza dell'algoritmo, e la sua velocità di convergenza all'equilibrio. In modo sostanzialmente euristico è considerata una buona scelta quella di una C_T tale che la probabilità di accettazione del cambiamento (vedi il prossimo paragrafo) sia vicina ad un mezzo. Il perché è abbastanza intuitivo: sia cambiamenti grandi ma poco probabili che cambiamenti frequenti ma troppo piccoli rallentano la convergenza.

Date C_1 e C_T si calcola la variazione della funzione H che appare nell'esponenziale. Se passare da C_1 a C_T fa diminuire H si accetta il cambiamento, e si pone $C_2 = C_T$. Se invece la funzione H cresce in seguito al cambiamento non si rifiuta a priori il cambiamento, come si farebbe in una procedura di convergenza ad un minimo locale, ma si calcola il valore di

$$f = e^{-\beta(H(C_T)-H(C_1))} \ , \tag{10.24}$$

e si estrae un numero random ρ con probabilità uniforme in $(0,1)$. Se $f > \rho$ si accetta il cambiamento, e si pone $C_2 = C_T$, mentre se $f < \rho$ il cambiamento è rifiutato, e si pone $C_2 = C_1$.

È facile mostrare che quest'algoritmo soddisfa la condizione del bilancio dettagliato: se ad esempio la configurazione C_2 ha un valore di H minore che C_1 il passaggio da C_2 a C_1 avviene con certezza, mentre il passaggio inverso avviene proprio con probabilità $\exp(-\beta(H(C_1) - H(C_2)))$, e la distribuzione di Boltzmann risulta essere un punto fisso della dinamica (dato che l'algoritmo suggeritore è simmetrico sotto lo scambio di C_1 con C_2). La matrice M corrispondente (vedi sezione 10.1) è data da

$$M_{C_1,C_2} = S_{C_1,C_2} \exp(-\frac{\beta}{2}(H(C_1) - H(C_2))) \tag{10.25}$$

È interessante notare che, una volta considerata la procedura di integrazione come una dinamica che campiona in modo adeguato lo spazio delle fasi, è possibile introdurre una dinamica continua, ad esempio mediante l'equazione di Langevin, che abbiamo già discusso. In questo senso il metodo di Metropolis può esser visto come un discretizzazione estremamente astuta dell'equazione di Langevin, che pur utilizzando un passo di integrazione finito (il passo che caratterizza il cambiamento cui sottoponiamo le variabili elementari) converge al risultato esatto senza introdurre alcun errore sistematico: questo è in contrapposizione ad una discretizzazione diretta di un'equazione differenziale (e tanto più di un'equazione differenziale stocastica) dove il risultato corretto è riottenuto solo nel limite di incrementi infinitesimi. Quest'affermazione può inoltre esser resa più quantitativa mostrando che, quando si scelgano per le variabili elementari incrementi infinitesimi, l'algoritmo di Metropolis porta alla stessa equazione di Fokker-Planck ottenuta a partire dall'equazione di Langevin. Nel metodo Monte Carlo dobbiamo occuparci solo di errori statistici, che affliggono i nostri risultati solo in quanto disponiamo di una statistica finita, e che spariscono nel limite in cui il numero di passi di simulazione diverge. Questa differenza fra errore statistico ed errore sistematico, e la peculiarità in questo senso del metodo di Metropolis, sono fatti di grande importanza, ed il lettore è invitato ad un'attenta riflessione sull'argomento.

10.2.4 Il Modello di Ising

Il modello di Ising è uno dei paradigmi della Meccanica Statistica. Si tratta di un modello semplice a definirsi, ma dotato di comportamenti di alta complessità, che consente di introdurre e discutere in dettaglio idee relative alla criticità del sistema ed alle cosiddette *transizioni di fase*, dove, a partire da leggi di interazione locali, vengono sviluppati comportamenti collettivi. Il modello di Ising schematizza il comportamento di un materiale magnetico e riesce, appunto, a descrivere il meccanismo con cui un materiale si magnetizza spontaneamente, a basse temperature, anche in assenza di campo magnetico.

Definiremo qui, come esempio tipico per uno studio Monte Carlo, il modello di Ising in due dimensioni spaziali (dove cioè i nostri magnetini elementari vivono su un reticolo bidimensionale): questo modello è risolubile esattamente (al contrario del modello, fisicamente più rilevante, definito in tre dimensioni spaziali, che va studiato invece mediante metodi approssimati o, appunto, attraverso metodi di simulazione Monte Carlo). Le simulazioni Monte Carlo possono essere quindi in questo caso paragonate al risultato esatto, rendendo possibile un'analisi dettagliata del metodo (studiando ad esempio il comportamento degli errori statistici, degli effetti di volume finito, della convergenza all'equilibrio della catena di Markov delle configurazioni del sistema).

Consideriamo un reticolo quadrato di taglia lineare L e volume $V = L^2$ in $d = 2$ dimensioni: ogni sito ha $2d = 4$ primi vicini, che etichettiamo con la coppia di interi (x, y), dove $x = 0, 1, \ldots, L-1$, $y = 0, 1, \ldots, L-1$. Le variabili elementari σ (che rappresentano i magneti elementari) vivono sui siti del reticolo, e possono assumere soltanto i due valori ± 1 (magnetizzazione locale di tipo più o di tipo meno):

$$\sigma_{(x,y)} = \pm 1 \ . \tag{10.26}$$

Tipicamente il sistema viene definito con condizioni al bordo periodiche (che minimizzano gli errori sistematici dovuti alla finitezza del reticolo), anche se condizioni al bordo di tipo diverso sono assolutamente ammissibili. La funzione che definisce l'interazione fra due magneti elementari (l'energia, cioè , del sistema) è l'Hamiltoniana H

$$H \equiv - \sum_{((x_1,y_1),((x_2,y_2))} \sigma_{(x_1,y_1)} \sigma_{(x_2,y_2)} \ , \tag{10.27}$$

dove la somma corre sulle coppie di primi vicini (siti a distanza di una spaziatura reticolare) del reticolo.

A temperatura nulla il sistema non è soggetto ad agitazione termica, e si stabilizza nel suo stato di energia minima. L'energia minima si ottiene quando gli spin sono tutti paralleli, tutti con il valore $+1$ (fase di magnetizzazione positiva) o -1 (fase di magnetizzazione negativa). Invece a temperature positive non nulle il sistema viene descritto da una distribuzione di probabilità di configurazioni, che diviene più larga a temperature più alte. Se definiamo una temperatura inversa $\beta \equiv T^{-1}$ (stiamo ignorando costanti moltiplicative che poniamo ad uno) le leggi fondamentali della Meccanica Statistica ci dicono che la probabilità di una data configurazione delle variabili elementari sarà

$$P(\{\sigma\}) \simeq e^{-\beta H} \ . \tag{10.28}$$

Le grandezze macroscopiche (come la magnetizzazione o la suscettibilità del sistema) saranno espresse da valori di aspettazione $\langle\cdot\rangle$ su questa misura di probabilità, della forma

$$\langle O \rangle \equiv \sum_{\{\sigma\}} \frac{e^{-\beta H}}{Z} O(\{\sigma\}) \ , \tag{10.29}$$

dove la somma è su tutte le configurazioni possibili (sono 2^{L^2}), e la *funzione di partizione* Z è tale che $\langle 1 \rangle = 1$.

Il compito di una simulazione Monte Carlo è quindi quello di calcolare valori di aspettazione, cioè integrali del tipo (10.29).

In una simulazione realistica, su calcolatori disponibili ad oggi, i reticoli tipici hanno taglie lineari che vanno sino a L dell'ordine di 1024 (o anche di più se si cerca il record), ma per le prime prove un reticolo di taglia lineare $L = 16$ è più che sufficiente.

Il metodo di Metropolis è ovviamente molto semplice da applicare a questo modello. Gli spin vengono cambiati uno alla volta: il reticolo può essere spazzato in modo deterministico, seguendo i siti in un ordine lessicografico (in questo caso la bilancia dettagliata non è soddisfatta a livello del cambiamento della singola variabile di sito, ma è comunque soddisfatta la condizione meno stringente ma sufficiente alla convergenza della semplice *bilancia*), o scegliendo il sito da cambiare in modo uniforme con probabilità $\frac{1}{V}$ (in questo caso la bilancia dettagliata risulta soddisfatta). Scegliamo per il cambiamento la variabile di sito $\sigma_{(x,y)}$ che definiamo σ_1: la nuova variabile $\sigma_{(x,y)}$ che verrà ottenuta come risultato della procedura viene detta σ_2.

Una buona scelta del suggeritore è $\sigma_S = -\sigma_1$, simmetrica come si deve. Anche scegliere $\sigma_S = \pm 1$ con probabiltà $\frac{1}{2}$ è una scelta legittima, ma meno efficiente. Si calcola quindi

$$\Delta H = -\left(\sigma_T - \sigma_1\right) \sum{}' \sigma_{(x',y')} \ , \tag{10.30}$$

dove la somma va sui $2D = 4$ primi vicini del sito (x, y). Ora si segue la procedura detta prima: se ΔH è negativo si accetta il cambiamento, ponendo $\sigma_2 = \sigma_S$. Se invece l'energia aumenta passando al nuovo valore dello spin si calcola il fattore $f = e^{-\beta \Delta H}$, e lo si confronta con un numero random ρ estratto con probabiltà uniforme nell'intervallo $(0, 1)$. Se $f > \rho$, allora si pone $\sigma_2 = \sigma_S$, altrimenti si rifiuta la proposta di cambiamento ponendo $\sigma_2 = \sigma_1$.

È interessante notare che il carattere binario delle variabili consente la scrittura di programmi particolarmente efficienti: ad esempio non è necessario calcolare ad ogni passo la funzione esponenziale contenuta in f. Il suo esponente può in effetti prendere solo pochi diversi valori positivi (nel caso del valore zero e dei valori negativi non abbiamo bisogno di conoscere il valore dell'esponenziale), che possono essere calcolati una volta per tutti e conservati in un vettore. Inoltre, dato che le variabili elementari possono essere conservate in un solo bit, è possibile conservare in una parola di 32 bit, ad esempio, 32 copie del sistema. In questo modo è possibile calcolare insieme, sostanzialmente al costo normalmente necessario per seguire la dinamica di un solo sistema, 32 copie del sistema (metodo del *multi spin coding*).

Non è opportuno qui entrare nella discussione degli interessantissimi fenomeni fisici che avvengono in un sistema tanto semplice a definirsi. Ci basta ricordare che per un preciso valore di T (la *temperatura critica* T_c)) il sistema genera correlazioni a raggio infinito: questo ha riflessi sulla dinamica che subisce un *rallentamento critico*.

Notiamo in ultimo che l'algoritmo di Metropolis è solo uno dei vari algoritmi che possono essere usati. Nel caso del modello di Ising, ad esempio, la probabilità di una variabile di sito può essere calcolata esattamente quando gli altri spin siano fissati. Posso cioè calcolare qual'è la scelta di σ_2 che soddisfa la distribuzione di Boltzmann se gli altri spin sono già distribuiti secondo Boltzmann. Quest'algoritmo è detto del *Bagno Caldo* (perchè equivale a considerare lo spin prescelto come immerso in un bagno termico di spin vicini), e porta a scegliere il nuovo spin con

$$P(\sigma_2 = +1) = \frac{e^{-\beta \sum' \sigma}}{e^{-\beta \sum' \sigma} + e^{+\beta \sum' \sigma}} \ \ , \ P(\sigma_2 = -1) = 1 - P(\sigma_2 = +1) \ , \tag{10.31}$$

dove le somme vanno sui primi vicini dello spin considerato. L'algoritmo del Bagno Caldo ha le stesse proprietà dinamiche di quello di Metropolis.

Chapter 11

Eventi Correlati e Termodinamica

In questo capitolo ci proponiamo di studiare l'estensione dei teoremi del limite centrale e delle grandi deviazioni al caso di eventi correlati.

Considereremo all'inizio due casi concreti, le catene di Markov finite dimensionali e gli eventi ricorrenti. In ciascuno dei due casi saremo in grado di ottenere risultati espliciti dopo un lungo calcolo esatto.

Successivamente faremo vedere come lo stesso comportamento qualitativo si può ottenere da considerazioni generali sulle funzioni di correlazioni. In quest'ultimo caso sottolineremo i punti di contatto di questo problema con lo studio della meccanica statistica di un sistema nel limite termodinamico di volume infinito.

11.1 Catene di Markov Finite

Consideriamo una catena di Markov. Ci proponiamo di calcolare la distribuzione di probabilità della quantità

$$A(n) = \sum_{t=1,n} a(k_t) \tag{11.1}$$

dove $a(k)$ è una funzione definita sugli stati (k) della catena e k_t è lo stato della catena al tempo t. Supponiamo che la catena sia al tempo zero nello stato k_0.

Per calcolare questa distribuzione di probabilità conviene considerare la seguente funzione

$$F_n(z) \equiv < \exp(zA(n)) >= \sum_{k_1,k_2,...,k_n} p(k_1,k_2,...,k_n) \exp(z \sum_{t=1,n} a(k_t)). \tag{11.2}$$

Se utilizziamo la proprietà di fattorizzazione della probabilità per una catena di Markov, otteniamo che

$$p(k_1,k_2,...,k_n) = p(k_0,k_1)p(k_1,k_2)...p(k_{n-1},k_n)$$

Se introduciamo la matrice $Q(z)$

$$Q(z)_{i,k} = p(i,k) \exp(za(k)), \tag{11.3}$$

otteniamo che

$$F_n(z) = \sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n} \prod_{t=1,n} (p(k_{t-1},p_t)\exp(z\ a(k_t))) = \sum_k (Q(z)^n)_{k_0,k}\ . \tag{11.4}$$

dove abbiamo indicato con $(Q(z)^n)_{i,k}$ gli elementi di matrice della ennesima potenza della matrice Q.

L'argomento procede in maniera molto simile a quello esposto nella sezione (9.5). Consideriamo il caso di una catena con un numero finito di stati (N) e supponiamo che la matrice Q abbia N autovalori reali distinti fra di loro, che sono gli zeri del polinomio caratteristico $\det(Q(z) - \lambda)$. Introduciamo gli N autovalori a destra (d) e a sinistra (s) che soddisfano le seguenti equazioni

$$\begin{aligned} \sum_k Q_{i,k} d(j)_k &= q(j,z) d(j)_i, \\ \sum_i s(j)_i Q_{i,k} &= q(j,z) s(j)_k. \end{aligned} \tag{11.5}$$

Gli autovettori a destra sono ortogonali agli autovettori a sinistra corrispondenti ad autovalori differenti e possiamo imporre la condizione di ortonormalizzazione

$$\sum_k d(j)_k s(m)_k = \delta_{j,m}. \tag{11.6}$$

La matrice Q si può scrivere come

$$Q_{i,k} = \sum_j s(j)_i d(j)_k q(j,z). \tag{11.7}$$

Nello stesso modo otteniamo che la potenza ennesima della matrice è data da

$$(Q(z)^n)_{i,k} = \sum_j d(j)_i s(j)_k q(j,z)^n. \tag{11.8}$$

Se indichiamo con $q(1,z)$ l'autovalore in modulo più grande della matrice $Q(z)$ otteniamo che per n grande

$$(Q(z)^n)_{i,k} \approx d(1)_{k_0} \sum_k s(1)_k a(k)\ q(1,z)^n \propto q(1,z)^n = \exp(n \ln(q(1,z)). \tag{11.9}$$

purché ovviamente $\sum_k s(1)_k a(k)$ non sia zero.

Nell'ipotesi in cui gli autovalori di Q non sono degeneri in modulo i contributi degli altri autovalori sono esponenzialmente piccoli con n (vanno a zero come $|q(2,z)/q(1,z)|^n$).

Asintoticamente la distribuzione di $A(n)$ è la stessa della somma di n variabili indipendenti con la distribuzione di probabilità $\mathbf{p}(x)$:

$$\int dx \mathbf{p}(x) \exp(xz) = \exp(\ln(q(1,z))) = q(1,z). \tag{11.10}$$

Le stesse conclusioni sono valide anche in presenza di degenerazione di autovalori). Abbiamo in mano tutti gli strumenti quindi per rifare sia le dimostrazioni del teorema del limite centrale, sia del calcolo delle grandi deviazioni.

Se la catena è irriducibile, la matrice P di transizione (che coincide con $Q(z)|_{z=0}$), ha un solo autovalore uguale a 1 che nel caso aperiodico è anche l'unico autovalore di modulo 1.

Un noto teorema afferma che se una matrice è una funzione analitica di un parametro z (ovvero i suoi elementi di matrice sono funzioni analitiche di z), anche i suoi autovalori sono funzioni analitiche di z, tranne nel caso in cui due o più autovalori coincidano. Gli autovalori non coincidenti rimangono funzioni analitiche di z.

Questo teorema implica per una catena irriducibile che $q(1,z)$ è una funzione analitica di z attorno a $z=0$ ($q(1,0)=1$) e di conseguenza la distribuzione di $A(n)$ è gaussiana per grandi n (code a parte).

Notiamo che

$$\begin{aligned} \langle A\rangle &= n\frac{\partial}{\partial z}\ln(q(1,z))\Big|_{z=0} \\ \langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2 &= n\frac{\partial^2}{\partial z^2}\ln(q(1,z))\Big|_{z=0} \end{aligned} \tag{11.11}$$

Possiamo utilizzare la teoria delle perturbazioni. Nel caso di una matrice non hermitiana reale[1] H, se introduciamo la notazione

$$H|j\rangle=E(j)|j\rangle\ ,\quad \langle j|H=\langle j|E(j)\ ,\quad \langle j|l\rangle=\delta_{j,l} \tag{11.12}$$

gli autovalori ($E(j,\epsilon)$ (della matrice $H+\epsilon\Delta$ sono dati (nel caso in cui gli autovalori di H non sono degeneri) per ϵ piccolo dalla formula

$$E(j,\epsilon)=E(j)+\epsilon\langle j|\Delta|j\rangle+\epsilon^2\sum_{k\neq j}\frac{\langle j|\Delta|k\rangle\langle k|\Delta|j\rangle}{E(j)-E(k)}+O(\epsilon^3) \tag{11.13}$$

dove abbiamo usato usato la notazione di Dirac,

$$\langle j|k\rangle\equiv\sum_{a=1,N}s_a(j)d_a(k) \tag{11.14}$$

$$\langle j|\Delta|k\rangle\equiv\sum_{a,b=1,N}s_a(j)\Delta_{a,b}d_b(k) \tag{11.15}$$

e $|j\rangle$ e $E(j)$ sono gli autovettori e gli autovalori della matrice H.

Applicando la teoria delle perturbazioni in z attorno a $z=0$ per $s=1$

$$q(1,z)=1+z\langle 1|\hat a|1\rangle+\frac{1}{2}z^2\langle 1|\widehat{a^2}|1\rangle+z^2\sum_{j=2,N}\frac{q(j)\langle 1|A|j\rangle\langle j|A|1\rangle}{1-q(j)} \tag{11.16}$$

dove dove $q(j)=q(j,0)$ e le matrici $\hat a$ e $\widehat{a^2}$ hanno gli elementi di matrice dati da

$$(\hat a)_{i,k}=\delta_{i,k}a(i),\quad (\widehat{a^2})_{i,k}=\delta_{i,k}a(i)^2\ . \tag{11.17}$$

Otteniamo quindi che

$$\langle A\rangle=n\langle 1|\hat a|1\rangle=n\sum_k a(k)p^\infty(k)\ ,$$

$$\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2=n(\langle 1|\widehat{a^2}|1\rangle-\langle 1|\hat a|1\rangle^2)+2n\sum_{j=2,N}\frac{q(j)\langle 1|\hat a|j\rangle\langle j|\hat a|1\rangle}{1-q(j)}= \tag{11.18}$$

$$n(\sum_k a(k)^2p^\infty(k)-(\sum_k a(k)p^\infty(k))^2)+2n\sum_{j=2,N}\frac{q(j)\langle 1|\hat a|j\rangle\langle j|\hat a|1\rangle}{1-q(j)}\ . \tag{11.19}$$

[1]Le formule per una matrice Hermitiana sono familiari a chi ha studiato la meccanica quantistica

Si noti la presenza al denominatore del termine $1 - q(2)$ che quando $q(2)$ è molto vicino a 1 è essenzialmente l'inverso del tempo di correlazione τ. Inoltre nel caso che gli eventi sono scorrelati tutti gli autovalori $q(j)$ per $j > 1$ sono nulli , il secondo termine nell'equazione precedente è nullo (è moltiplicato per $q(j)$) e otteniamo quindi il risultato noto per eventi scorrelati.

Vedremo successivamente che lo stesso risultato si poteva ottenere direttamente senza scomodare la teoria delle perturbazioni.

Se la catena di Markov contiene un numero infinito di stati possiamo distinguere due casi. Se l'autovalore a $q = 1$ è isolato (e normalizzabile) e la funzione a soddisfa le opportune condizioni, non ci sono differenze essenziali con il caso finito dimensionale: $q(1, z)$ è una funzione analitica attorno a $z = 0$ e la distribuzione di $A(n)$ è gaussiana. Nel caso in cui l'autovalore a $q = 1$ non è isolato, possiamo avere dei comportamenti molto diversi e la distribuzione di $A(n)$ può essere molto diversa da una gaussiana.

11.2 Eventi ricorrenti

In questa sezione ci proponiamo di calcolare la distribuzione di probabilità della variabile $K(n)$ che è uguale al numero di eventi che sono avvenuti nei primi n passi origine esclusa.

Per prima cosa ci proponiamo di calcolarne il valor medio e la varianza. A questo scopo introduciamo una funzione (contatore) $\epsilon(t)$ che vale 1 se l'evento è presente al tempo t e vale zero altrimenti. Si ha che

$$K(n) = \sum_{t=1,n} \epsilon(t). \tag{11.20}$$

Possiamo scrivere che

$$< K(n) >=< \sum_{t=1,n} \epsilon(t) >= \sum_{t=1,n} p(t), \tag{11.21}$$

in quanto $< \epsilon(t) >$ è proprio la probabilità che l'evento si verifichi al tempo t. Nello stesso modo otteniamo che

$$< K^2(n) >=< \sum_{t_1=1,n;t_2=1,n} \epsilon(t_1)\epsilon(t_2) >= \sum_{t_1=1,n;t_2=1,n} p(t_1, t_2), \tag{11.22}$$

dove $p(t_1, t_2)$ è la probabilità che l'evento si verifichi sia al tempo t_1 che t_2 (abbiamo usato la proprietà $\epsilon(t)^2 = \epsilon(t)$).

Quando i tempi sono uguali, $p(t, t)$ coincide con $p(t)$ mentre per tempi differenti possiamo usare la espressione fondamentale per eventi ricorrenti

$$\begin{aligned} p(t_1, t_2) = p(t_1) \quad &\text{per} \quad t_1 = t_2, \\ p(t_1, t_2) = p(t_1)p(t_2 - t_1) \quad &\text{per} \quad t_1 \neq t_2 \;\text{ e }\; t_2 > t_1. \end{aligned} \tag{11.23}$$

Si ottiene che

$$< K^2(n) >= \sum_{t=1,n} p(t) + 2 \sum_{1 \le t_1 < t_2 \le n} p(t_1)p(t_2 - t_1), \tag{11.24}$$

dove il fattore 2 deriva che abbiamo considerato solo uno dei due possibili ordinamenti dei tempi.

Se per comodità assumiamo convenzionalmente che $p(0) = 0$ (non 1 come avevamo fatto in passato) possiamo riscrivere il secondo termine dell'equazione precedente sotto forma di convoluzione.

$$2 \sum_{1 \le t_1 \le t_2 \le n} p(t_1)p(t_2 - t_1) \ , \tag{11.25}$$

fatto che ci sarà utile in seguito. Introduciamo la funzione generatrice delle $p(n)$ modificate assumendo $p(0) = 0$:

$$P(s) \equiv \sum_{n=1,\infty} p(n)n^s \tag{11.26}$$

Questa funzione $P(s)$ differisce di 1 (il termine a $n = 0$) dalla definizione che avevamo dato precedentemente[2] ed è data da

$$P(s) = \frac{F(s)}{1 - F(s)}. \tag{11.27}$$

Assumiamo che il limite di $p(t)$ esista quando $t \to \infty$ e che la funzione $F(s)$ sia sufficientemente regolare attorno a $s = 1$. In questo caso possiamo scrivere che

$$p(t) = p_\infty + g(t) \tag{11.28}$$

dove le $g(t)$ vanno a zero velocemente quando $t \to \infty$. Introduciamo la funzione $G(s)$, definita da

$$G(s) \equiv \sum_{n=1,\infty} g(n)s^n. \tag{11.29}$$

La funzione $G(s)$ è regolare attorno a $s = 1$:

$$P(s) = \frac{p_\infty s}{1 - s} + G(s) \approx_{s\approx 1} \frac{p_\infty}{1 - s} + G(1) - p_\infty. \tag{11.30}$$

Un semplice calcolo mostra che per grande n, abbiamo che

$$< K(n) >= p_\infty n + \sum_{t=1,n} g(n) \approx p_\infty n + \sum_{t=1,\infty} g(n) = p_\infty n + G(1). \tag{11.31}$$

Possiamo ottenere lo stesso risultato osservando preliminarmente che la funzione generatrice di

$$a(n) = \sum_{t=0,n} b(t) \tag{11.32}$$

è data da

$$A(s) = (1 - s)^{-1} B(s) \tag{11.33}$$

Infatti posso scrivere

$$a(n) = \sum_{t=0,n} b(t)i(n - t) = \sum_{t=0,\infty} b(t)i(n - t) \tag{11.34}$$

dove $i(n) = 1$. La formula precedente nel caso degli integrali corrisponde a scrivere $\int_0^y dx f(x) = \int_0^\infty dx f(x)\theta(x - y)$. Utilizzando il fatto che la funzione generatrice delle $i(n)$ è $(1 - s)^{-1}$ e la formula nota per le convoluzioni si ottiene il risultato eq. (11.33) .

Definiano

$$K_1(s) = \sum_{n=1,\infty} s^n < K(n) > . \tag{11.35}$$

Si ha che

$$K_1(s) = (1 - s)^{-1} P(s) \approx_{s\approx 1} \frac{p_\infty}{(1 - s)^2} + \frac{G(1) - p_\infty}{1 - s} + O(1) \tag{11.36}$$

[2]È un abuso di notazione usare lo stesso nome per funzioni differenti, ma in questo caso non dovrebbe dare adito a confusioni.

Dato che il comportamento per $s \approx 1$ è dominato dai contributi a grande n e che

$$\frac{1}{(1-s)^2} = \sum_{n=0,\infty} s^n(n+1) \tag{11.37}$$

si riottiene la formula eq. (11.31) .

Nello stesso modo definiano

$$B(s) = \sum_{n=1,\infty} s^n < K(n)^2 > . \tag{11.38}$$

Utilizzando la struttura a convoluzione nel lato destro della formula eq. (11.24) otteniamo che

$$B(s) = (1-s)^{-1}(P(s) + 2P(s)^2). \tag{11.39}$$

Il primo termine è già stato stimato. Per il secondo termine abbiamo che per s vicino a 1

$$(1-s)^{-1}P(s)^2 \approx \frac{p_\infty^2}{(1-s)^3} + \frac{2G(1)p_\infty - 2p_\infty^2}{(1-s)^2} + O((1-s)^{-1}). \tag{11.40}$$

Se ci ricordiamo che

$$\frac{1}{(1-s)^3} = \sum_{n=0,\infty} s^n \frac{(n+1)(n+2)}{2} \tag{11.41}$$

e conserviamo solo i termini di ordine n^2 e di ordine n, otteniamo che

$$< K(n)^2 > \approx p_\infty n + p_\infty^2(n^2 + 3n) + 4n(G(1)p_\infty - p_\infty^2). \tag{11.42}$$

Raggruppando il tutto nel limite di n grandi si ottiene che il valor medio della frequenza $K(n)/n$ è dato da p_∞ e che la varianza quadra della frequenza è proporzionale a $1/n$. Più precisamente si ottiene che per n tende ad infinito:

$$\frac{< K^2(n) > - < K(n) >^2}{n} \approx p_\infty(1-p_\infty) + 2p_\infty G(1). \tag{11.43}$$

Il primo termine è presente anche nel caso di eventi scorrelati, mentre l'effetto delle correlazioni si manifesta nel secondo termine.

Ci proponiamo di dimostrare che per n grandi la distribuzione delle $K(n)$ è Gaussiana e ottenere, quando possibile, le formule per le grandi deviazioni. La dimostrazione completa è complicata e accenneremo solo ai punti salienti. Il metodo più semplice consiste nel verificare che i momenti sono quelli di una distribuzione gaussiana.

La formula di partenza è (per esempio per il quarto momento)

$$< K^4(n) > = \sum_{t_1,t_2,t_3,t_4=1,n} p(t_1,t_2,t_3,t_4). \tag{11.44}$$

Questa formula si può semplificare osservando che

$$< K(n)(K(n)-1)(K(n)-2)(K(n)-3) > = \sum_{t_1,t_2,t_3,t_4=1,n}^{D} p(t_1,t_2,t_3,t_4) \tag{11.45}$$

dove $\sum^D$ è la somma ristretta al caso in cui tutti i tempi sono differenti. Utilizzando questo piccolo, ma utile, teorema (che non dimostriamo in dettaglio) [3] possiamo scrivere che

$$< K(n)(K(n)-1)(K(n)-2)(K(n)-3) >= 4! \sum_{t_1<t_2<t_3<t_4<n} p(t_1,t_2,t_3,t_4) = \\ 4! \sum_{t_1<t_2<t_3<t_4<n} p(t_1)p(t_2-t_1)p(t_3-t_2)p(t_4-t_3). \tag{11.46}$$

Si ottiene che la funzione

$$K_4(s) \equiv \sum_{n=1,\infty} < K(n)(K(n)-1)(K(n)-2)(K(n)-3) > s^n, \tag{11.47}$$

è data da $4!P(s)^4/(1-s)$. Infatti possiamo scrivere che

$$\sum_{t_1<t_2<t_3<t_4<n} p(t_1)p(t_2-t_1)p(t_3-t_2)p(t_4-t_3) = \\ \sum_{t_4=1,n} \sum_{t_1<t_2<t_3<t_4} p(t_1)p(t_2-t_1)p(t_3-t_2)p(t_4-t_3). \tag{11.48}$$

Il funzionale generante corrispondente a $\sum_{t_1<t_2<t_3} p(t_1)p(t_2-t_1)p(t_3-t_2)p(t_4-t_3)$ è

$$P(s)^4 = \sum_{t_1<t_2<t_3<t_4} p(t_1)p(t_2-t_1)p(t_3-t_2)p(t_4-t_3)s^{t_4} \ . \tag{11.49}$$

Nello stesso modo si ottiene che

$$\hat{K}_m(s) \equiv \sum_{n=1,\infty} K_m(n)s^n = \frac{m!P(s)^m}{(1-s)}, \\ K_m(n) = \langle K(n)(K(n)-1)...(K(n)-m+1)\rangle \tag{11.50}$$

Introduciamo a questo punto una variabile ρ e definiamo le funzioni

$$r(\rho,n) =< \rho^{K(n)} >, \\ R(\rho,s) = \sum_{n=1,\infty} r(\rho,n)s^n. \tag{11.51}$$

Per m positivo si ha che

$$\left.\frac{\partial^m R(\rho,s)}{\partial\rho^m}\right|_{\rho=1} = \hat{K}_m(s). \tag{11.52}$$

La formula precedente di può dimostrare direttamente a partire dalla definizione di R ed effettuando le derivate o a partire dallo formula di Newton:

$$\langle\rho^{K(n)}\rangle = \sum_m \frac{K_m(n)}{m!}(\rho-1)^s \tag{11.53}$$

[3] La dimostrazione della formula eq. (11.45) si può fare in tre passi.

- Scrivendo le formule per i momenti di $K(n)$ fino al quarto si ottiene che il lato destro dell'eq. (11.45) deve essere uguale al valore di aspettazione di un polinomio di quarto ordine (con termine di grado zero assente) nella variabile $K(n)$.
- L'equazione è evidentemente vera per $n = 1,2,3$ in quanto entrambi i lati sono nulli e un semplice calcolo mostra che è vera anche per $n = 4$.
- Le condizioni precedenti fissano il polinomio in maniera non ambigua.

L'argomento si può facilmente generalizzare al caso generale.

Utilizzando lo sviluppo in serie di Taylor attorno al punto $\rho = 1$ si ottiene che

$$R(\rho, s) = \frac{1}{(1-s)(1-(\rho-1)P(s))} = \frac{1-F(s)}{1-s}(1-\rho F(s))^{-1}. \tag{11.54}$$

Il polo fisso a $s = 1$ è cancellato dallo zero del numeratore ($F(1) = 1$).

Un'analisi dettagliata (vedi appendice) mostra che il comportamento per grandi n di $r(\rho, n)$ è connesso ai poli in s della funzione $R(\rho, s)$. In particolare il termine dominante per grandi valori di n determina la forma della singolarità più vicina all'origine.

Consideriamo per semplicità la posizione del polo sull asse reale positivo più vicino all'origine; è facile vedere che se la funzione $R(\rho, s)$ ha un polo semplice a $s = s_0(\rho)$ con residuo $a(\rho)$ il comportamento per grandi n è della forma

$$r(\rho, n) \propto a(\rho)s_0(\rho)^n. \tag{11.55}$$

Se $\rho \geq 1$ il valore di $s_0(\rho)$ si può trovare risolvendo l'equazione

$$\rho F(s) = 1 \ , \tag{11.56}$$

equazione che per eventi ricorrenti ergodici ($F(1) = 1$) ha una e una sola soluzione per s positivo minore di 1, dove la serie che definisce la funzione $F(s)$ è convergente. L'equazione precedente potrebbe avere anche altre soluzioni per s complesso, ma è facile vedere che nel caso di eventi aperiodici la soluzione dell'equazione sull'asse reale positivo è più vicina all'origine di altre eventuali soluzioni complesse o sull'asse reale negative (il ragionamento è lo stesso usato in precedenza nella sezione 8.3.3).

Otteniamo che per grandi n

$$< \rho^{K(n)} > \propto s_0(\rho)^n. \tag{11.57}$$

Abbiamo quindi dimostrato la stima fondamentale che ci permette di calcolare la distribuzione di probabilità delle grandi deviazioni e di dimostrare il teorema del limite centrale. Notiamo tuttavia che se la funzione $F(s)$ non è analitica intorno a $s = 1$ con questo metodo nel caso delle grandi deviazioni si ottengono formule del tipo

$$P(K(n)) \propto \exp(nS(K(n)) \tag{11.58}$$

solo nella regione $K(n) \geq p_\infty$ che corrisponde a $\rho > 1$. Lo studio in generale delle grandi deviazioni in tutta la zona $0 < K(n) < p_\infty$ e abbastanza complicato e non verrà affrontato.

Notiamo *en passant* che le formule precedenti si possono riscrivere come

$$< \exp(K(n)z) > \propto \exp(nQ(z)). \tag{11.59}$$

dove

$$z = \ln(\rho) \quad \text{ e } \quad Q(z) = \ln\left(s_0(\exp(z))\right). \tag{11.60}$$

In altri termini se esiste (cosa non evidente in generale) di probabilità $\mathbf{p}(x)$ tale che

$$\int dx \mathbf{p}(x) \exp(xz) = \exp(Q(z)). \tag{11.61}$$

la distribuzione di probabilità della variabile $K(n)$ è la stessa di quella della somma di n variabili indipendenti con distribuzione di probabilità $\mathbf{p}(x)$.

Se $s_0(\rho)$ (e di conseguenza $Q(z)$) è differenziabile due volte attorno a $\rho = 1$, (e sia p_∞ che $G(1)$ sono finiti) la distribuzione di $K(n)$ è Gaussiana; la larghezza della gaussiana è data da

$$\left(n \frac{d^2Q}{dz^2}\bigg|_{z=1} \right)^{1/2} . \tag{11.62}$$

In questo caso le formule precedenti ci permettono di studiare anche le grandi deviazioni. Al contrario, se la funzione $F(\rho)$ non è analitica attorno a $\rho = 1$, ed in particolare non è differenziabile due volte, la distribuzione di probabilità non sarà Gaussiana e sarà per esempio simile a quella della somma di variabili indipendenti con una coda di probabilità a potenza.

11.3 Funzioni di correlazioni connesse

11.3.1 Definizione

Consideriamo un insieme di variabili A_i, con $i = 1, N$. Definiamo i momenti di queste variabili rispetto ad una distribuzione di probabilità come

$$M(n) =< \prod_{i=1,N} A_i^{n_i} >, \tag{11.63}$$

dove gli n_i sono dei numeri interi positivi o nulli.

In letteratura questi momenti vengono chiamati funzioni di correlazione. Il nome è parzialmente abusivo in quanto il loro valore non è un indicatore immediato della correlazione esistente tra queste variabili (ques'indicatore è in realtà fornito dalle funzioni di correlazione connesse). La quantità $R = \sum_{i=1,N} n_i$ è l'ordine della funzione di correlazione.

Consideriamo infatti il caso in cui compaiono solo due variabili ($R = 2$). Possiamo definire una matrice

$$M_{i,k} =< A_i A_k > . \tag{11.64}$$

Le correlazioni tra le variabili sono evidenziate della matrice di covarianza:

$$C_{i,k} =< A_i A_k > - < A_i >< A_k > . \tag{11.65}$$

L'elemento i, k della matrice di covarianza è infatti zero se le variabili A_i e A_k sono scorrelate.

Le funzioni di correlazioni connesse sono la generalizzazione ai momenti superiori delle matrice di covarianza. Esse sono costruite in maniera tale che non appena la distribuzione di probabilità è fattorizzata, ovvero ci sono delle variabili che sono indipendenti dalle altre, la funzione di correlazione connessa è uguale a zero.

Vediamo le prime definizioni per gli ordini più bassi:

$$\begin{aligned} < A_i > &=< A_i >_c \\ < A_i A_k > &=< A_i A_k >_c + < A_i >< A_k > . \end{aligned} \tag{11.66}$$

La seconda equazione si può anche riscrivere come:

$$< A_i A_k >_c =< A_i A_k > - < A_i >< A_k > = \langle (A_i - \langle A_i \rangle)(A_k - \langle A_k \rangle) \rangle \tag{11.67}$$

La funzione di correlazione connessa di due variabili coincide con la matrice di covarianza.

La funzione di correlazione di connessa di tre variabili è data da

$$
\begin{aligned}
< A_i A_j A_k >=< A_i A_j A_k >_c + \\
< A_i A_j >_c < A_k >_c + < A_i A_k >_c < A_j >_c + < A_k A_j >_c < A_i >_c + \\
< A_i >_c < A_j >_c < A_k >_c
\end{aligned}
\tag{11.68}
$$

la formula precedente si può anche riscrivere come

$$
< A_i A_j A_k >_c = \langle (A_i - \langle A_i \rangle)(A_j - \langle A_j \rangle)(A_k - \langle A_k \rangle) \rangle \tag{11.69}
$$

In generale la formula che definisce la funzione di correlazione connessa permette di scrivere la funzione di correlazione come somma e prodotti di funzioni di correlazioni connesse ed ha la seguente struttura:

$$
< \prod_{i=1,N} A_i^{n_i} >=< \prod_{i=1,N} A_i^{n_i} >_c + \ldots , \tag{11.70}
$$

dove i puntini sono somme e prodotti di funzioni di correlazioni connesse di ordine meno elevato.

Per esempio nel caso di quattro quantità con valor medio nullo l'espressione è più complicata di quella che abbiamo per gli ordini precedenti (ovvero 2 e 3). Si ha infatti che

$$
\begin{aligned}
< ABCD >= \\
< ABCD >_c + < AB >_c < CD >_c + < AC >_c < BD >_c + < AD >_c < BD >_c
\end{aligned}
\tag{11.71}
$$

In questo caso è facile vedere che se la distribuzione di probabilità si fattorizza in un prodotto, per esempio

$$
P(A, B, C, D) = P(A, B)P(C, D), \tag{11.72}
$$

la funzione di correlazione connessa è uguale a zero. Infatti in questo caso abbiamo che $\langle ABCD \rangle = \langle AB \rangle \langle CD \rangle$.

Dalle definizioni precedenti seguono immediatamente le relazioni seguenti

$$
\langle A^2 \rangle_c = \sigma^2 \quad \langle A^2 \rangle_c = \sigma^3 S \quad \langle A^2 \rangle_c = \sigma^4 (K - 3) \tag{11.73}
$$

dove S e K sono rispettivamente la torsione e la kurtosis.

Vedremo nella sezione successiva come è possibile definire le funzioni di correlazioni connesse di ordine arbitrario in maniera tale esse siano zero non appena ci sono delle variabili che sono indipendenti dalle altre.

11.3.2 Funzione generatrice

Una relazione molto importante lega la funzione generatrice delle funzioni di correlazione alla funzione di generatrice delle funzioni di correlazione connesse. Questa relazione ci permetterà di definire le funzioni di correlazioni di ordine superiore al quarto. Per prima cosa dobbiamo introdurre la funzione generatrice in N variabili che è un'estensione naturale della funzione generatrice in una singola variabile che avevamo visto precedentemente.

Definiamo la funzione generatrice delle funzioni di correlazione come

$$
G(\mathbf{z}) \equiv < \exp(\sum_{i=1,N} z_i A_i) >= \prod_{i=1,N} \left(\sum_{n_i=0,\infty} \frac{z_i^{n_i}}{n_i!} \langle A_i^{n_i} \rangle \right) . \tag{11.74}
$$

Alternativamente possiamo definire $G(\mathbf{z})$ a partire dalle sue derivate all'origine:

$$< \prod_{i=1,N} A_i^{n_i} >= \prod_{i=1,N} \frac{\partial^{n_i}}{(\partial z_i)^{n_i}} G(\mathbf{z})\Big|_{\mathbf{z}=0} \tag{11.75}$$

Esiste quindi una corrispondenza biunivoca tra gli insiemi di tutte le funzioni di correlazione di N variabili casuali (supponendo che non crescano troppo rapidamente con l'ordine) e le funzioni di N variabili analitiche intorno all'origine.

Nello stesso modo definiamo la funzione generatrice delle funzioni di correlazione connessa come

$$\begin{aligned} C(\mathbf{z}) &= \prod_{i=1,N} (\sum_{n_i=0,\infty} \frac{z_i^{n_i}}{n_i!}) < \prod_{i=1,N} A_i^{n_i} >_c \ , \\ \langle \prod_{i=1,N} A_i^{n_i} \rangle_c &= \prod_{i=1,N} \frac{\partial^{n_i}}{(\partial z_i)^{n_i}} C(\mathbf{z})\Big|_{\mathbf{z}=0} \ , \end{aligned} \tag{11.76}$$

dove convenzionalmente si pone $< 1 >= 0$ o equivalentemente si esclude della somma il termine con tutte le n uguali a zero.

Un teorema che dimostreremo tra poco afferma che le due funzioni generatrici sono connesse dall'importante relazione

$$G(\mathbf{z}) = \exp(C(\mathbf{z})). \tag{11.77}$$

In altri termini questo teorema afferma che se prendiamo la formula eq. (11.77) come definizione di funzione di correlazione connesse, queste funzioni soddisfano la proprietà di essere nulle nel caso di variabili indipendenti. Infatti è immediato inoltre verificare che se le variabili si possono dividere in in due gruppi di variabili non correlate le funzione di correlazioni connesse (tra queste variabili) sono nulle.

È immediato inoltre verificare che se le variabili si possono dividere in in due gruppi di variabili non correlate le funzione di correlazioni connesse (tra queste variabili sono nulle.

Più precisamente consideriamo il caso in cui le variabili si possono dividere in due gruppi per $i \leq K$ (che indicheremo con A^1) ed $i > K$ (che indicheremo con A^2) tali che la probabilità $P(A)$ si fattorizza nel prodotto $P_1(A^1)P_2(A^2)$. La fattorizzazione delle probabilità implica banalmente che che

$$\begin{aligned} G(\mathbf{z}) &= G_1(\mathbf{z}^1)G_2(\mathbf{z}^2) \\ C(\mathbf{z}) &= C_1(\mathbf{z}^1) + C_2(\mathbf{z}^2), \end{aligned} \tag{11.78}$$

dove anche le funzioni G_1 e G_2 (come d'altronde le funzioni C_1 e C_2) dipendono rispettivamente dal primo ($\mathbf{z}^1$) e dal secondo ($\mathbf{z}^2$) gruppo di variabili ($\mathbf{z}^1$ è l'insieme delle variabili z con $i \leq K$).

La funzione generatrice delle funzione di correlazioni connesse non contiene prodotti delle variabili z appartenenti ai due gruppi diversi e quindi le funzioni di correlazione connesse di variabili dei due gruppi sono uguali a zero. Resterebbe da dimostrare che la definizione di funzione di correlazioni connesse che abbiamo scelto è unica, ma è meglio non affrontare quest'argomento troppo tecnico.

È concettualmente facile, ma un poco laborioso verificare che le formule sulle funzioni di correlazioni di ordine inferiore o uguale a 4, che abbiamo visto nella sezione precedente sono conseguenza della formula eq. (11.77) .

Un'altra proprietà importante è che le funzioni di correlazione connesse di ordine superiore al secondo sono nulle per una distribuzione di probabilità gaussiana.

Infatti la funzione generatrice di quantità (per semplicità a media zero) distribuite Gaussianamente è data da

$$G(\mathbf{z}) = \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{i,k=1,N} C_{i,k} z_i z_k\right) \tag{11.79}$$

dove C è come al solito la matrice di covarianza. Si ottiene che

$$C(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}\sum_{i,k=1,N} C_{i,k} z_i z_k \tag{11.80}$$

e le funzioni di correlazione connesse di ordine superiore sono nulle.

Nel caso di una singola variabile la funzione generatrice delle funzioni di correlazioni connesse è data da

$$C(z) = \ln\left(\int dx P(x)\exp(zx)\right), \tag{11.81}$$

funzione che abbiamo già incontrato ed ha un ruolo estremamente importante nella dimostrazione del teorema del limite centrale e nello studio delle grandi deviazioni. Per z piccolo abbiamo che

$$C(z) = z\langle x\rangle + z^2\frac{1}{2}\sigma^2 + z^3\frac{1}{6}S\sigma^3 + z^4\frac{K-3}{24}\sigma^4 + O(z^5)\ . \tag{11.82}$$

11.4 Teorema del limite centrale per eventi correlati

Possiamo dimostrare un teorema che generalizza il teorema del limite centrale e permette di ottenere delle stime di grandi deviazioni per insiemi di variabili correlate.

Supponiamo di considerare una sequenza infinita di variabili a_i con $i = -\infty, \infty$ tale che le funzioni di correlazioni dipendondo solo dalla differenza degli indici [4]. Per esempio $< a_i >$ non dipende da i e

$$< a_i a_k >= f(i-k), \quad < a_i a_k >_c = c(i-k)\ . \tag{11.83}$$

In altri termini supponiamo che la distribuzione di probabilità sia invariante per traslazioni, ovvero se definiamo $b_i = a_{i+m}$ la probabilità della successione b è la stessa della successione a per qualsiasi valore di m.

Vogliamo stimare la distribuzione di probabilità di

$$A(L) \equiv \sum_{i=1,L} a_i. \tag{11.84}$$

Supponiamo che il sistema soddisfa la cosiddetta proprietà di decomposizione in blocchi (*clustering decomposition*) che afferma che le funzioni di correlazione connesse vanno a zero quando i punti da cui dipendono si possono dividere in due blocchi la cui distanza tende ad infinito. Per esempio

$$\begin{aligned} \lim_{k\to\infty} < a_i a_k >_c = \lim_{k\to\infty} < a_i a_j a_k >_c = \lim_{k\to\infty} < a_i a_j a_l a_k >_c = 0 \\ \lim_{k\to\infty} < a_i a_j a_k a_{k+l} >_c = 0 \end{aligned} \tag{11.85}$$

[4] Questa condizione non è necessaria è può essere sostituita da una molto più debole. Per brevità non discuteremo questa problematica.

La proprietà di decomposizione in blocchi si può anche enunciare affermando che nel limite considerato le funzioni di correlazioni si fattorizzano nel prodotto delle funzioni di correlazioni in ciascuno blocco. In altri termini per k grande richiediamo che

$$\begin{aligned} &< a_i a_k > \approx < a_i >< a_k >, \\ &< a_i a_j a_k a_{k+l} > \approx < a_i a_j >< a_k a_{k+l} > . \end{aligned} \tag{11.86}$$

La proprietà di decomposizione in blocchi formalizza l'affermazione che variabili che dipendono da punti distanti sono scorrelate.

Per ottenere il risultato voluto (la distribuzione gaussiana di $A(L)$), è necessario supporre che questi limiti vengano aggiunti molto velocemente, per esempio esponenzialmente, in maniera tale che le funzioni di correlazione connesse siano molto piccole quando i punti si possono dividere in blocchi differenti.

Consideriamo la funzione generatrice della quantità $A(L)$ definita come

$$\langle \exp(zA(L)) \rangle = \langle \exp\left(\sum_{i=1,L} z a_i\right) \rangle \equiv G(L,z) \tag{11.87}$$

dove per $G(L,z)$ indichiamo la funzione generatrice $G(\mathbf{z})$, calcolata nel punto dove $z_i = z$ per $1 \le i \le N$ e $z_i = 0$ quando i non soddisfa la relazione precedente.

Il teorema della sottosezione precedente ci permette di scrivere

$$\langle \exp(za(L)) \rangle = \exp(C(L,z)) = \exp\left(\sum_{k=0,\infty} \frac{z^k}{k!} (\prod_{l=1,k} \sum_{i_l=1,L}) < \prod_{l=1,k} a_{i_l} >_c \right) \ . \tag{11.88}$$

Il coefficiente di z^k è quindi dato dalla somma di funzioni di correlazione connesse di ordine k. La formula precedente è stata derivata usando direttamente la definizione di funzione di correlazione connessa.

Se ci fermiamo all'ordine z^2 otteniamo che

$$C(L,z) = zL < a > + \frac{z^2}{2} \sum_{i,l=1,L} < a_i a_l >_) \tag{11.89}$$

Quando la funzione di correlazione connessa $c(i)$ va a zero abbastanza velocemente quando $i \to \infty$, se trascuriamo termini di ordine 1 per L grande, otteniano che

$$\begin{aligned} C(L,z) = (L(z < a > + \frac{z^2}{2} \sum_{i=-\infty,\infty} c(i)) + O(1) = \\ L(z < a > + \frac{z^2}{2} \sum_{i=-\infty,\infty} \langle a_i a_0 \rangle_c) + O(1) \end{aligned} \tag{11.90}$$

Infatti abbiamo che

$$\sum_{i,l=1,L} c(i-l) = \sum_{i=1,L} \left(\sum l = -\infty, \infty - \sum l = -\infty, 0 - \sum l = L+1, \infty \right) c(i-l) \tag{11.91}$$

La prima sommatoria ci da esattamente $L \sum_{i=-\infty,\infty} c(i)$. Le ultime due sommatorie sono quantità di ordine 1 quanto $L \to \infty$ se la funzione di correlazione $c(i)$ scende abbastanza velocemente quando $i \to \infty$. Prendiamo in esame l'ultimo termine. Esso può essere riscritto come

$$\sum_{i=1,\infty; l=-\infty,0} c(i-l) - \sum_{i=L+1,\infty; l=-\infty,0} c(i-l) \ . \tag{11.92}$$

Per grandi valori di L il secondo termine fa zero (se $c(i)$ va a zero più velocemente di i^{-2} mentre il primo termine è può essere riscritto come

$$\sum_{d=1,\infty} d\ c(d) \tag{11.93}$$

e anche quest'ultima somma converge se la funzione $c(d)$ va a zero sufficientemente velocemente. La stessa argomentazione può essere fatta per l'ultimo termine che risulta essere uguale al penultimo termine.

Possiamo fare lo stesso ragionamento per gli ordini superiori. Otteniamo:

$$\ln(< \exp(za(L)) >) = c(L,z) = \exp(Lh(z) + O(1)) \tag{11.94}$$

dove la funzione $h(z)$ si può scrivere formalmente come

$$h(z) = \sum_{k=0,\infty} \frac{z^k}{k!} h_k$$
$$h_k = \prod_{l=1,k-1} (\sum_{i_l=1,L}) \langle a_0 \prod_{l=1,k-1} a_{i_l} \rangle_c . \tag{11.95}$$

La somma sui punti è convergente a causa della decrescita veloce delle funzioni di correlazione. Nella definizione della funzione $h(z)$ il raggio di convergenza della serie non è evidente. Nella maggior parte dei casi la serie ha un raggio di convergenza finito, ma è possibile costruire dei casi in cui il raggio di convergenza è zero.

Inoltre sono possibili anche comportamenti anomali della funzione $h(z)$, per esempio discontinuità.

Possiamo usare gli argomenti standard per dimostrare che distribuzione di probabilità della quantità $A(L)/L$ diventa per L grande una gaussiana con valor medio h_1 e varianza h_2/L. Lo studio delle grandi deviazioni può essere fatto considerando le proprietà dettagliate della funzione $h(z)$.

11.4.1 Eventi ricorrenti e catene di Markov rivisti

Supponiamo che l'evento iniziale avvenga al tempo T e consideriamo il limite per $T \to -\infty$. Nell'ipotesi di eventi non periodici con $p_\infty \neq 0$ otteniamo che

$$< \epsilon_i >= p_\infty \tag{11.96}$$

È facile verificare che la funzione di correlazione di due ϵ è data da

$$< \epsilon(i)\epsilon(j) >= (p_\infty - p_\infty^2)\delta_{i,j} + p_\infty^2 + p_\infty g(|i-j|), \tag{11.97}$$

in quanto

$$< \epsilon(i)^2 >=< \epsilon(i) >= p_\infty \tag{11.98}$$

La funzione di correlazione connessa è data da

$$< \epsilon(i)\epsilon(j) >_c = (p_\infty - p_\infty^2)\delta_{i,j} + p_\infty g(|i-j|) \tag{11.99}$$

Possiamo usare questa espressione della funzione di correlazione connessa per calcolare il coefficiente h_2 di $z^2/2$ nella funzione generatrice definita in (11.95). Si ottiene che:

$$h_2 = \sum_{i=-\infty,\infty} ((p_\infty - p_\infty^2)\delta_{i,0} + p_\infty g(|i|)) = p_\infty - p_\infty^2 + 2p_\infty \sum_{i=1,\infty} g(i) = p_\infty - p_\infty^2 + 2p_\infty G(1). \quad (11.100)$$

Si noti che il termine $p_\infty - p_\infty^2$ è il risultato atteso in caso di eventi ricorrenti scorrelati (ovvero per una distribuzione di Bernoulli) e il termine $2p_\infty G(1)$ tiene conto delle correlazioni, e può essere sia positivo che negativo.

Per dimostrare che la distribuzione di probabilità di $A(L)$ è gaussiana per L grandi (ed eventualmente ottenere risultati sulle grandi deviazioni) dobbiamo dimostrare che le funzioni di correlazioni connesse vanno a zero a grande distanza sufficientemente velocemente. A questo scopo ci possiamo limitare a dimostrare che le funzioni di correlazione si fattorizzano a grandi distanze e che

$$\lim_{k\to\infty} < \prod_{j=1,N} \epsilon_{i_j} \prod_{j=1,M} \epsilon_{l_j+k} > - < \prod_{j=1,N} \epsilon_{i_j} >< \prod_{j=1,M} \epsilon_{l_j+k} >= 0 \quad (11.101)$$

Senza perdita di generalità possiamo considerare due sequenze i_j e l_j strettamente monotone crescenti. Per k sufficientemente grande avremo che $i_N < l_1 + k$ e la quantità che ci interessa può scriversi come

$$\begin{aligned} p_\infty \prod_{j=2,N} (p(i_j - i_{j-1}))\, p(l_1 + k - i_N) \prod_{j=1,M} (p(l_j - l_{j-1})) - \\ p_\infty \prod_{j=2,N} (p(i_j - i_{j-1}))\, p_\infty \prod_{j=1,M} (p(l_j - l_{j-1})) = \\ p_\infty \prod_{j=2,N} (p(i_j - i_{j-1})) \prod_{j=1,M} (p(l_j - l_{j-1}))\, (p(l_1 + k - i_N) - p_\infty) \end{aligned} \quad (11.102)$$

Se il limite asintotico per $p(k)$ viene raggiunto abbastanza velocemente, le funzioni di correlazione connesse scendono a zero nello stesso modo.

Possiamo fare esattamente lo stesso argomento nel caso di catena di Markov aperiodica irriducibile con un numero finito di stati. In questo caso troviamo che la quantità

$$< \prod_{j=1,N} a_{i_j} \prod_{j=1,M} a_{l_j+k} > - < \prod_{j=1,N} a_{i_j} >< \prod_{j=1,M} a_{l_j+k} > \quad (11.103)$$

va a zero esponenzialmente ed è proporzionale a $q(2)^k$, dove $q(2)$ è il secondo autovalore (in modulo) della matrice di transizione e quindi le funzioni di correlazione vanno a zero esponenzialmente.

Possiamo facilmente fare il conto di h_2 usando la definizione eq. (11.95). Sempre nell'ipotesi che si sia partiti ad un tempo T fortemente negativo, la probabilità di avere l'evento i al tempo zero è data da

$$s(1)_i \quad (11.104)$$

mentre la probabilità di avere l'evento i al tempo zero e l'evento k al tempo n, è data da

$$R_{i,k}^n = s(1)_i P_{i,k}^{(n)} \quad (11.105)$$

Abbiamo quindi

$$\langle a(k_0) \rangle = \langle a(k_n) \rangle = \left(\sum_i s(1)_i a_i d(1)_i \right) = \langle 1|\hat{a}|1 \rangle \ . \quad (11.106)$$

dove abbiamo sfruttano il fatto che $d(1)_k = 1$.

Nello stesso modo otteniamo che per n non negativo, utilizzando la scrittura di $P^{(n)}_{i,k}$ in termine degli autovalori e autovettori di P è valida la seguente relazione:

$$\langle a(k_0)a(k_n)\rangle = \sum_{i,k} a_i a_k R^n_{i,k} = \sum_{j=1,N} \left(\sum_i s(1)_i a_i d(j)_i\right)\left(\sum_k s(j)_k a_k d(1)_k\right) q(j)^n = \sum_{j=1,N} \langle 1|\hat{a}|j\rangle\langle j|\hat{a}|1\rangle q(j)^n \ . \quad (11.107)$$

Facendo gli stessi passaggi di prima, separando il contributo al tempo zero da quello a tempi differenti e sommando le serie geometriche si arriva alla formula

$$z_2 = \sum_k a(k)^2 p^\infty(k) - (\sum_k a(k)p^\infty(k))^2 + \sum_{j=2,N} (\frac{2q(j)}{1-q(j)})\langle 1|\hat{a}|j\rangle\langle j|\hat{a}|1\rangle \quad (11.108)$$

dove il primo termine viene dal contributo a tempi uguali e il secondo termine da quello a tempi differenti. Inoltre abbiamo per semplicità usato la stessa notazione introdotta nell'equazione (11.15). Abbiamo quindi riottenuto il risultato della teoria delle perturbazioni.

11.5 Eventi fortemente correlati

Vogliamo adesso studiare che cosa succede quando le correlazioni vanno a zero lentamente quando la distanza diventa grande in maniera tale che la serie $\sum_{d=1,\infty} C(d)$ è divergente. In generale ci possiamo domandare quando è valido e quando non è valido il teorema del limite centrale.

Nel caso degli eventi ricorrenti, se la quantità

$$\sum_n f(n)n^2 \quad (11.109)$$

è divergente, come accade nel caso in cui per grandi n si ha che $f(n) \propto n^{-\gamma}$ con $2 < \gamma \leq 3$ il teorema del limite centrale non è più valido. La funzione $F(s)$ ha un termine singolare a $s = 1$ del tipo $(1-s)^{\gamma-1}$ e sono validi teoremi generalizzati del limite centrale, con distribuzioni asintotiche simile a quelle che avevamo visto nel capitolo 3.

La validità o meno nel teorema del limite centrale è cruciale in meccanica statistica. Consideriamo per semplicità delle variabili $\sigma(i)$ che possono prendere solamente i valori ± 1. Introduciamo la seguente distribuzione di probabilià per sequenze $\sigma(i)$ con $i = -N, N$:

$$P[\sigma] \propto \exp(-\beta H[\sigma]) \ , \qquad H\{\sigma\} = -\sum_{i,k=-N,N} \sigma(i)\sigma(k)J(i-k) \ , \quad (11.110)$$

dove abbiamo usato le parentesi quadre per sottolineare che la funzione P e H dipendono dall'insieme di tutte le variabili σ.

Supponiamo che la funzione J sia tale che nel limite $N \to \infty$ la distribuzione di probabilità delle $\sigma(i)$ per $i = 1, L$ abbia un limite per qualunque valore di L. Le condizioni necessarie e sufficenti che deve soddisfare la funzione J [5] affinché questo avvenga sono ben note nel caso di J positivi e sono essenzialmente la richiesta che

$$\sum_{k=1,\infty} J(k) < \infty \ . \quad (11.111)$$

[5] Per semplicità supponiamo che sia J che β siano positivi.

Il sistema che abbiamo descritto corrisponde alla meccanica statistica di un sistema di spin di Ising a una temperatura $T = (k\beta)^{-1}$, dove k, come abbiamo visto è la costante di Boltzmann. In questo contesto il limite $N \to \infty$ viene spesso indicato come limite termodinamica o di volume infinito.

In questo caso siamo interessati a sapere quale è il comportamento asintotico nel limite di grandi L della variabile $cn(L)$ e la distribuzione di probabilità della variabile $m(L)$ definite come:

$$m(L) = \frac{\sum_{i=1,L} \sigma(i)}{\mathcal{N}(L)}$$
$$\mathcal{N}^2(L) = \langle \left(\sum_{i=1,L} \sigma(i) \right)^2 \rangle \tag{11.112}$$

Si noti che per costruzione $\langle m^2 \rangle = 1$ e inoltre, per motivi di simmetria, abbiamo che $\langle m \rangle = 0$. Ovviamente, se il teorema del limite centrale è applicabile abbiamo che

$$\mathcal{N}(L) \approx AL^\alpha \tag{11.113}$$

con $\alpha = 1/2$. Per i fisici è interessante notare che la suscettività magnetica del sistema χ è data dalla relazione $\chi = \beta A^2$.

Non proviamo nemmeno a dimostrare i risultati seguenti, che riportiamo allo scopo di far vedere la complessità dell'analisi nel caso correlato.

- La funzione $J(k)$ va a zero quando k va ad infinito più velocemente di k^{-2}.

  In questo caso, il teorema del limite centrale vale per tutti i valori di β: la distribuzione e $\mathcal{N}$ è sempre proporzionale a $L^{1/2}$.

- La funzione $J(k)$ va a zero quando k come $k^{-\omega}$ con $1 < \omega < 2$. In questo caso c'è una transizione di fase per un valore β_c.

  - Per $\beta < \beta_c$ (fase di alta temperatura) la distribuzione di m è gaussiana e $\mathcal{N}$ è sempre proporzionale a $L^{1/2}$
  - Per $\beta > \beta_c$ la distribuzione di m è data da

    $$P(m) = \frac{1}{2}\delta(m-1) + \frac{1}{2}\delta(m+1) = \delta(m^2 - 1) \tag{11.114}$$

    e $\mathcal{N}(L)$ è proporzionale a L ($\alpha = 1$):

    $$\mathcal{N}(L) \approx ML\ . \tag{11.115}$$

    In questo caso un calcolo dettagliato mostra che la funzione di correlazione connessa non va a zero per grandi distanze:

    $$C(d) \to_{d\to\infty} M^2\ . \tag{11.116}$$

    La cluster decomposition non è valida: fisicamente questa situazione corrisponde alla presenza di una magnetizzazione spontanea il cui valore è proprio M.

  Il comportamento a β_c, ovvero al punto critico, è molto interessante: infatti in questo caso la cluster decomposition è valida, ma il teorema del limite centrale non è valido. Infatti $cN(L)$ è proporzionale a L^α, con $\alpha = \frac{3-\omega}{2}$. Per quanto riguarda la distribuzione di probabilità asintotica dobbiamo fare una distinzione ulteriore.

– Per $\omega_c < \omega < 2$, con $\omega_c = 3/2$ la distribuzione di M al punto critico è Gaussiana

– Per $1 < \omega < \omega_c$ la distribuzione asintotica della variabile m al punto critico ($P_\infty(m)$) non è Gaussiana. La distribuzione di m al punto critico non ha niente a che vedere con le distribuzioni che appaiono nel caso del teorema del limite centrale generalizzato, sono piuttosto simili a $\exp(-am^2 - bm^4)$, can a e b appropriati. La distribuzione di m è una funzione continua di ω. Inoltre nel limite $\omega \to \omega_c$ abbiamo che

$$P_\infty(m) \to (2\pi)^{-1/2} \exp(-m^2/2) \ , \tag{11.117}$$

mentre nel limite $\omega \to 1$ abbiamo

$$P_\infty(m) \to \delta(m^2 - 1) \ , \tag{11.118}$$

In altri termini, quando ω si avvicina a ω_c il comportamento a β_c diventa simile a quello nella fase di alta temperatura, mentre

Come risulta da questa discussione, il problema della validità o meno del teorema del limite centrale per eventi fortemente correlati è connesso in maniera profonda alla fisica delle transizioni di fase.

È interessante introdurre le variabili

$$x_k(i) = \frac{\sum_{j=1,L} \sigma(Li + j)}{\mathcal{N}(L)} \ , \tag{11.119}$$

dove $L = 2^k$ (anche qui $\langle (x_k(i))^2 \rangle = 1$). Le variabili x soddisferanno l'equazione di ricorsione che avevamo introdotto nello studio delle distribuzioni stabili, ovvero l'equazione 3.47:

$$x^{(n+1)}(i) = 2^{-\rho}(x^n(2i) + x^n(2i+1)) \ , \tag{11.120}$$

L'equazione precedente ci permette di calcolare la distribuzione di probabilità delle x^{n+1} (ovvero $P_{n+1}[x]$) in termini della distribuzione di probabilità delle x^n ($P_n[x]$), relazione che possiamo scrivere in forma simbolica come

$$P_{n+1} = \mathcal{R}[P_n] \ . \tag{11.121}$$

Nel caso in cui le variabili sono scorrelate abbiamo visto che l'equazione di ricorsione prende una forma semplice (3.48). Nel caso generale la funziona $P_n[x]$ dipende da un numero infinito di variabili e non è possibile mettere la trasformazione precedente in una forma esplicita dalla quale sia facile estrarre il comportamento asintotico.

Ci possiamo aspettare che nel limite in cui k tenda infinito la distribuzione di probabilità delle variabili x tenda ad un limite ($P_\infty[x]$) e che la distribuzione di probabilità asintotica soddisfi necessariamente delle condizioni che generalizzano quelle che abbiamo visto nel caso di eventi scorrelati al caso di eventi correlati ovvero l'equazione 3.49. Infatti ci aspettiamo che la distribuzione di probabilità asintotica soddisfi l'equazione:

$$P_\infty = \mathcal{R}[P_\infty] \ . \tag{11.122}$$

Sfortunatamente nonostante un grande sforzo fatto in questi ultimi trenta anni, siamo molto lontani dal poter classificare tutte le soluzioni dell'equazione di punto fisso (11.122), anche se con metodi di varia natura siamo in grado di controllare alcune di queste soluzioni.

Appendice: Comportamenti asintotici e singolarità complesse

Un teorema ben noto ci dice che il raggio di convergenza della serie

$$F(s) = \sum_{n=0,\infty} f(n) s^n \tag{11.123}$$

è dato dal modulo s_0 della singolarità complessa più vicina all'origine. Avremo quindi che per grandi n

$$f(n) = O(s_0^{-n}) \tag{11.124}$$

Possiamo essere più precisi nello stabilire le relazioni tra le singolarità più vicine all'origine e il comportamento asintotico della $f(n)$. A questo scopo riportiamo in forma semplificata l'enunciato del teorema di Appel.

Per evitare una discussione troppo dettagliata supponiamo che esista un cerchio di raggio R intorno all'origine e all'interno di questo cerchio la funzione $F(s)$ abbia un numero finito non nullo di singolarità. Assumiamo inoltre che tutte le singolarità sia poli o tagli a potenza, ovvero siano della forma

$$\alpha_k (1 - s/s_k)^{-\beta_k}. \tag{11.125}$$

Utilizzando il binomio di Newton troviamo che il comportamento asintotico della $f(n)$ è dato da

$$f(n) = \sum_k \alpha_k \frac{\Gamma(n+\beta_k)}{\Gamma(\beta_k)\Gamma(n+1)} s_k^{-n} + O(R^{-n}). \tag{11.126}$$

I termini con $|s_k|$ più piccoli sono dominanti. Se ci sono più termini con lo stesso valore di $|s_k| \equiv r$, ma con una fase ϕ_k diversa ($|s_k| = r \exp(i\phi_k)$) il termine dominante è dato dal contributo di quelle con il valore più grande di β_k (per esempio m). Utilizzando il comportamento asintotico delle funzione Γ otteniamo che

$$f(n) \approx r^{-n} n^{\beta-1} \sum_{k=1,m} \frac{\alpha_k}{\Gamma(\beta)} \exp(-n\phi(k)), \tag{11.127}$$

dove la somma spesso contiene anche un solo termine.

Al contrario se è vera la formula (11.127), possiamo dire che le m singolarità complesse più vicine all'origine hanno la forma descritta nell'equazione 11.125 e sono sul cerchio $|s| = r$, nei punti $s_k = r \exp(i\phi_k)$, tutte con lo stesso valore $\beta_k = \beta$.

Chapter 12

Processi dipendenti dal tempo

In questo capitolo affronteremo lo studio dei processi, ovvero sequenze aleatorie di eventi che dipendono da un tempo continuo. Si tratta essenzialmente della generalizzazione a tempi continue delle catene di $Markov$, il some catena essendo tradizionalmente riservato a processi per i quei il tempo può assumere solo valori discreti. Incominceremo col considerare i casi più semplici per trattare successivamente i casi più complicati.

12.1 Processi di Poisson

Lo stato di un sistema che realizza un processo di Poisson è caratterizzato da una funzione intera $n(t)$, non negativa (tradizionalmente si assume $n(0) = 0$), non decrescente. Molto spesso $n(t)$ ha l'interpretazione del numero di eventi che si sono verificati fino al tempo t.

La funzione $n(t)$ se non è costante, non è nemmeno continua. Il processo di Poisson caratterizzato dal fatto che il salto della funzione n alla discontinuità vale sempre 1 e che le discontinuità sono distribuite uniformemente com probabilità λ. Più precisamente abbiamo che la probabilità che $n(t+\Delta t) - n(t)$ sia uguale a 1 è data da $\lambda\Delta t + o(\Delta t)$, per Δt piccoli mentre la probabilità che $n(t+\Delta t) - n(t)$ sia uguale a 2 è data da $o(\Delta t)$ dove abbiamo indicato con $o(t)$ qualcosa che va a zero piu' velocemente di t ($lim_{t\to 0} t^{-1} o(t) - 0$) .

Ci proponiamo di calcolare le probabilità $P_n(t)$ che $n(t)$ sia uguale a n (assumendo $n(0) = 0$). Il calcolo può essere fatto con i metodi elementari del primo capitolo. Vogliamo tuttavia impostare il problema in maniera da poter usare lo stesso approccio a casi più complicati. Procederemo quindi derivando un sistema di equazioni differenziali per le $P_n(t)$.

A questo scopo osserviamo che se Δt è piccolo e trascuriamo termini di ordine $o(\Delta t)$, se $n(t+\Delta t)$ sia uguale a n, possono essere successe solo due cose nel recente passato

- $n(t) = n$ e non è avvenuta nessuna transizione nel tempo Δt (questo avviene con probabilità $1 - \lambda\Delta t$.

- $n(t) = n - 1$ e è avvenuta una transizione nel tempo Δt (questo avviene con probabilità $\lambda\Delta t$.

A questo punto possiamo scrivere che

$$P_n(t+\Delta t) = P_n(t)(1 - \lambda\Delta t) + P_{n-1}(t)\lambda\Delta t + o(\Delta t) \ . \tag{12.1}$$

L'equazione precedente, può essere riscritta come

$$\frac{P_n(t+\Delta t) - P_n(t)}{\Delta t} = -\lambda P_n(t) + \lambda P_{n-1}(t) \ , \tag{12.2}$$

dove abbiamo trascurato termini che vanno a zero con Δt. Nel limite $\Delta t \to 0$ otteniamo

$$\frac{dP_n}{dt} = -\lambda P_n(t) + \lambda P_{n-1}(t) \ . \tag{12.3}$$

Ovviamente l'equazione precedente non è valida per $n = 0$ a meno che non definiamo convenzionalmente $P_{-1}(t) = 0$. Infatti

$$\frac{dP_0}{dt} = -\lambda P_0(t) \ . \tag{12.4}$$

Dato he nell'equazioni precedenti nell'espressione per $\frac{dP_n}{dt}$ figura solo P_n e P_{n-1}, le equazioni si possono risolvere in cascata, prima per $P_0(t)$, poi per $P_1(t)$ e così via [1].

le equazioni precedenti hanno una e una sola soluzione, che come è facile da indovinare e successivamente da verificare è data dalla distribuzione di Poisson con media λt.

$$P_n(t) = \exp(-\lambda t)\frac{(\lambda t)^n}{n!} \ . \tag{12.5}$$

12.2 Processi di nascita

Ci occuperemo nel seguito di processi di *nascita*, e del caso in cui tali processi possano divergere a tempi finiti. Considereremo un sistema S che al tempo t può trovarsi in uno degli stati 0, 1, ..., n. I coefficienti λ_n sono definiti in modo tale che la probabilità che il sistema passi dallo stato n allo stato $n + 1$ in un intervallo di tempo abbastanza piccolo Δt sia

$$P(n \to n + 1) = \lambda_n \ \Delta t \ . \tag{12.6}$$

Una possibile applicazione di questo formalismo, dicevamo, è utile a studiare processi di nascita. Possiamo in questo caso considerare lo stato n del sistema come quello in cui la popolazione di interesse è composta di n membri. La transizione allo stato $n + 1$ è causata dalla nascita di un nuovo esemplare della specie. I coefficienti λ_n sono inversamente proporzionali al tempo necessario al gruppo di individui per portare alla luce un nuovo esemplare quando ne siano già presenti n: quando i λ_n crescono diminuisce il tempo che passa in media fra una nascita e la successiva, ed il sistema tende a passare meno tempo nello stato n.

La quantità λ_n è, in un linguaggio un po' differente, propozionale all'inverso della vita media dello stato n. Il fatto che il valore di n possa solo crescere significa che stiamo considerando un processo di pura nascita, e stiamo ignorando spiacevoli evenienze quali la morte di un membro del gruppo. Un processo di nascita e morte include anche una probabilità (μ_n, diciamo) che il sistema passi dallo stato n allo stato $n - 1$. Notiamo infine che il fatto che i coefficienti λ_n dipendano solo dallo stato n (e non dal tempo, ad esempio, o dalla storia passata del sistema) implica che il processo stocastico che stiamo considerando è di tipo Markov.

Procedendo esattamente come per i processi di Poisson possiamo derivare l'equazione differenziale di evoluzione delle probabilità :

$$\frac{dP_n}{dt} = -\lambda_n P_n(t) + \lambda_{n-1} P_{n-1}(t) \ . \tag{12.7}$$

Esattamente come nel caso dei processi di Poisson, la soluzione del sistema di equazioni differenziali esiste ed è unica. Nel caso generico (tutte le λ differenti) è facile verificare che può mettersi

[1] Quest proprietà è vera anche per i processi di pura nascita che vedremo nella sezione successiva.

sotto la forma

$$P_n(t) = \sum_{k=0,n} C(k,n)\exp(-\lambda_k t) \ , \tag{12.8}$$

dove le costanti $C(k,n)$ dipendono dalla condizione iniziale.

Le costanti $C(k,n)$ si possono ottenere ricorsivamente calcolando quelle fino ad un dato valore di n e utilizzare quest'informazione per calcolare quelle con $n+1$. Infatti abbiamo che la condizione iniziale implica che

$$\sum k = 0, nC(k,n) = P(n) \ . \tag{12.9}$$

Inoltre le equazioni di evoluzione per la probabilità implicano che

$$-\lambda_k C(k,n) = -\lambda_n C(k,n) + \lambda_{n-1} C(k,n-1) \qquad \text{per} \qquad k < n \ . \tag{12.10}$$

Abbiamo quindi la relazione

$$C(k,n) = \frac{\lambda_{n-1} C(k,n-1)}{\lambda_n - \lambda_k} \ , \tag{12.11}$$

che (unita alla condizione iniziale) ci permette di calcolare ricorsivamente tutte le $C(k,n)$.

Nel caso dell'usuale condizione iniziale $n(0) = 0$ è possibile dimostrare che le costanti $C(k,n)$ si possono trovare risolvendo il sistema di equazioni lineari:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0,n} C(k,n)(\lambda_k)^s &= 0 \quad \text{per} \quad s < n \\ \sum_{k=0,n} C(k,n)(\lambda_n)^n &= \prod_{k=0,n-1} \lambda_k \ , \end{aligned} \tag{12.12}$$

che permette di ottenere le $C(k,n)$ per n dato, senza dover calcolare le $C(k,n)$ per valori di n inferiori.

Le equazioni precedenti si possono dimostrare imponendo la validità per t piccolo delle relazioni (facilmente dimostrabili per ricorsione)

$$P_n(t) = \frac{\prod_{k=0,n-1} \lambda_k}{n!} t^n + O(t^{n+1}) \ . \tag{12.13}$$

Si noti che le equazioni lineari precedente hanno una e una sola soluzione solo se tutte le λ sono differenti tra di loro. Solo in questo caso l'equazione lineare omogenea associata ha solo la soluzione nulla. Infatti il determinante della matrice

$$M_{k,s} = (\lambda_k)^s \tag{12.14}$$

(detto anche determinante di Vandermonde) si annulla solo se due λ sono uguali.

Il comportamento qualitativo della soluzione del sistema di equazioni differenziali a grandi tempi dipende dalla forma delle $\lambda(n)$. Per esempio possiamo considerare la quantità $\langle n(t) \rangle = \sum_n P_n(t)$.

Possiamo per esempio avere tre comportamenti che nella metafora biologica corrispondono a diversi fattori limitanti della crescita della popolazione.

- $\lambda_n = cost.$ In questo caso i fattori limitanti non dipendono dalla grandezza della popolazione (potrebbero essere le attrezzature per partorire e abbiamo che $\langle n(t) \rangle$ aumenta linearmente con il tempo.

- $\lambda_n \propto n$. In questo caso (che si può realizzare nella riproduzione asessuata, per esempio in colonie di batteri o anche nella riproduzione sessuata dove il fattore limitante è per esempio la lunghezza della gestazione) il fattore limitante principale è la taglia della popolazione e abbiamo che $\langle n(t)\rangle$ aumenta esponenzialmente con il tempo.

- $\lambda_n \propto n^2$. Questo caso limite si può realizzare per la popolazione di una specie con riproduzione sessuata che vive in un ambiente bassa densità (per esempio i criceti del deserto siriano), dove il fattore principale limitante è l'incontro di esemplari adulti di sesso diverso, la cui probabilità è infatti proporzionale a n^2 . In questo caso, come vedremo nella sezione successiva $\langle n(t)\rangle$ diventa infinita a tempi finiti. Ovviamente, in natura prima che ciò accada altri fattori limitanti diventano dominanti.

12.3 Processi divergenti di nascita

12.3.1 Il teorema di Feller

Saremo interessati nel seguito al caso in cui i coefficienti $\lambda_n \stackrel{n\to\infty}{\longrightarrow} \infty$ cioè in cui il tempo necessario a che la popolazione generi un nuovo esemplare ($\tau_n \equiv \lambda_n^{-1}$) tenda a zero quando il numero di membri della popolazione cresca. Questo è ragionevole (nella situazione di risorse illimitate cui stiamo pensando), dato che una popolazione composta da più membri tenderà ad avere figli con frequenza maggiore che una popolazione piccola. In questo caso vale il

Teorema 12.3.1 (Feller) *Il fatto che la serie*

$$T \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} = \sum_{n=0}^{\infty} \tau_n \tag{12.15}$$

converga è condizione necessaria e sufficiente perché n assuma un valore infinito in un tempo finito.

Si noti inoltre che la quantità

$$\tau_n \equiv \lambda_n^{-1} \tag{12.16}$$

è il tempo medio di soggiorno nello stato n. Possiamo quindi aspettarci che il tempo medio per arrivare ad infinito sio proprio dato da $T = \sum_n \tau_n$.

La (12.15) converge se i coefficienti λ_n divergono abbastanza velocemente con n, cioè se il ritmo di procreazione aumenta abbastanza fortemente con il numero degli individui. Il fatto che il sistema raggiunga uno stato arbitrario in tempo finito implica anche che, in un tempo finito, sono state effettuate un numero infinito di transizioni: il formalismo che stiamo sviluppando serve ad esempio a spiegare lo sviluppo di reazioni a catena.

Intuitivamente T è il tempo medio che il sistema impiega ad arrivare ad infinito. Risulterà quindi abbastanza immediato dimostrare che la condizione della convergenza della serie in eq. 12.15 sia sufficiente e sarà solo lievemente più complicato dimostrare che la condizione è sufficiente.

Noi studieremo questo problema in dettaglio arrivando alla stessa conclusione utilizzando argomenti abbastanza differenti. Il motivo per cui presenteremo quattro modi diversi di dimostrare lo stesso risultato è di illustrare tecniche diverse, in modo tale che il lettore possa vederne i vantaggi e gli svantaggi. Inoltre si noti che in questo caso semplice (pura nascita) le dimostrazioni sono molto semplici, mentre una dimostrazione equivalente nel caso di eventi di nascita e morte (che studieremo nella sezione successiva) sarebbe molto più difficile e non praticabile con alcune delle tecniche che useremo.

12.3.2 Un'analisi approssimata

L'idea di base consiste nel ridurre il sistema infinito di equazioni lineari a un numero piccolo (nel caso più semplice che sarà il solo che illustreremo, una sola) di equazioni non lineari.

Definiamo la quantità:

$$\bar{n}(t) \equiv \sum_n P_n(t) n \equiv \langle n(t) \rangle \ . \tag{12.17}$$

Per prima cosa dimostriamo che che

$$\frac{d\bar{n}(t)}{dt} =< \lambda >_t \equiv \sum_n P_n(t) \lambda_n \ . \tag{12.18}$$

Infatti si ha che

$$\frac{d\bar{n}(t)}{dt} = \sum_n (-P_n(t)\lambda_n + P_{n-1}(t)\lambda_{n-1}) n =$$
$$- \sum_n P_n(t)\lambda_n n + \sum_n P_n(t)\lambda_n (n+1) = \sum_n P_n(t)\lambda_n(-n+n+1) = \langle \lambda \rangle_t \ , \tag{12.19}$$

dove abbiamo fatto l'ipotesi che la somma $\sum_n P_n(t)\lambda_n n$ sia convergente.

Se assumiamo (ipotesi che non sarà esattamente vera, ma che ci permette di ottenere un primo risultato qualitativo) che la funzione $P_n(t)$ ha un picco stretto per $n \approx \bar{n}(t)$ (ovvero un picco la cui larghezza relativa a $n(t)$ sia piccolo, esattamente come accade per la distribuzione di Poisson per tempi grandi), otteniamo che

$$\langle \lambda \rangle\rangle_t \approx \lambda_{\bar{n}(t)} \ . \tag{12.20}$$

Se introduciamo una funzione $\lambda(n)$ liscia che interpola le λ_n per valori non interi, la soluzione dell'equazione (12.18) è data da

$$t = \int_{\bar{n}(0)}^{\bar{n}(t)} \frac{dn}{\lambda(n)} \ . \tag{12.21}$$

È evidente che $\bar{n}(t)$ diventa infinita al tempo

$$t = \int_{\bar{n}(0)}^{\infty} \frac{dn}{\lambda(n)} \tag{12.22}$$

se l'integrale precedente è convergente: la condizione di convergenza dell'integrale è la stessa della convergenza della serie in (12.15).

È evidente che abbiamo fatto un'approssimazione che non controlliamo bene. In generale quest'approssimazione si può migliorare facendo per esempio l'approssimazione che la distribuzione delle n a un dato tempo sia gaussiano. In questo modo si ottiene un'approssimazione più rifinita, che si può migliorare in maniera sistematica. Per esempio se definiamo

$$\sigma^2(t) = \langle n(t)^2 \rangle - \langle n(t) \rangle^2 \ , \tag{12.23}$$

otteniamo che

$$\frac{d\sigma^2(t)}{dt} = \langle \lambda \rangle_t + 2(\langle \lambda n \rangle_t - \langle \lambda \rangle_t \langle n \rangle_t \ . \tag{12.24}$$

Se supponiamo che la distribuzione delle n sia gaussiana il lato destro delle equazioni 12.2312.24 è calcolabile come funzione di $\bar{n}(t)$ e $\sigma^2(t)$ e quindi le equazioni precedenti forniscono delle equazioni non lineari di evoluzione che generalizzano l'equazione 12.18.

Ritorniamo gli eventi divergenti. Presenteremo adesso tre dimostrazioni diverse del risultata appena ottenuto con questo metodo approssimato, la prima è la dimostrazione orginale di Feller; la seconda è una dimostrazione costruttiva, nel senso che si riesce a controllare espicitamente la forma di alcune delle traiettorie che arrivano ad infinito. In un terza dimostrazione possiamo controllare esplicitamente la distribuzione dei tempi necessari per arrivare ad infinito.

12.3.3 La dimostrazione di Feller

L'idea di base consiste nel considerare la quantità

$$S(t) \equiv \sum_{n=0,\infty} P_n(t) \ . \tag{12.25}$$

La probabilità che il processo sia arrivato ad infinito è proprio data da $1 - S(t)$. Siamo quindi interessati a vedere quando $1 - S(t)$ non è zero.

A questo scopo è conveniente definire

$$S_N(t) \equiv \sum_{n=1,N} P_n(t) \ . \tag{12.26}$$

Utilizzando se equazioni di evoluzioni per la probabilità otteniamo immediatamente che

$$E_N(t) \equiv \frac{dS_N(t)}{dt} = \sum_{n=0,N} (-\lambda_n P_n(t) + \lambda_{n-1} P_{n-1}(t)) = P_N(t)\lambda_N \ . \tag{12.27}$$

Quest'equazione ha un significato molto chiaro: $S_N(t)$ è la probabilità che $n(t) \leq N$ e questa probabilità è influenzata solo dalla transizione $N \to N+1$ che avviene con probabilità $P_N(t)\lambda_N$. Utilizzando la condizione iniziale $S_N(0) = 1$ quest'equazione si può anche scrivere sotto forma integrale come:

$$1 - S_N(t) = \int_0^t d\tau P_N(\tau) \tag{12.28}$$

È evidente che

$$\int_0^t d\tau S_N(\tau) = \sum_{k=0,N} \int_0^t d\tau P_k(\tau) = \sum_{k=0,N} \frac{1 - S_k(t)}{\lambda_k} \leq \sum_{k=0,N} \frac{1}{\lambda_k}, \tag{12.29}$$

dove abbiamo usato l'equazione (12.28). Passando al limite per $N \to \infty$ si trova che

$$\int_0^t d\tau S(\tau) \leq \sum_{k=0,\infty} \frac{1}{\lambda_k}, \tag{12.30}$$

e quindi dobbiamo avere che $S(t) < 1$ almeno per $t > T = \sum_{k=0,\infty} \lambda_k^{-1}$. In conclusione non appena t è più grande del tempo medio per arrivare ad infinito (T), la probabiltà di arrivare ad infinito deve essere diversa da zero, come è naturale che sia.

Si noti che $\int_0^\infty d\tau S_N(\tau)$ è proprio la media del tempo nel quale il sistema rimane nella regione $n \leq N$ in quanto un storia del sistema in cui la transizione $N \to N+1$ avviene al tempo t_N^* da un contributo t all'integrale precedente. Possiamo quindi scrivere che

$$\int_0^\infty d\tau S_N(\tau) = \langle t_N^* \rangle = \lim_{t \to \infty} \sum_{k=0,N} \frac{1 - S_k(t)}{\lambda_k} = \sum_{k=0,N} \frac{1}{\lambda_k} \ , \tag{12.31}$$

dove abbiamo usato il fatto che per un processo di nascita (a meno che una delle λ non sia zero) $\lim_{t\to\infty} S_k(t) = 0$. L'equazione $\langle t_N^* \rangle = \sum_{k=1,N} \tau_n$ afferma il fatto evidente che a media del tempo nel quale il sistema rimane nella regione $n \leq N$ è uguale alla media dei tempi di soggiorno in ciascuno dei valori di $n \leq N$. Passando la limite $N \to \infty$ ritroviamo che il tempo medio per arrivare ad infinito è proprio T.

Passiamo a dimostrare che $T < \infty$ è una condizione sufficiente per arrivare ad infinito in un tempo finito. Se partiamo

$$E_N(t) = \frac{S_N(t)}{dt} = P_N(t)\lambda_N \ , \tag{12.32}$$

procedendo senza fare molta attenzione al rigore potremmo scrivere che

$$\lim_{N\to\infty} E_N(t) = E(t) \equiv \frac{S(t)}{dt} \tag{12.33}$$

e quindi per grande N abbiamo che

$$P(t)_N \approx \frac{E(t)}{\lambda_N} \tag{12.34}$$

La relazione precedente è possibile per $E \neq 0$ solo se la relazione (12.15) è soddisfatta, in quanto è certo che

$$\sum_{N=0,\infty} P_N(t) \leq 1 \tag{12.35}$$

e quindi a maggior ragione la somma e convergente.

Sfortunatamente procedendo in questo modo abbiamo scambiato un limite con una derivata e questa operazione non è sempre giustificata (il limite $\lim_{N\to\infty} E_N(t)$ potrebbe non esistere anche quando $\frac{S(t)}{dt}$ è ben definita.

Possiamo rendere rigorosa la dimostrazione integrando le formule precedenti rispetto al tempo. Scriviamo dunque

$$1 - S(t) \leq 1 - S_N(t) = \int_0^t d\tau \lambda_N p_N(\tau) \tag{12.36}$$

dove abbiamo usato il fatto evidente che le S_N sono funzioni crescenti di N. L'equazione precedente ci dice che

$$\frac{1 - S(t)}{\lambda_N} \leq \int_0^t d\tau p_N(\tau) \tag{12.37}$$

Possiamo allegramente sommare su N (si tratta di una diseguaglianza e utilizzando di nuovo l'equazione (12.35) otteniamo che

$$(1 - S(t)) \sum_{N=0,\infty} \frac{1}{\lambda_N} = (1 - S(t))T \leq t \tag{12.38}$$

che è il risultato voluto: $(1 - S(t))$ può essere diverso da zero solo se la somma che definisce T è convergente. Si noti che la formula precedente implica che il sistema non può essere arrivato ad infinito con certezza (ovvero $S(t) = 0$) per tempi t minori di T, risultato evidente in quanto T è il tempo medio necessario per arrivare ad infinito.

12.3.4 Una dimostrazione costruttiva

In questo caso diamo una dimostrazione in un caso più semplice. Assumeremo cioè che sia convergente la serie

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\log(\lambda_n)}{\lambda_n} \ . \tag{12.39}$$

La convergenza della (12.39) implica ovviamente la convergenza della (12.15): i λ_n divergono per grandi n, ed il fattore $\log(\lambda_n)$ cresce, rendendo più convergente la serie. Stiamo, in parole povere, facendo alla sequenza delle λ_n una richiesta più stringente di quel che sarebbe necessario, e chiediamo che il tempo tipico di procreazione diminuisca con n più rapidamente di quel che sarebbe veramente necessario per avere una popolazione divergente. Questa è una procedura usata frequentemente in fisica: paghiamo alla semplicità di dimostrazione (alla trasparenza della procedura o al fatto stesso che una dimostrazione esista) il prezzo di una generalità un po' minore del risultato ottenuto.

Assumiamo che la (12.39) sia convergente, e mostriamo che il sistema raggiunge in tempo finito uno stato di popolazione infinita. Per dimostrare il risultato mostreremo che il sistema raggiunge lo stato $n = \infty$ in tempo finito seguendo un certo ruolino di marcia che noi avremo scelto: la popolazione cioè divergerà già qualora il sistema resti in ogni stato n un tempo minore di un t_n da noi preassegnato. Il sistema potrà ovviamente divergere anche restando un tempo maggiore di t_n in ogni stato, ma questo non farà che rendere la divergenza a tempo finito più probabile. La nostra capacità di esibire una sequenza di tempi di permanenza $\{t_n\}$ che garantisce la divergenza di n in tempo finito dimostra il teorema. Se indichiamo con $P(\infty, t)$ la probabilità che il sistema raggiunga $n = \infty$ nel tempo finito t, il nostro metodo esibisce un valore di $\tilde{t}$ per cui $P(\infty, \tilde{t})$ è certamente non nulla. Questo è un limite inferiore. È possibile che $P(\infty, t)$ sia non nulla già per $t < \tilde{t}$, e che la vera probabilità di divergenza a $\tilde{t}$ sia maggiore della nostra stima. Noi avremo però mostrato che la probabilità di divergenza al tempo finito $\tilde{t}$ è non nulla, ed è limitata inferiormente da $P(\infty, \tilde{t})$.

Consideriamo la sequenza preassegnata $\{t_n\}$ (il ruolino di marcia), che scegliamo essere composta dai tempi

$$t_n \equiv \frac{\log(\lambda_n)}{\lambda_n} \ . \tag{12.40}$$

Definiamo il tempo $\tilde{t}$ come

$$\tilde{t} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} t_n \ , \tag{12.41}$$

e la costante $\tilde{P}$ come

$$\tilde{P} \equiv \prod_{n=0}^{\infty} p_n \ , \tag{12.42}$$

dove abbiamo indicato con p_n la probabilità che il sistema transisca dallo stato n allo stato $n + 1$ in un tempo t_n. Per tempi $t > \tilde{t}$ la probabilità che il sistema abbia avuto un numero infinito di nascite è $P(\infty, t) > \tilde{P}$. Questo fatto è chiarito dalla discussione precedente. Infatti la sequenza $\{t_n\}$ è (come stiamo per mostrare) una delle possibili sequenze di tempi che portano la popolazione a divergere in tempo finito.

Dobbiamo mostrare che, se il sistema obbedisce al nostro ruolino di marcia, allora $\tilde{P} > 0$. Per far questo abbiamo bisogno della forma esplicita delle probabilità di transizione p_n, che stiamo per ottenere.

Risultato 12.3.1 *Consideriamo un sistema che può passare dallo stato A allo stato B nell'intervallo di tempo infinitesimo Δt con probabilità $\lambda\Delta t$. Vogliamo ottenere la probabilità $p(t)$ che il sistema passi dallo stato A allo stato B nel tempo finito t. Sia $q(t) \equiv 1 - p(t)$ la probabilità che il sistema non abbia effettuato la transizione nel tempo t. Si avrà che $1 - q(\Delta t) = \lambda\Delta t$. Usiamo il teorema di moltiplicazione delle probabilità di eventi indipendenti. La probabilità che il sistema non abbia avuto transizioni sino al tempo $t + \Delta t$ è data da*

$$q(t + \Delta t) = q(t)q(\Delta t) = q(t)(1 - \lambda\Delta t) \ ,$$

e cioè

$$\frac{q(t + \Delta t) - q(t)}{\Delta t} = -\lambda q(t) \ .$$

Nel limite usuale $\Delta t \to 0$ troviamo

$$\dot{q}(t) = -\lambda q(t) \ .$$

La soluzione di questa equazione è $q(t) = C\exp(-\lambda t)$. Il fatto che il sistema sia inizialmente nello stato A dà $C = 1$. Otteniamo così , per la probabilità di transizione $p(t)$,

$$\boxed{p(t) = 1 - e^{-\lambda t}}$$

Calcoliamo il valore che $\tilde{P}$ prende sul nostro ruolino di marcia definito in 12.40. Otteniamo che

$$\tilde{P} = \prod_{n=0,\infty} p_n \ ,$$
$$p_n = (1 - \exp(-\lambda_n t_n) \ . \tag{12.43}$$

Perché un prodotto infinito sia diverso da zero bisogna che la somma dei logaritmi dei moltiplicandi sia finita. Grazie al risultato (12.3.1) otteniamo, per il comportamento dominante a grandi n,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \log(p_n) \simeq \sum_{n=0}^{\infty} e^{-t_n\lambda_n} \ ,$$

che sul nostro ruolino di marcia (12.40) ci dà

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\ln(\lambda_n) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} \ ,$$

che, come abbiamo già discusso, è tanto più convergente in quanto converge (12.39). $\tilde{P}$ è dunque non zero, ed il tempo $\tilde{t}$ è finito proprio per la (12.39). Il teorema è dimostrato, ed è vero che, sotto le nostre ipotesi, il processo di nascita porta ad una popolazione divergente in tempo finito. Perché la nostra dimostrazione sia valida bisogna che la (12.39) converga, cioè che i coefficienti λ_n divergano con n più velocemente che $n\log(n)$. Ricordiamo però che questo è solo un limite tecnico della nostra dimostrazione, e che il vero limite è dato dalla condizione che i λ_n divergano più rapidamente di n.

12.3.5 Un calcolo esplicito

Vogliamo calcolare esplicitamente la distribuzione di probabilità di del tempo T che il sistema impiega per arrivare ad infinito. Se indichiamo con t_n i tempi di soggiorno nello stato n-simo, abbiamo che

$$T = \sum_{n=0\,\infty} t_n \ . \tag{12.44}$$

Di conseguenza la trasformata di Laplace della $P(T)$ è data da

$$\hat{P}(s) = \prod_{n=0,\infty} \hat{p}_n(s) \tag{12.45}$$

dove $\hat{p}_n(s)$ è la trasformata di Laplace della $p_n(t_n)$. Abbiamo già visto che

$$p_n(t_n) = \lambda_n^{-1} \exp(-\lambda_n t_n) \ . \tag{12.46}$$

Quindi abbiamo che

$$\hat{p}_n(s) = (1 + \tau_n s)^{-1} \ , \tag{12.47}$$

con $\tau_n = \lambda_n^{-1}$. Alla fine otteniamo che

$$P(s) = \prod_{n=0,\infty} (1 + \tau_n s)^{-1} = \exp(-\sum_{n=0,\infty} \ln(1 + \tau_n s)) \ . \tag{12.48}$$

Un analisi dettagliata mostra che la condizione di convergenza del prodotto infinito ad un valore non nullo è che la serie τ_n sia sommabile e quindi ritroviamo il criterio di Feller. Al contrario se la somma della serie τ_n è divergente troviamo che

$$\lim_{N\to\infty} \prod_{n=0,N} \hat{p}_n(s) = 0 \tag{12.49}$$

non appena $s > 0$ e quindi la probabilità che la variabile

$$T_N = \sum_{n=0\,N} t_n \ . \tag{12.50}$$

abbia un valore finito tende a zero quando N tende ad infinito.

Se la serie τ_n è sommabile $P(s)^{-1}$ è una funzione analitica intera il cui comportamento asintotico è connesso al distribuzione degli zeri $(-d_n)$. Se supponiamo che

$$\lambda_n \propto n^\alpha \ . \tag{12.51}$$

Il caso interessante dove sono possibili processi divergenti corrisponde alla regione $\alpha > 1$ dove si trova che per grandi s positivi $P(s)$ va zero come $\exp(-As^{1/\alpha})$.

Possiamo notare che il comportamento per grandi s della trasformata di Laplace è strettamente connesso al comportamento della funzione all'origine. Se la $p(T)$ va a zero come

$$\exp(-Bt^{-\gamma}) \ , \tag{12.52}$$

utilizzando il metodo del punto di massimo troviamo che

$$\hat{P}(s) \propto \exp(-Cs^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}) \ . \tag{12.53}$$

Mettendo tutto insieme si trova la relazione

$$\gamma = \frac{1}{\alpha - 1} \; . \tag{12.54}$$

La probabilità di T tende quindi a zero per piccoli T con una velocità che dipende dal comportamento asintotico delle λ_n per grandi n.

12.4 Processi di nascita e morte

I processi di nascita e morte sono caratterizzati dal fatto che la quantità n, che si assume sempre non negativa, può sia aumentare che diminuire di una unità . La probabilità condizionata che il sistema nello stato n passi dallo stato n allo stato $n+1$ in un intervallo di tempo abbastanza piccolo Δt è

$$P(n \to n+1) = \lambda_n \; \Delta t \; . \tag{12.55}$$

mentre la probabilità della transizione nella direzione inversa è data da

$$P(n \to n-1) = \mu_n \; \Delta t \; . \tag{12.56}$$

Anche in questo caso si dimostra un'equazione differenziale per l'evoluzione delle probabilità

$$\frac{dP_n}{dt} = -\lambda_n P_n(t) + \lambda_{n-1} P_{n-1}(t) - \mu_n P_n(t) + \mu_{n+1} P_{n+1}(t) = -\Phi(n + \frac{1}{2}, t) + \Phi(n - \frac{1}{2}, t) \tag{12.57}$$

dove la quantità $\Phi(x,t)$ è definita per valori semiinteri di x come

$$\Phi(x,t) = \lambda_{x-\frac{1}{2}} P_{x-\frac{1}{2}}(t) - \mu_{x+\frac{1}{2}} P_{x+\frac{1}{2}}(t) \tag{12.58}$$

ed ha il significato di flusso da$x - \frac{1}{2}$ a $x + \frac{1}{2}$: è infatti la probabilità che il sistema passi da $x - \frac{1}{2}$ a $x + \frac{1}{2}$ meno la probabilità della transizione nella direzione opposta.

Nel caso $n = 0$ l'equazione precedente si semplifica $\mu_0 = 0$ e diventa

$$\frac{dP_0}{dt} = -\Phi(\frac{1}{2}, t) \; . \tag{12.59}$$

Una condizione necessaria per l'esistenza e l'unicità della soluzione del precedente sistema di equazioni differenziali è più complicata che nel caso precedente in quanto le equazioni sono tutte accoppiate e non possiamo procedere come nel caso precedente risolvendo le equazioni a partire di $n = 0$. È tuttavia possibile dimostrare che se esiste una costante A, tale che per n grande

$$\lambda_n < A \qquad \mu_n > A \; , \tag{12.60}$$

la soluzione esiste e unica; la soluzione sarà ancora unica se le funzioni λ e μ crescono abbastanza lentamente, ma per crescite troppo veloci possiamo la soluzione può non essere unica e può anche verificarsi che $\sum_{k=0,\infty} P_k(y) < 1$.

Nei processi di nascita è morte è possibile raggiungere uno stato stazionario, ovvero può essere che

$$\lim_{t \to \infty} P_n(t) = P_n \neq 0 \; . \tag{12.61}$$

Ci proponiamo di dare una condizione necessaria affinché ciò accada. Per prima cosa osserviamo

$$\lim_{t\to\infty}\frac{dP_n(t)}{dt} = -\Phi(n+\frac{1}{2}) + \Phi(n-\frac{1}{2}) \tag{12.62}$$

dove le Φ sono calcolate utilizzando le P.

Dato che $\lim_{t\to\infty}\frac{dP_n(t)}{dt}$ deve essere nullo (se esiste) come conseguenza dell'equazione (12.61), otteniamo che

$$\Phi(n+\frac{1}{2}) = \Phi(n-\frac{1}{2}) \tag{12.63}$$

Quest'equazione valida per $n \neq 0$, unita a quella valida a $n = 0$, (ovvero $\Phi(\frac{1}{2}) = 0$) implica che nello stato stazionario tutte le Φ sono nulle. Si avrà quindi

$$P_{n+1} = \frac{\lambda_n}{\mu_{n+1}}P_n \equiv \nu_n P_n. \tag{12.64}$$

Otteniamo quindi che

$$P_n = R_n P_0 \quad R_n = \prod_{k=q,n-1} \nu_n. \tag{12.65}$$

La relazione precedente ci permette di calcolare tutte le P_n in termini della P_0 e assumendo la probabile validità della relazione $\sum_{n=0,\infty} P_n = 1$ implica che

$$P_0 = (\sum_{k=0,\infty} R_k)^{-1} \tag{12.66}$$

Notiamo che tutto ciò è possibile solo se

$$\sum_{k=0,\infty} R_k < \infty \tag{12.67}$$

e questa è una condizione assolutamente necessaria per raggiungere uno stato stazionario. Una condizione sufficiente affinché la serie precedente sia convergente è che per grandi n si abbia

$$\mu(n+1) > \lambda(n)(1+Cn^{-1}) \ , \tag{12.68}$$

dove C è una costante maggiore di 1.

12.5 I processi di Markov

I processi di Markov possono essere considerate come la generalizzazione dei processi di nascita e morte in presenza di parti plurimini e di cause di morte simultanee come gli incidenti stradali.

In un processo di Markov, come in una catena di Markov, bisogna definire le probabilità di transizione. In questo caso la probabilità di passare dallo stato i allo stato j nell'intervallo di tempo Δt è data da

$$P(i \to j) = K_{i,j}\Delta t \ , \tag{12.69}$$

dove gli elementi diagonali della matrice K sono convenzionalmente uguali a zero. Possiamo indicare con $P_{i,k}(t,t')$ la probabilità di andare dallo stato i la tempo t allo stato k al tempo t'. Dato che le probabilità di transizione sono indipendenti dal tempo avremo che

$$P_{i,k}(t,t') = P_{i,k}(t'-t) \ . \tag{12.70}$$

Utilizzando gli stessi argomenti delle sezioni precedenti, calcolando $P_{m,i}(t,t'+\Delta t)-P_{m,i}(t,t')$ e utilizzando l'invarianza per traslazioni temporali (12.70) otteniamo la cosiddetta equazione di Kolmogorov in avanti:

$$\frac{dP_{m,i}(t)}{dt}=\sum_j (P_{m,j}(t)K_{j,i}-P_{m,i}(t)K_{i,j})=-\sum_j P_{m,j}(t)T_{j,i} \tag{12.71}$$

dove

$$T_{j,i}=-K_{j,i}+\delta_{i,j}\sum_l K_{i,l}. \tag{12.72}$$

Ovviamente bisogna aggiungere l'informazione sulle condizioni iniziali. Se al tempo zero il sistema sta certamente nello stato i, avremo che

$$P_{i,j}(0)=\delta_{i,j}\ . \tag{12.73}$$

L'equazione precedente non è di derivazione immediata, se vogliamo fare i passaggi con cura. Per esempio è evidente che l'equazione può essere scritta solo se

$$\sum_j K_{i,j}<\infty \tag{12.74}$$

altrimenti alcuni elementi diagonali della matrice T risulterebbero infiniti.

Se invece calcoliamo $P_{m,i}(t+\Delta t,t')-P_{m,i}(t,t')$ otteniamo la cosiddetta equazione di Kolmogorov all'indietro:

$$\frac{dP_{m,i}(t)}{dt}=\sum_j (K_{m,j}P_{j,i}(t)-K_{m,j}P_{m,i}(t))=-\sum_j T_{m,j}P_{j,i}(t). \tag{12.75}$$

L'esistenza di due equazioni non deve stupire, ma è un fatto comune che in realtà abbiamo già incontrato in contesti simili: per esempio per le catene di Markov abbiamo che

$$P_{i,k}(n+1)=\sum_j P_{i,j}(n)P_{j,k}=\sum_j P_{i,j}P_{j,k}(n)\ . \tag{12.76}$$

In generale per una matrice $\mathbf{A}$ arbitraria abbiamo che

$$\mathbf{A}^{n+1}=\mathbf{A}^n\mathbf{A}=\mathbf{A}\mathbf{A}^n. \tag{12.77}$$

Se i conti sono stati fatti esattamente le matrici $\mathbf{A}$ e $\mathbf{A^n}$ commutano e quindi l'informazione contenuta nelle due equazioni è la stessa.

Non è banale trovare delle condizioni necessarie e sufficenti che ci assicurano (nel caso infinito dimensionale) dell'esistenza di una e una sola soluzione dell'equazione di Kolmogorov in avanti: una condizione sufficiente (ma eccessivamente restrittiva) è che esista una costante C, indipendente da i tale che

$$T_{i,i}=\sum_j K_{i,j}<C,\ . \tag{12.78}$$

Ovviamente se la somma precedente fosse divergente, non saremmo in grado di definire la matrice T e quindi le nostre povere equazioni differenziali per la probabilità sarebbero prive di senso. Nel caso in cui la somma precedente è convergente ed uniformemente limitata, le probabilità di transizione sono anch"esse uniformemente limitate. In questo caso è evidente che la condizione

$$\sum_i P_{m,i}(t)\leq 1 \tag{12.79}$$

implica che

$$\left|\frac{dP_{m,i}(t)}{dt}\right| < C \ . \tag{12.80}$$

La derivata rispetto al tempo delle probabilità di transizione non può mai diventare singolare e sfruttando i teoremi sui sistemi di equazioni differenziali si può dimostrare l'esistenza e l'unicità della soluzione.

La stessa condizione implica che nell'equazione (12.79) vale sempre l'uguaglianza, ovvero il processo di Markov non è divergente.

Ovviamente nel caso finito dimensionale le cose sono molto più semplici.

Formalmente la soluzione dell'equazione di Kolmogorov può scriversi come

$$P_{m,i}(t) = \sum_j P_{m,j}(0)(\exp(-Tt))_{j,i} \tag{12.81}$$

e l'esponenziale di una matrice finita dimensionale, sempre nel caso di autovalori non degeneri, si può scrivere facilmente come abbiamo già visto nella forma

$$P_{m,i}(t) = \sum_n d(n)_m s(n)_i \exp(-t\lambda(n)) \ , \tag{12.82}$$

dove λ sono gli autovalori e s e d gli autovettori della matrice T.

La classificazione dei processi di Markov può essere fatta sulla falsariga delle catene di Markov, con la semplificazione della non esistenza dei processi periodici. Non riportiamo questi risultati, ma ci limitiamo a far vedere che esiste una relazione molto stretta fra catene di Markov e processi di Markov.

Infatti, dato un Δt arbitrario possiamo scrivere che

$$P_i[n] = \sum_j (P^n)_{i,j} P_j[0] \ , \tag{12.83}$$

dove $t = n\Delta t$ e

$$P_{i,j} = (\exp(-\Delta t K))_{i,j} \ . \tag{12.84}$$

Infatti

$$\exp(-n\Delta t T) = (\exp(-\Delta t T)) \ . \tag{12.85}$$

L'equazione (12.83) è quella caratteristica di una catena di Markov. In altri termini se osserviamo un processo di Markov a intervalli di tempo multipli di Δt (visione stoboscopica) il processo di Markov si riduce ad una catena di Markov. Inoltre è possibile usare lo sviluppo in potenze di Δt, che è certamente convergente per Δt piccolo se la condizione (12.78) è soddisfatta per calcolare la matrice P sempre nella regione dove Δt piccolo. In questo modo è possibile derivare le proprietà della matrice P a partire da quella della matrice T.

La classificazione dei processi di Markov può essere fatto sulla falsariga di quella fatta per catene di Markov (processi riducibili-irriducibili, decomponibili-indecomponibili . . .). Notiamo di passaggio che sono tuttavia assenti processi periodici.

Ovviamente possiamo estendere sia il concetto di catena di Markov, sia il concetto di processo di Markov al caso in cui l'insieme degli stati non è numerabile, ma ha la potenza del continuo, per esempio è etichettato da un numero reale. Un esempio esplicito di catena di Markov definita su uno spazio continuo è dato dai cammini aleatori sul continuo. Al contrario i processi descritti dall'equazione di Langevin fanno parte dei processi di Markov definiti sul continuo. Il comportamento di processi di Markov sul continuo può essere studiato in generale e possono essere scritte equazioni che generalizzano quelle di Fokker-Plank. Uno studio di questa difficile problematica esula dagli scopi di questo libro.

Chapter 13

L'Entropia

13.1 L'entropia microscopica e il teorema di Shannon

13.1.1 Definizione dell'entropia

La definizione di entropia di una funzione di probabilità discreta è la seguente

$$S[P] = -\langle \log(P) \rangle_P = -\sum_{n=1,N} P_n \log(P_n) \tag{13.1}$$

dove N può essere anche infinito.

È immediato dimostrare che l'entropia non può essere negativa. Un'argomento di convessità può essere usato che il valore massimo dell'entropia è $\ln(M)$. Due casi limite:

1. Nel primo caso esiste un k tale che

   $$P_k = 1; \quad p_n = 0 \quad \text{per} \quad n \neq k\ . \tag{13.2}$$

   L'entropia di questa distribuzione è nulla.

2. Nel secondo caso

   $$\begin{aligned} P_k = 1/M \quad &\text{per} \quad n \leq M\ , \\ P_k = 0 \quad &\text{per} \quad n > M\ . \end{aligned} \tag{13.3}$$

   L'entropia di questa distribuzione è il valore massimo ovvero $\ln(M)$.

È facile vedere che se l'entropia è uguale a zero o a $\ln(M)$ la distribuzione di probabilità deve essere quella descritta in uno dei due esempi precedenti.

Spesso viene affermato in meccanica statistica che la quantità $M_{eff} = \exp(S[P])$ ha il significato del volume dello spazio delle fasi effettivamente occupato dal sistema, ovvero il numero di stati *effettivo*. Quest'affermazione apparentemente vaga (che è chiara solo nei due casi estremi che abbiamo appena illustrato) può essere resa più precisa utilizzando il teorema di Shannon.

Nello stesso modo possiamo definire l'entropia di una distribuzione continua come

$$S[P] = -\int dx P(x) \ln(P(x)) \equiv -\langle \ln(P)_P \rangle \tag{13.4}$$

Nel caso di una distribuzione continua l'entropia non è più necessariamente positiva. Per esempio se $P(x) = h^{-1}$ per $0 \leq x \leq h$ l'entropia è proprio $\ln(h)$, funzione che può avere un segno arbitrario.

13.1.2 Enunciato del Teorema di Shannon

Il teorema di Shannon si può enunciare nel modo seguente.

Supponiamo di avere un alfabeto composto da N caratteri. Consideriamo una sequenza di L caratteri (una parola di lunghezza L) che è identificata da una sequenza c_i per $i = 1, L$, dove i numeri c_i sono compresi tra 0 e $N-1$, estremi esclusi. Questa sequenza, che indicheremo con C, è il messaggio che vogliamo trasmettere.

È evidente che esiste una corrispondenza biunivoca (codifica) fra le parole di lunghezza L e i numeri k compresi tra 0 e $N^L - 1$. Questa corrispondenza può essere data per esempio da

$$K(C) \equiv \sum_{i=1,L} c_i N^{i-1} \tag{13.5}$$

In questo modo per trasmettere una parola possiamo limitarci a trasmettere le cifre in binario che identificano il numero K. Possiamo dire che per trasmettere un numero di M cifre binarie abbiamo bisogno di trasmettere M bits di informazione [1]. Le parole che corrispondono a valori bassi di K possono essere trasmessi usando un numero di bit basso. Se tutte le parole sono equiprobabili, e quindi tutti i numeri K, compresi tra 0 e $N^L - 1$ sono equiprobabili, il numero medio di bit necessario sarà dato approssimativamente da

$$L \ln_2(N) \ , \tag{13.6}$$

dove $\ln_2(N) \equiv \frac{\ln(N)}{\ln(2)}$ è il logaritmo in base 2.

Molto spesso il messaggio che dobbiamo trasmettere non è una sequenza di numeri random. Ha un significato, è scritto in una lingua, possiede una struttura e quindi non tutti i messaggi hanno la stessa probabilità. Se sia la persona che trasmette, che la persona che riceve il messaggio, sono a conoscenza della distribuzione di probabilità del messaggio, possono concordare di utilizzare anche codifiche differenti, ovvero associare in maniera univoca un numero ad una parola. In altri termini una codifica consiste nel assegnare una funzione $\mathcal{O}(C)$ sull'insieme di tutti i messaggi, che sia invertibile, ovvero, dato il valore di $\mathcal{O}(C)$ possiamo risalire in maniera univoca a C. La funzione $K(C)$ è l'esempio più semplice di una codifica.

Associare le parole più probabili a numeri più corti è conveniente per ridurre la il numero di bits necessari a trasmettere il messaggio vero. In generale ci possiamo domandare quanto possiamo guadagnare se seguiamo questa strategia, o meglio quale è la lunghezza minima se utilizziamo una codifica ottimale e quale sia questa codifica. La risposta a queste domande ci viene fornita dal teorema di Shannon.

Consideriamo il caso più semplice in cui ciascuna lettera c ha una probabilità p_n e che il messaggio è stato costruito con lettere distribuite a caso senza alcuna correlazione. Il teorema di Shannon afferma che, trascurando termini che crescono più lentamente di L:

- Esiste una codifica tale che per grandi L la probabilità che un messaggio abbia bisogno di essere trasmesso con più di
$$L \ S_2[P] \equiv \frac{L \ S[P]}{\ln 2} \tag{13.7}$$
bits tende a zero quando L tende all'infinito.

[1] In realtà dobbiamo anche trasmettere un segnale di stop, ovvero di fine messaggio. Come si possa trasmettere un simile segnale non è cruciale per le considerazione che vogliamo fare e possiamo sorvolare. Il lettore curioso può trovare una breve discussione in appendice.

- Non esiste una codifica tale che per grandi L la probabilità che un messaggio abbia bisogno di essere trasmesso con meno di
$$L\ S_2[P] \equiv \frac{L\ S[P]}{\ln 2} \tag{13.8}$$
bits tende a 1 quando L tende all'infinito dove $S[P] = -\sum_{c=1,N} p_c \log(p_c)$.

In concreto il numero di bit necessari per trasmettere un messaggio lungo è uguale all'entropia in base 2 della distribuzione di probabilità.

Un caso estremo del teorema di Shannon è dato da $S = 0$. Nessun messaggio è necessario.

È necessario ovviamente in caso di trasmissione reale che entrambi le persone (il trasmittente ed il ricevente) conoscano la distribuzione di probabilità P. Dato che la conoscenza di questa distribuzione di probabilità permette di risparmiare la trasmissione di

$$I = L(S_2[P] - \ln_2 N) \tag{13.9}$$

bits possiamo dire che l'informazione contenuta nella distribuzione di probabilità (per quanto concerne la trasmissione di un messaggio di L lettere) è data da I.

13.1.3 Dimostrazione del Teorema di Shannon

Nel caso in cui tutte le sequenze sono equiprobabili la dimostrazione del il teorema è immediata. La funzione $K(C)$ che abbiamo precedentemente definito, o qualunque altra codifica, soddisfano le condizioni del teorema ed è evidente che non si può fare di meglio.

In generale la dimostrazione si può fare in tre passi.

- Si costruisce una codifica seguendo un opportuno algoritmo.
- Si dimostra che questa codifica soddisfa le proprietà del teorema di Shannon
- Si dimostra che non si può fare di meglio.

Il primo passo è molto facile. Notiamo preliminarmente che ad ogni messaggio c è associata una probabilità
$$p(C) = \prod_{i=1,L} P_{c_i} \ . \tag{13.10}$$
Infatti se le lettere sono scelte a caso con la distribuzione $p(c)$ l'equazione precedente fornisce proprio la probabilità del messaggio C.

Possiamo ordinare i messaggi in ordine di probabilità decrescente. In altri termini, se indichiamo con $\mathcal{O}(C)$ il numero d'ordine del messaggio, l'ordinamento scelto implica che

$$(P(C_1) > P(C_2)) \to (\mathcal{O}(C_1) < \mathcal{O}(C_2)) \ . \tag{13.11}$$

Se imponiamo che i caso di probabilità uguale (dove la regola precedente non basta per assegnare un numero d'ordine) i messaggi sono ordinati in ordine lessicografico (alfabetico), ovvero che

$$(P(C_1) = P(C_2) \quad \text{e} \quad K(C_1) < K(C_2) \to (\mathcal{O}(C_1) < \mathcal{O}(C_2)) \ , \tag{13.12}$$

abbiamo costruito in maniera univoca la nostra codifica.

Passiamo alla seconda parte della dimostrazione. Consideriamo in generale una funzione f_c definita per le lettere. Indichiamo con

$$\langle f\rangle = \sum_{c=1,N} f_c P_c \ . \tag{13.13}$$

Ad ogni messaggio C possiamo associare la quantità $f(C)$ definita da

$$f(C) = L^{-1} \sum_{i=1,L} f_{c_i} \ . \tag{13.14}$$

La legge dei grandi numeri ci assicura (ed il teorema del limite centrale permette di fare di meglio) che la probabilità che $|f(C)- < f > | > \epsilon$, tende a zero quando L tende ad infinito, ovvero la probabilità che il messaggio C appartenga all'insieme dove $|f(C)- < f > | > \epsilon$ tende a zero quando L tende ad infinito.

Applichiamo questo risultato al caso in cui

$$f_c = \ln(P_c) \tag{13.15}$$

e quindi

$$f(C) = L^{-1}\ln(P(C)) \ . \tag{13.16}$$

Abbiamo quindi che, trascurando messaggi che appartengono ad un insieme la cui probabilità totale è tende a zero quando L tende ad infinito, per ϵ arbitrario e L sufficientemente grande

$$\exp(-L(S[P]+\epsilon)) < P(C) < \exp(-L(S[P]-\epsilon)) \ . \tag{13.17}$$

Questo risultato implica che (trascurando un numero di sequenze la cui probabilità totale è tende a zero quando L tende ad infinito) i numeri d'ordine soddisfano la diseguaglianza

$$\exp(L(S[P]-\epsilon)) < \mathcal{O}(C) < \exp(L((S[P]+\epsilon)) \ . \tag{13.18}$$

Infatti il numero totale di messaggi che appartiene all'insieme per cui la relazione 13.17 è soddisfatta deve essere dell'ordine di $\exp(L(S[P])$. Infatti ciascun messaggio ha una probabiltà dell'ordine di $\exp(-L(S[P])$ e la loro probabilità totale (la somma delle probabilità individuali) è circa 1. il loro numero è $\exp(L(S[P])$. Ovviamente possono esistere messaggio con probabilità maggiore di $\exp(-L(S[P])$. Dato che la loro probabiltà totale tende a zero, ed in ogni caso e' più piccola di 1, il loro numero deve essere più piccolo di $\exp(L(S[P])$. A parte quindi questi messaggi (che avranno un numero d'ordine piccolo) il messaggio che appartiene all'insieme dove la relazione 13.17 è soddisfatta avranno un numero d'ordine circa uguale a $\exp(L(S[P])$. Ovviamente i rimanenti messaggi avranno un numero d'ordine superiore, ma la loro probabilità totale è trascurabile quando L tende ad infinito.

Dato che il numero di bits necessario per trasmettere un messaggio è il logaritmo in base 2 della codifica, se prendiamo come codifica il numero d'ordine abbiamo abbiamo dimostrato la seconda parte.

In breve abbiamo diviso le sequenze in tre insiemi

1. Un primo insieme in cui la probabilità $P(C)$ è maggiore di $\exp(N(-S[P]+\epsilon)$. Il numero di elementi di ques'insieme è più piccolo di $\exp(N(+S[P]-\epsilon)$

2. Un secondo insieme in cui la probabilità $P(C)$ è minore di $\exp(N(-S[P]+\epsilon)$ ed è anche maggiore di $\exp(N(-S[P]-\epsilon)$. Il numero di elementi di ques'insieme è circa $\exp(N(+S[P])$.

3. Un terzo insieme in cui la probabilità $P(C)$ è minore di $\exp(N(-S[P]\epsilon\epsilon)$ ed è anche maggiore di $\exp(N(-S[P]-\epsilon)$. Quasi tutte le sequenze appartengono al terzo insieme.

Abbiamo quindi dimostrato la seconda parte sfruttando il fatto che il primo ed il terzo insieme hanno una probabilità totale arbitrariamente piccola per N grande e che la probabilità del terzo insieme è arbitrariamente vicina a 1.

Per dimostrare la terza parte possiamo osservare che tutte le sequenze (trascurando un numero di sequenze la cui probabilità totale è tende a zero quando L tende ad infinito) hanno una probabilità circa uguale a

$$\exp(-LS[P]) \tag{13.19}$$

e il loro numero è dato da

$$\exp(LS[P]). \tag{13.20}$$

È quindi evidente che che non è possibile trovare una codifica che permetta di identificare una di queste sequenza con un numero di bits inferiore a

$$LS_2[P] \tag{13.21}$$

e quindi non è possibile trovare una codifica asintoticamente migliore.

Molto spesso per L grande il metodo non è molto pratico in quanto bisogna esaminare tutte le N^L sequenze per determinare la codifica. Ci sono metodi più semplici che permettono di codificare il messaggio in maniera più semplice. Tuttavia la discussione questo punto, di grande interesse nelle comunicazione o nella compressione dei files del calcolatore, ci porterebbe troppo fuori strada e non verrà approfondito.

13.2 Alcuni richiami di meccanica statistica

13.2.1 Principi di base della meccanica statistica

In questa sezione consideriamo solamente sistemi classici. Indichiamo con $H(C)$ l'Hamiltoniana come funzione della configurazione C del sistema; definiamo la funzione di partizione

$$Z(\beta) = \int dC \exp(-\beta H(C)), \tag{13.22}$$

dove $\beta = (kT)^{-1}$, k è la costante di Boltzmann e T è la temperatura assoluta. Nel caso di un sistema con un numero discreto di configurazioni, l'integrale viene sostituito da una somma.

Argomenti standard implicano che per un sistema a contatto con un bagno termico (o per un sistema grande isolato in cui osserviamo solo una sua piccola parte) dopo un tempo sufficientemente grande la distribuzione di probabilità è data:

$$P_{eq}(C) = \frac{\exp(-\beta H(C)}{Z(\beta)} \propto \exp(-\beta H(C)). \tag{13.23}$$

Questa distribuzione caratterizza l'equilibrio termico.

Tutti i sistemi in contatto con un bagno termico arrivano all'equilibrio termico in un tempo sufficientemente lungo. Bisogna però tener conto che nel mondo reale che ci sono sistemi fisici che raggiungono l'equilibrio dopo tempi molto più grandi di quelli tipici degli esperimenti umani: sistemi di questo tipo sono in stati metastabili. Lo studio dei sistemi con stati metastabili è molto più complicato di quello dell'equilibrio termico in quanto il comportamento del sistema dipende dalla storia del sistema. Un esempio tipico sono le leghe metalliche, in cui le proprietà fisiche (resistenza allo sforzo, fragilità) dipendono da come la lega è stata raffreddata, velocemente (si pensi all'immagine tipica dei film: la spada incandescente viene immersa nell'acqua), lentamente o ha subito cicli termici.

In generale, data una funzione $A(C)$, il suo valor medio statistico ad un dato valore di β è definito come

$$\langle A \rangle \equiv \int dC P_{eq}(C) A(C) = \frac{\int dC A(C) \exp(-\beta H(C)}{Z(\beta)} \ , \tag{13.24}$$

dove per allegerire la notazione non abbiamo indicato in maniera esplicita la dipendenza da β di $\langle A \rangle$. Consideriamo un'Hamiltoniana dipendente da un parametro ϵ, per esempio

$$H_\epsilon(C) = H_0(C) + \epsilon B(C). \tag{13.25}$$

Il teorema della risposta lineare afferma che

$$\frac{d}{d\epsilon} < A >_\epsilon \Big|_{\epsilon=0} =< AB >_c \equiv < AB > - < A >< B >, \tag{13.26}$$

dove $\langle \cdot \rangle_\epsilon$ indica il valore d'aspettazione calcolato con l'Hamiltoniana$H_\epsilon(C)$, mentre i valori d'aspettazione nella lato destro della precedente equazione sono stati calcolati con l'Hamiltoniana H_0. La quantità $< AB >_c$ è chiamata funzione di correlazione connessa (come abbiamo visto precedentemente). La dimostrazione è semplice: basta scrivere esplicitamente $< A >_\epsilon$, effettuare la derivata rispetto a ϵ e mettere $\epsilon = 0$.

La formula 13.26 è la versione statica del teorema di fluttuazione e dissipazione. Normalmente il teorema di fluttuazione e dissipazione, nella sua forma completa coinvolge le funzioni di correlazione e di risposta dipendenti dal tempo.

A partire dalla funzione di partizione si possono ricostruire le varie quantità termodinamiche del modello. Per esempio l'energia libera totale ($F(\beta)$) e l'energia interna ($E(\beta) \equiv < H >$) sono date rispettivamente da

$$\begin{aligned} F(\beta) &= \frac{-\ln(Z(\beta))}{\beta}, \\ E(\beta) =< H > &= \frac{\partial(\beta F(\beta))}{\partial\beta}. \end{aligned} \tag{13.27}$$

Utilizzando la definizione precedente di entropia, l'energia libera si può anche scrivere come

$$F(\beta) = E(\beta) - TS(\beta) \tag{13.28}$$

dove usiamo le unità di misura con $k = 1$ e S è l'entropia microscopica, ovvero l'entropia definita dall'equazione 13.4 ove abbiamo preso come probabilità $P_{eq}(C)$. Infatti $\ln(P_{eq}(C)) = -\beta H(C) - \ln(Z)$ e quindi

$$\langle \ln(P(C)) \rangle = -\beta E + \beta F \tag{13.29}$$

Una calcolo dettagliato mostra infatti che S così definita è l'entropia macroscopica, (ovvero il fattore integrante del calore) che si definisce a partire dal secondo principio della termodinamica (si veda il capitolo 1,17 di [8]) a partire dalla relazione $\delta Q = T^{-1} dS$.

Inoltre possiamo notare che se consideriamo la funzione

$$-\Phi(\beta) = \beta F(\beta) \ , \tag{13.30}$$

la trasformata di Legendre di questa funzione è proprio l'entropia $S(E)$ (a meno di segni).

13.2.2 Principi Variazionali

Comunemente viene detto che l'energia libera di un sistema isolato non può che diminuire. Questa affermazione può essere formalizzata nel seguente modo introducendo un ensemble di sistemi e una distribuzione di probabilità $P(C)$. Ad ogni possibile distribuzione di probabilità P associamo una quantità $\mathbf{F}[P]$, ovvero l'energia libera associata alla distribuzione di probabilità P. Vogliamo dimostrare che $\mathbf{F}(P)$ assume il suo valore minimo quando $P(C) = P_{eq}(C)$. L'affermazione che $\mathbf{F}[P]$ è una funzione monotona decrescente del tempo implica che i sistemi non si possono allontanare dallo stato di equilibrio, un volta raggiunto.

Partiamo dalla definizione che abbiamo presentato precedentemente di entropia di in probabilità P che indichiamo con $\mathbf{S}[P]$, Definiamo quindi l'energia libera come

$$\mathbf{F}[P] = \mathbf{U}[P] - T\mathbf{S}[P], \tag{13.31}$$

dove

$$\mathbf{U}[P] =< H >_P \equiv \int dP(C)H(C). \tag{13.32}$$

Un semplice conto, basato sui moltiplicatori di Lagrange, mostra che il minimo di $\mathbf{F}[P]$ è dato proprio dalla distribuzione di equilibrio eq. (13.23).

Il lettore interessato ad avere maggiori informazioni sull'entropia in meccanica statistica e sull'utilizzo del principio variazionale per il calcolo approssimato dell'energia libera (approssimazione di campo medio) può consultare un libro di meccanica statistica (per esempio [8]).

13.2.3 Grandi Deviazioni e Relazione con la Termodinamica

In meccanica statistica di equilibrio molti problemi possono essere messi sotto la forma descritta nella sottosezione precedente.

Per esempio possiamo considerare un sistema composto da L variabili σ_i, dove è definita una densità di energia $H[\sigma]$. La funzione di partizione si può scrivere come

$$Z_L(\beta) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(-\beta H[\sigma]\right) \ . \tag{13.33}$$

Se l'Hamiltoniana non è patologica il limite per L che tende ad infinito della densità di energia libera,

$$f(\beta) = \lim_{L\to\infty} \frac{-\ln(Z_L(\beta))}{\beta L} \ , \tag{13.34}$$

esiste ed è finito.

Se consideriamo la distribuzione di probabilità

$$P[\sigma] = \exp(-\beta H[\sigma]) \ , \tag{13.35}$$

e vogliamo studiare il valor medio rispetto a questa probabilità di $\exp(z\sum_{i=1,L} A_i)$, è utile considerare la funzione di partizione e la corrisponente densità di energia libera $f(\beta, z)$ associate all'Hamiltoniana

$$H_z[\sigma] = \sum_{i,L}(H_i(\sigma) - \frac{z}{\beta}A_i) \ . \tag{13.36}$$

La funzione $f(\beta, z)$ è quindi data dalla formula

$$f(\beta, z) = \lim_{L\to\infty} \frac{-\ln(Z_L(\beta, z)}{\beta L} \ , \quad Z_L(\beta.z) = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta H_z[\sigma]) \ . \tag{13.37}$$

È facile vedere che

$$\lim_{L\to\infty} \frac{\ln(\langle \exp(z\sum_{i=1,L} A_i)\rangle)}{L} = -\beta(f(\beta,z) - f(\beta,0)) \ . \tag{13.38}$$

In altri termini il problema di calcolare il valor medio di $\exp(z\sum_{i=1,L} A_i)$ coincide con il problema di calcolare la densità di energia libera di un sistema in cui si è aggiunto un termine proporzionale a $\sum_{i=1,L} A_i$ nell'hamiltoniana.

Per sapere la distribuzione di probabilità della quantità $\sum_{i=1,L} A_i)$ nella regione delle grandi deviazioni, dobbiamo calcolare la funzione di partizione di un problema di meccanica statistica per valori arbitrari della temperatura. Si potrebbe validamente sostenere il punto di vista (forse un po' troppo unilaterale) che tutta la meccanica statistica è un caso particolare della teoria delle grandi deviazioni.

In ogni caso è interessante notare che il passaggio dal parametro h al valor medio di x che abbiamo fatto nella sezione 4.3 utilizzando la trasformata di Legendre è l'omologo del passaggio che abbiamo visto nel paragrafo precedente per ottenere l'entropia come funzione dell'energia ($S(E)$) a partire dal potenziale $\Phi(\beta)$.

13.3 L'entropia di Kolmogorov Sinai e esponenti di Liapunov

13.3.1 Esponenti di Liapunov

Sarebbe interessante parlare dell'entropia di Kolmogorov e Sinai che appare nella teoria dei sistemi dinamici come pure della complessità algoritmica che generalizza il concetto di entropia in modo di applicarlo ad una singola configurazione ma sarebbe troppo lungo.

Per semplicità ci limitiamo a fare alcuni cenni alla definizione dell'entropia di Kolmogorov Sinai e alla relazione con gli esponenti di Liapunov (nel caso unidimensionale).

Come esempio di sistema dinamico consideriamo le successioni

$$x(n+1) = f(x(n)) \ , \tag{13.39}$$

dove x è un vettore N-dimensionale e f è una funzione liscia a valori vettoriali che porta un insieme limitato $\mathcal{D}$ (appartenente allo spazio N-dimensionale) in se stesso.

Se $x(0)$ appartiene al dominio $\mathcal{D}$ la successione degli x è ben definita e calcolabile con certezza (non ci sono elementi probabilistici): $x(n)$ è semplicemente dato da

$$x(n) = f^{(n)}(x(0)) \ , \tag{13.40}$$

dove $f^{(n)}(x)$ è data dall'applicazione della funzione f n volte.

Supponiamo di conoscere con una certa precisione la condizione iniziale; quest'incertezza si riflette sul valore di x al tempo n e può o crescere o diminuire con n. Se l'incertezza diminuisce con n il comportamento a grandi tempi non è influenzato da piccoli errori sul dato iniziale. Il caso interessante è quando invece l'incertezza diventa sempre più grande all'aumentare di n. Possiamo essere più quantitativi se introduciamo l'esponente principale di Liapunov Λ definito come

$$|f^{(n)}(x+\Delta x) - f^{(n)}(x)| \approx |\Delta x| \exp(n\Lambda) \ . \tag{13.41}$$

La formula precedente è valida nella regione Δx piccolo, n grande ma $\Delta x \exp(n\Lambda)$ piccolo.

Un esponente principale di Liapunov positivo implica che due traiettorie di differiscono di poco nella condizione iniziale, differiranno di una quantità grande non appena $n\Lambda > -\ln(\Delta x)$, ovvero non appena la quantità $\Delta x \exp(n\Lambda)$ cessa di essere piccola.

La formulazione precedente può essere messa in una forma più precisa introducendo derivate e limiti, ma per semplicità ci limitiamo solamente a dare le idee principali.

Più in dettaglio nel caso N dimensionale, introducendo le varie componenti, possiamo scrivere che

$$f^n_\alpha(x + \Delta x) - f^n_\alpha(x) \approx \sum_{\beta=1,N} T^{(n)}_{\alpha,\beta}(x)\Delta x_\beta \ . \tag{13.42}$$

Gli autovalori della matrice T sono per n grande in ordine di modulo decrescente proporzionali a

$$\exp(N\lambda(a)) \ , \tag{13.43}$$

con $a = 1, N$. L'autovalore più grande $\lambda(1)$ coincide con l'autovalore principale Λ.

Nei casi buoni in cui la funzione f soddisfa una serie di condizioni che non stiamo qui ad elencare, gli esponente di Liapunov non dipendono dal punto di partenza x (a parte punti eccezionali).

La lista degli esponenti di Liapunov dà informazioni molto più dettagliate sul comportamento del sistema: per esempio è possibile che l'errore in una direzione aumenti con n mentre in altre direzioni diminuisca con n.

Consideriamo per esempio la funzione f definita su uno spazio bidimensionale:

$$f_1(x, y) = a\ x \mod 1, \quad f_2(x, y) = b\ y \mod 1 \ . \tag{13.44}$$

È facile vedere che la funzione f porta un punto del quadrato $0 \le x < 1$, $0 \le y < 1$ dentro lo stesso quadrato e che i due esponenti di Liapunov sono $\ln(a)$ e $\ln(b)$. Il caso in cui $a > 1$ e $b < 1$ corrisponde ad un aumentare con n dell'incertezza su x ed a una riduzione dell'incertezza su y.

13.3.2 Una prima definizione della produzione di entropia

L'idea di base di Kolmogorov e Sinai è di caratterizzare la perdita di informazione sulla posizione del punto $x(n)$ all'aumentare di n mediante un aumento dell'entropia della probabilità del punto x. Procedendo in maniera ingenua potremmo supporre che all'istante iniziale il punto x è noto con ottima precisione ed è caratterizzato da una probabilità P_0 concentrata in una regione piccola dello spazio delle fasi e quindi da un'entropia

$$S(0) = S[P_0] \tag{13.45}$$

fortemente negativa. Per valori intermedi di n possiamo avere che

$$S(n) \equiv S[P_n] = cost + n\ I \ , \tag{13.46}$$

dove I per definizione è la perdita di informazione per unità di tempo. La formula precedente, specialmente nel caso di I positiva non può essere valida per n troppo grandi in quanto l'entropia non può diventare troppo grande (è certamente sempre più piccola di $\ln(V(\mathcal{D})$ dove $(\mathcal{D})$ è il volume del dominio $\mathcal{D}$. Prendendo l'entropia iniziale sufficientemente piccola, la regione in n dove si osserva un aumento lineare diventa arbitrariamente grande.

La definizione di I è perfettamente legittima, ma ha lo svantaggio di dare, nell'esempio che abbiamo precedentemente definito (eq. 13.44)

$$I = \ln(ab) = \ln(a) + \ln(b) \ . \tag{13.47}$$

In questo caso l'aumento dell'incertezza in x per $a > 1$ è compensato da una diminuzione dell'incertezza in y per $b < 1$ e se $ab < 1$ abbiamo che I è negativo, nonostante che di fatto la posizione del sistema per n grande sia completamente aleatoria (seppure molto vicina alla retta $y = 0$) se la posizione iniziale ha una piccola incertezza ed a è positivo.

Questa compensazione è in particolare sempre presente per sistemi Hamiltoniani, dove il volume dello spazio delle fasi è conservato (come segue dal noto teorema di Liouville) l'entropia $S(n)$ non dipende da n e otteniamo il risultato banale $I = 0$. La definizione di I non ci dà una buona quantità per quantificare la perdita di informazione nel caso di un sistema Hamiltoniano

13.3.3 L'Entropia di Kolmogorov-Sinai

Kolmogorov e Sinai hanno dato una definizione della perdita di informazione (e quindi di produzione di entropia) associata ai processi dinamici che cattura bene l'aumento dell'incertezza nella regione $a > 1$ e $b < 1$. In generale in altri sistemi con esponenti di Liapunov di segno diverso l'entropia di Kolmogorov-Sinai non ha gli svantaggi della definizione precedente, ma la sua definizione è lievemente più complicata. Ne presentiamo qui una versione semplificata al massimo.

Un modo possibile di procedere è il seguente. Partiamo come dal caso precedente da una funzione $f(x)$ che porta una regione limitata dello spazio N dimensionale in se stessa. Prendiamo un numero ϵ piccolo e definiamo delle coordinate intere

$$i_\alpha = \mathrm{int}(x_\alpha \epsilon^{-1}) \ , \tag{13.48}$$

dove $\mathrm{int}(z)$ è la parte intera di z. Lo spazio è quindi diviso in tante regioni (in pratica delle scatoline) di volume ϵ^N costituite da tutti i punti che hanno la stessa coordinata intera i. Indichiamo con $B(i)$ ciascuna di queste regioni. Data una distribuzione di probabilità $P(x)$ possiamo definire una probabilità $p(i)$ come la probabilità della scatolina etichettata da i, ovvero

$$p(i) = \int_{x \in B(i)} dx \ P(x) \ . \tag{13.49}$$

Possiamo definire un'entropia ϵ-regolarizzata, ovvero l'entropia della distribuzione $p(i)$

$$S_\epsilon[P] = -\sum_i p_i \ln(p_i) \ . \tag{13.50}$$

Nel caso in cui $P(x)$ è una funzione sufficientemente regolare, è facile vedere che per ϵ piccolo la $P(x)$ è approssimativamente costante entro ciascuna scatolina e quindi si ha che

$$S_\epsilon[P] = S[P] + N \ln(\epsilon) \ . \tag{13.51}$$

Ovviamente la relazione precedente non non ha nessuna intenzione di essere vera nel caso in cui la funzione $P(x)$ abbia delle variazioni rapide sulla scala ϵ. L'entropia regolarizzata è assolutamente cieca a queste variazioni.

Prendiamo adesso una distribuzione iniziale che sia costante dentro una delle scatoline e zero altrove. In questo caso l'entropia iniziale è nulla. Se facciamo evolvere una tale distribuzione e ne calcoliamo l'entropia regolarizzata, quest'entropia sarà sensibile al fatto che distribuzione di probabilià si allarga in alcune direzioni ma non si accorgerà che la distribuzione di probabilità si stringe in altre direzioni, in quanto questo stringersi produce variazioni su scala più piccola di ϵ.

Per valori di n non troppo grandi avremo

$$S_\epsilon(n) = S_\epsilon[P_n] = cost + Kn \tag{13.52}$$

e in questo caso possiamo prendere K come misura dell'aumento dell'entropia e quindi della diminuzione dell'informazione. La quantità K così definita è l'entropia di Kolmogorov-Sinai.

Nel caso della trasformazione (13.44) che avevamo introdotto prima, è facile vedere che $K = \ln(a)$. Più in generale anche nel caso con un numero maggiore di dimensioni è valida la formula di Pesin, la quale afferma che l'entropia di Kolmogorov Sinai è la somma dei logaritmi di tutti gli esponenti di Liapunov positivi. La formula di Pesin riproduce il risultato $K = \ln(a)$ nel caso della trasformazione (13.44).

Appendice: Messaggi autodelimitanti

Il problema nasce se vogliamo inviare una serie di messaggi diversi. Se immaginiamo di inviare un segnale di stop per delimitare i messaggi abbiamo un serio problema. Infatti ad ogni istante possiamo trasmettere

- 0,
- 1,
- STOP.

In questo modo trasmettiamo $ln_2(3)$ bit di informazione e non 1 come avevamo supposto.

Il problema si può alleviare introducendo un alfabeto di 2^K caratteri (per $K = 8$ abbiamo il byte). Uno dei 2^K caratteri non viene utilizzato per la trasmissione e viene identificato con il segnale di STOP [2].

In questo caso ogni K bit inviati trasmettiamo

$$\ln_2(2^K - 1) \approx K - \frac{2^{-K}}{\ln(2)} \tag{13.53}$$

bit di informazione. Per K alto l'inclusione del segnale di stop nel linguaggio allunga la lunghezza del messaggio di molto poco.

Una soluzione più elegante consiste nell'usare messaggi autodelimitanti, ovvero tali che non serva avere un segnale di stop per determinare la loro fine.

Il metodo più semplice (non ottimale) consiste nell'aggiungere un cappello (*header* al messaggio. In questo cappello scriviamo in binario il numero di bit del messaggio. A questo punto dobbiamo sapere quando finisce il cappello. La soluzione più semplice consiste nell'inviare all'inizio del messaggio tanti zeri quante sono le cifre in binario della lunghezza del messaggio, successivamente la lunghezza del messaggio e per ultimo il messaggio stesso.

Facciamo un esempio concreto. Supponiamo che il messaggio da inviare sia

$$10101110001110100\,, \tag{13.54}$$

ovvero un messaggio di 17 cifre. Il messaggio autodelimitante che viene inviato è

$$00000\ 10001\ 10101110001110100, \tag{13.55}$$

dove gli spazi non sono trasmessi ma aiutano il lettore a separare le varie parti del messaggio.

[2] Questo meccanismo viene utilizzato nella codifica delle proteine nel DNA.

Quando riceviamo questo messaggio, contando il numero di zeri all'inizio capiamo che la lunghezza del messaggio è un numero di 5 cifre (la lunghezza del messaggio è un numero che necessariamente comincia con 1 [3] Il numero di caratteri del messaggio è quindi 10001, (17 in binario). Le successive 17 cifre sono il messaggio.

In questo modo, al posto di trasmettere i tre messaggi di 17, 15 e 6 bit come:

$$10101110001110100STOP101011100011101STOP10100\,, \tag{13.56}$$

possiamo trasmetterli senza utilizzare il un simbolo apposito per separare i messaggi come:

$$00000\ 10001\ 10101110001110100 \qquad 0000\ 1111\ 101011100011101 \qquad 000\ 101\ 10100\,, \tag{13.57}$$

dove dove anche in questo caso gli spazi non sono trasmessi, ma hanno la funzione di facilitare la lettura. Ovviamente dobbiamo sapere quando la trasmissione incomincia, altrimenti siamo nei guai!

In questo modo un messaggio autodelimitante è lungo $N + 2\ln_2(N)$, dove N è la lunghezza originale del messaggio. L'aumento è praticamente trascurabile per N grande.

Il metodo descritto è molto semplice e facile da ricordare. Utilizzando un metodo più complicato si può ridurre la lunghezza a circa $N + \ln_2(N)$ (precisamente a $N + \ln_2(N) + O(\ln(\ln(N)))$ e si può dimostrare che un tale metodo è ottimale.

[3] Trascuriamo il caso banale di messaggi di zero caratteri.

Bibliography

[1] Gould ...

[2] Benfatto Gallavotti, *libro su RG.*

[3] P. Billigsley, *Probability and Measure* (Wiley, New York, USA 1995).

[4] P. R. Halmos, *Measure Theory* (Springer-Verlag, New York, USA 1974).

[5] Kertesz Kondor, MC methods

[6] Knuth

[7] M. Loève, *Probability Theory* volumes *I* and *II* (Springer-Verlag, New York, USA 1977-1978).

[8] G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison Wesley.

[9] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: the Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, Cambridge, UK 1992).

[10] M. Reed and B. Simon, *Functional Analysis* (Academic Press, New York, USA 1972).

[11] A. Sokal, *libro su RG.*

[12] Wilson Kogut, RG.

[13] `http://random.mat.sbg.ac.at/`

Tavola T-COMPLEANNI.

Figura F-DUEINSIEMI

Figura F-TASSELLA

Figura F-TREINSIEMI

Figura F-CONDIZ

Contents