

# Il teorema di Liouville

*(Hamiltoniano)*

## Indice generale

Premessa.....	2
Spazio delle fasi.....	2
Tecnica degli Ensemble.....	5
Teorema di Liouville.....	7
Corollario sui volumi.....	9
Conclusioni.....	10

## Premessa

In rete è piuttosto difficile trovare approfondimenti sul significato del teorema di Liouville, così come riguardo le sue applicazioni, ad esempio nel campo della computazione reversibile. Questi appunti mirano a spiegare il significato del teorema, spiegando “come funziona” mediante esempi concreti. La dimostrazione del teorema è volutamente omessa, perché facilmente reperibile [online](#).

## Spazio delle fasi

Prima di introdurre il teorema di Liouville ricordiamo brevemente il significato di “spazio delle fasi”. Lo spazio delle fasi è un modo di rappresentare tutte le possibili evoluzioni di un sistema, le quali sono descritte da *traiettorie* in tale spazio. Questo spazio è diverso da quello delle *configurazioni*, che invece considera solo le posizioni correnti. Esemplicando, lo spazio delle configurazioni è una specie di fotografia del sistema (conosco la posizione di tutti gli elementi, ma non le loro velocità), mentre lo spazio delle fasi è una specie di sceneggiatura, che descrive l'evoluzione del sistema (cioè la sua “storia”) nel tempo, velocità incluse.

Ad ogni istante  $t$  lo **stato** del sistema è descritto da un singolo punto **S** nello spazio delle fasi: se il sistema evolve nel tempo (passando dall'istante  $t_1$  all'istante  $t_2$ ), allora nello spazio delle fasi il punto di coordinate **S**( $t_1$ ) sarà in genere diverso dal punto **S**( $t_2$ ).

Un esempio classico è l'evoluzione del [moto del pendolo](#), il cui spazio della fasi ha solo due dimensioni: in ascissa si colloca la posizione del pendolo, in ordinata la sua velocità. In questo caso la conservazione dell'energia (assumendo il pendolo ideale) impone un vincolo nello spazio delle fasi, per cui la traiettoria è un'ellisse le cui dimensioni dipendono dall'energia totale del sistema. Nel caso di un pendolo reale invece entrano in gioco fenomeni dissipativi, per cui l'energia non si conserva e il vincolo viene meno: il sistema è quindi libero di “esplorare” tutte le traiettorie di energia decrescente, e il pendolo si muove su una spirale concentrica.

Si può quindi dire che, nel caso del pendolo, ogni livello di energia corrisponde ad un'ellisse di dimensioni diverse: se avessimo a disposizione 10 pendoli con energia diversa, le rispettive traiettorie sarebbero 10 ellissi concentriche. Per questo motivo si dice che la conservazione dell'energia impone un vincolo al sistema, restringendo le traiettorie possibili all'interno di una zona circoscritta dello spazio delle fasi (che matematicamente viene detta *varietà differenziale*).

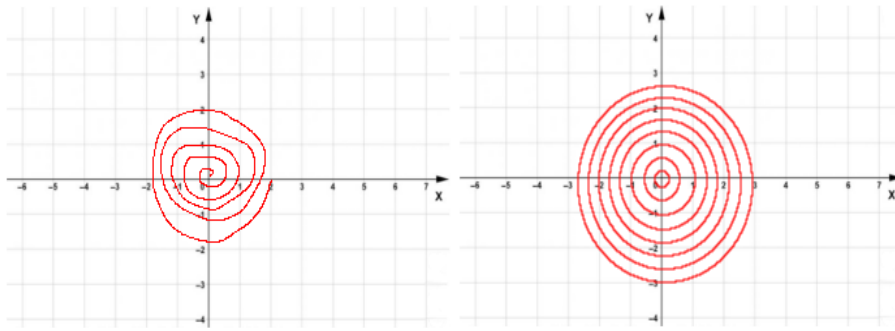


Figura 1: moto di un pendolo reale (sinistra) e di 10 pendoli ideali (destra)

Quando si considera un sistema di  $N$  particelle, dove ogni particella ha 6 gradi di libertà (posizione e velocità entrambe in  $\mathbb{R}^3$ ), allora lo stato del sistema è identificato da un vettore di  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{6N}$ . Ne segue che lo spazio delle fasi del sistema ha  $6N$  dimensioni, per cui è difficile rappresentarlo graficamente. Per aggirare il problema solitamente si associa l'asse delle ascisse alla *componente* di  $\mathbf{S}$  che ci interessa studiare, e l'asse delle ordinate alle componenti restanti. In questo modo lo spazio delle fasi è rappresentabile in un normale piano cartesiano, dove le coordinate  $x$  ed  $y$  sono in realtà vettori tali che la loro somma vettoriale sia  $\mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{S}$ . Formalmente ciò significa definire i vettori  $\mathbf{x}$  ed  $\mathbf{y}$  tramite il *prodotto scalare*:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \mathbf{S} \cdot \mathbf{e}_x && \rightarrow && \mathbf{x} // \mathbf{e}_x && \text{(la componente } \mathbf{x} \text{ è parallela al versore } \mathbf{e}_x\text{)} \\ \mathbf{y} &= \mathbf{S} \cdot \mathbf{e}_y && \rightarrow && \mathbf{y} // \mathbf{e}_y && \text{(la componente } \mathbf{y} \text{ è parallela al versore } \mathbf{e}_y\text{)} \end{aligned}$$

dove  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$  sono i *versori* delle direzioni  $x, y$  (vettori di lunghezza unitaria). Perciò, quando d'ora in poi andremo a visualizzare un punto di coordinate  $x, y$  nello spazio delle fasi, in realtà rappresenteremo il microstato dettagliato del sistema, ovvero l'insieme di *tutte* le coordinate e *tutte* le velocità di *tutte* le  $N$  particelle che costituiscono il sistema.

*Esempio:* supponiamo di dover studiare il sistema Terra Luna, pensandolo costituito da 2 corpi puntiformi. Allora, se  $\mathbf{x}_T = (x_{T1}, x_{T2}, x_{T3})$  e  $\mathbf{x}_L = (x_{L1}, x_{L2}, x_{L3})$  sono le coordinate della Terra e della Luna nell'istante  $t$ , e  $\mathbf{v}_T = (v_{T1}, v_{T2}, v_{T3})$  e  $\mathbf{v}_L = (v_{L1}, v_{L2}, v_{L3})$  sono le rispettive velocità, lo stato dell'intero sistema sarà descritto da un vettore  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{12}$  tale che:

$$\mathbf{S} = (x_{T1}, x_{T2}, x_{T3}, x_{L1}, x_{L2}, x_{L3}, v_{T1}, v_{T2}, v_{T3}, v_{L1}, v_{L2}, v_{L3})$$

A questo punto, se cambiamo sistema di riferimento, possiamo descrivere la posizione della Luna rispetto alla posizione della Terra, ovvero:

$$\underline{\mathbf{S}}' = (x_{T1}, x_{T2}, x_{T3}, \alpha, \beta, \gamma, v_{T1}, v_{T2}, v_{T3}, v_{L1}, v_{L2}, v_{L3})$$

dove  $\alpha, \beta, \gamma$  sono le coordinate della Luna rispetto alla Terra. Per esempio  $\alpha$  potrebbe essere la distanza tra i due pianeti,  $\beta$  l'ascensione retta della Luna e  $\gamma$  la sua declinazione rispetto all'eclittica. A questo punto, se ci interessa descrivere l'evoluzione del sistema dal punto di vista della Terra, possiamo scegliere come vettore  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^1$  la sola coordinata angolare  $\beta$ , e come vettore  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{11}$  le restanti coordinate:

$$\mathbf{x} = \beta$$

$$\mathbf{y} = (x_{T1}, x_{T2}, x_{T3}, \alpha, \gamma, v_{T1}, v_{T2}, v_{T3}, v_{L1}, v_{L2}, v_{L3})$$

per cui lo spazio della fasi del sistema Terra Luna potrebbe essere qualcosa del genere:

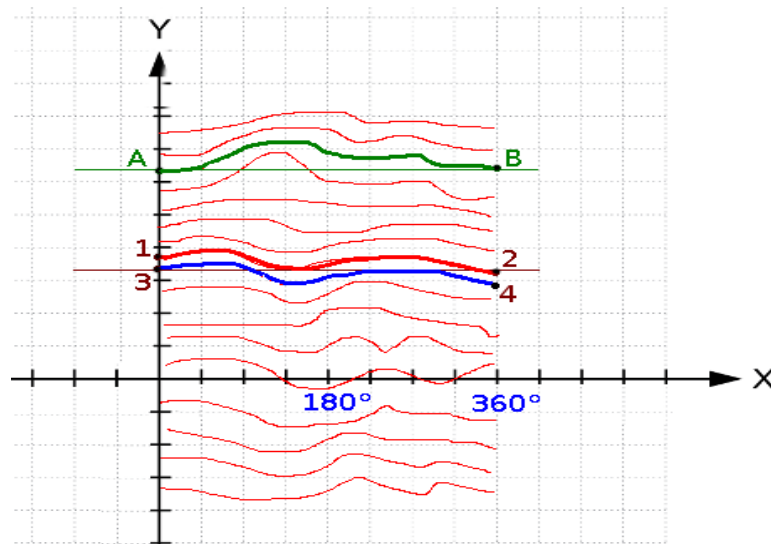


Figura 2: rappresentazione semplificata dello spazio delle fasi del sistema Terra Luna

Dove la coordinata angolare  $x = \beta$  (per scelta) è quella che ci interessa studiare, ovvero la posizione angolare della Luna relativa alla Terra (rotazione di  $360^\circ$  in circa 28 giorni), mentre tutte le altre coordinate (posizione della Terra, velocità della Terra, velocità della Luna, altre coordinate della Luna) sono "raggruppate" (ovvero "nascoste") dentro la variabile  $y$  (che a rigore è un vettore  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{11}$ ).

Il grafico di figura 2 si interpreta dicendo che il sistema può evolvere in modi diversi (ogni "modo" è una linea colorata in figura), ma dal punto di vista della Terra ciascuna evoluzione vedrà la coordinata angolare  $x$  variare sempre tra il valore  $0^\circ$  e il valore  $360^\circ$ . Consideriamo ad esempio l'evoluzione che parte dal punto **A** e finisce in **B**: se la coordinata  $y_B$  del punto di "fine orbita" è uguale alla coordinata  $y_A$  iniziale, allora alla fine di ogni orbita l'intero sistema si

ritrova nelle stesse identiche condizioni iniziali, per cui l'orbita si ripeterà identica (cioè il percorso verde è stabile) "giro dopo giro". Se invece, partendo dal punto **1** si arriva in un punto **2** tale che  $y_1 \neq y_2$ , e se il punto **2** fosse tale da avere  $y_2 = y_3$ , allora l'orbita successiva partirà dal punto **3**. Questo significa che se le condizioni iniziali del sistema Terra Luna sono rappresentate dal punto **1**, la prima evoluzione del sistema avverrà lungo la traiettoria **rosso scuro** (evoluzione 1 → 2), mentre la seconda evoluzione avverrà lungo la traiettoria **blu scuro** (evoluzione 3 → 4). In questo caso, col passare del tempo, l'evoluzione del sistema "salterà" da una riga all'altra al termine di ogni orbita lunare.

Questo esempio ci mostra come, anche se lo spazio della fasi di un sistema di un sistema di  $N$  particelle è rappresentato da un vettore  $\underline{\mathbf{S}} \in \mathbb{R}^{6N}$ , scegliendo in modo opportuno le componenti  $\underline{\mathbf{x}}$  ed  $\underline{\mathbf{y}}$  di  $\underline{\mathbf{S}}$  è possibile analizzare e studiare il sistema in un piano cartesiano di sole due dimensioni. L'efficacia di questa rappresentazione dipende solo da quanti e quali sono i parametri  $\underline{\mathbf{x}}$  che ci interessano: se le coordinate di  $\underline{\mathbf{x}}$  sono poche e/o significative (dal nostro punto di vista), allora la rappresentazione bidimensionale dello spazio delle fasi permette di visualizzare le possibili evoluzioni del sistema, anche se in realtà tale piano rappresenta uno spazio vettoriale di  $6N$  dimensioni.

## Tecnica degli Ensemble

Come vedremo tra poco, il teorema di Liouville afferma che la **densità degli stati** nello spazio della fasi è costante per i sistemi conservativi. Ma di quale *densità* si parla?

In meccanica statistica si usa spesso la tecnica degli ensemble, che consiste nell'immaginare di avere a disposizione moltissime copie del nostro sistema, aventi tutte lo stesso spazio delle fasi, ma condizioni iniziali diverse. Ad esempio, se il sistema in esame è un pendolo, l'ensemble da studiare è l'insieme di tutti i pendoli caratterizzati dalla stessa equazione, dove ciascun pendolo ha una diversa lunghezza del filo e/o una massa diversa, e inizia il suo movimento da una posizione diversa. È importante che tutti i pendoli siano descritti dalla stessa equazione, almeno dal punto di vista formale. Le uniche differenze ammesse riguardano i *parametri* dell'equazione stessa

*Esempio:* i pendoli descritti dall'equazione  $x'' = -\omega^2 \cdot x$  costituiscono un ensemble valido, anche se ognuno di loro è associato ad un diverso valore del parametro  $\omega$ ). In termini fisici ciò significa che l'ensemble non deve contenere pendoli a batteria, né pendoli collegati a qualche marchingegno, perché tali sistemi avrebbero una diversa equazione del moto, e quindi un diverso spazio delle fasi.

Fin tanto che tutti i sistemi sono governati dalla stessa equazione, è lecito rappresentare l'evoluzione dei sistemi in un unico spazio della fasi, esattamente come abbiamo fatto nel caso del pendolo. Le ellissi concentriche di figura 1 rappresentano infatti l'evoluzione temporale di 10 pendoli diversi, aventi tutti un diverso vincolo energetico (diverse condizioni iniziali).

Questa tecnica permette di visualizzare tutte le possibili evoluzioni del sistema in un unico grafico, dove ogni traiettoria rappresenta l'evoluzione di un singolo sistema. Ad esempio, se il nostro ensemble contiene 100 sistemi, che si muovono lungo 100 traiettorie diverse, in un certo istante  $t$  nello spazio delle fasi dell'ensemble si avranno 100 punti, ognuno collocato su una diversa traiettoria. Ciò permette di misurare la "densità di traiettorie" (o di punti in un istante fissato) in un volumetto  $dx \cdot dy$  dello spazio delle fasi, ovvero:

$$\rho(\mathbf{t}) = \text{Numero di sistemi nel volumetto} / dx \cdot dy$$

Dove abbiamo scritto  $\rho(t)$  per enfatizzare che, man mano che i sistemi dell'ensemble si spostano lungo le rispettive traiettorie, la densità  $\rho(t)$  potrebbe cambiare nel tempo. Ciò significa che la funzione densità è funzione di tutte le variabili del piano, ovvero  $\rho = \rho(x, y, t)$ .

*Esempio:* se consideriamo un ensemble di un centinaio di pendoli aventi lo stesso spazio delle fasi (cioè stessa equazione formale), il fatto che ogni sistema abbia condizioni iniziali diverse significa che tali condizioni iniziali corrispondono ad una "nuvola" di punti nello spazio delle fasi (figura 3, sinistra). Se ad un certo punto "diamo il via" ad alcuni di questi pendoli, essi inizieranno a muoversi partendo dalle loro condizioni iniziali, cioè percorrendo ciascuno la traiettoria che passa per il punto iniziale (punti blu di figura 3, destra).

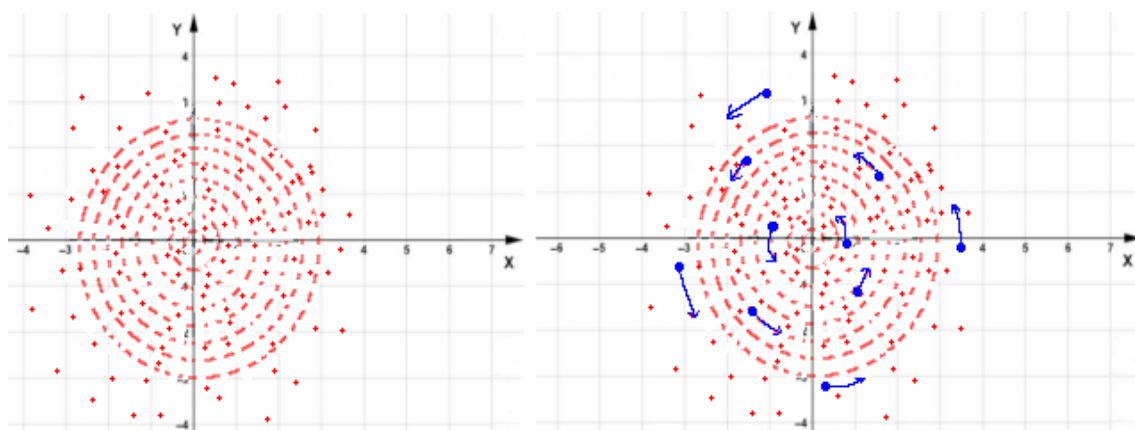


Figura 3: ensemble di sistemi (sinistra) ed evoluzione di una decina di sistemi (destra)

## Teorema di Liouville

Una volta associati i concetti di spazio delle fasi e la definizione della densità di stati  $\rho(t)$ , è possibile visualizzare il significato del teorema di Liouville. Iniziamo con il riportare l'enunciato del teorema nell'ambito della meccanica hamiltoniana:

**Durante l'evoluzione di un qualsiasi sistema conservativo,  
la derivata rispetto al tempo della densità di stati nello spazio delle fasi è nulla,  
ovvero la densità  $\rho(t)$  di stati nello spazio delle fasi si conserva**

Per comprendere il significato del teorema bisogna innanzitutto spiegare il senso della frase "durante l'evoluzione di un sistema". Ciò significa che la densità  $\rho(t)$  di cui parla il teorema è calcolata "durante l'evoluzione del sistema", ovvero lungo la traiettoria evolutiva di un **singolo sistema**. Per capirlo meglio facciamo nuovamente riferimento a figura 3. Nel disegno di sinistra "il tempo è assente": quello che vediamo sono i puntini di un campione di condizioni iniziali diverse. Col passare del tempo questo grafico resta immutato, quindi è banale affermare che la funzione  $\rho(x,y,t)$  dipende solo dalle variabili  $x$  ed  $y$ . Nel disegno di destra invece mostriamo l'evoluzione di una decina dei sistemi dell'ensemble. In questo caso, se scegliamo un punto  $P$  di coordinate  $x,y$  e calcoliamo la densità  $\rho(x,y,t)$ , si capisce subito che essa varia nel tempo. Infatti, quando uno dei "puntini blu" di figura 3 entra nell'intorno del punto  $P$ , allora la densità aumenta. Al contrario, quando il "puntino blu" lascia l'intorno del punto  $P$ , la densità diminuisce. Ma allora, quale sarebbe la densità  $\rho(x,y,t)$  a cui fa riferimento il teorema?

La risposta sta proprio nella frase "durante l'evoluzione di un sistema". Ciò significa che, se scegliamo un singolo sistema, ad esempio quello che ha per condizioni iniziali le coordinate  $x_1, y_1$ , dopo un po' di tempo esso passerà per altri punti dello spazio delle fasi, che indichiamo con  $x_2, y_2$  (nell'istante  $t_2$ ),  $x_3, y_3$  (nell'istante  $t_3$ ) e così via. In questo caso, se calcoliamo la funzione  $\rho(x,y,t)$  in questi punti si ottiene:

$$\rho(x_1, y_1, t_1) = \rho(x_2, y_2, t_2) = \rho(x_3, y_3, t_3)$$

ovvero la densità degli stati (calcolata nello spazio delle fasi di *tutti* i sistemi dell'ensemble) è costante se calcolata **lungo la traiettoria di un singolo sistema** dell'ensemble, in pratica "seguendo" l'evoluzione del sistema nello spazio delle fasi. E' solo in questi termini (cioè quando  $\rho$  è calcolata lungo una traiettoria) che ha senso affermare che  $(\partial\rho/\partial t)|_{\text{Traiettoria}} = 0$ , proprio come sancisce il teorema di Liouville.

*Esempio:* consideriamo il solito ensemble contenente un centinaio di "copie" del sistema pendolo, e prendiamo in esame solamente due sistemi dell'ensemble (A e B), come in figura 4. Se le condizioni iniziali del sistema A sono in una zona ad alta densità, quando il sistema evolve dal punto  $A_1$  al punto  $A_2$  esso parte da una zona ad alta densità (istante  $t_1$ ) e termina in una zona con la stessa densità (istante  $t_2$ ). Al contrario, se le condizioni iniziali del sistema B sono in una zona a bassa densità, quando il sistema evolve dal punto  $B_1$  al punto  $B_2$  esso parte da una zona scarsamente popolata (istante  $t_1$ ) e termina in una zona con la stessa densità (istante  $t_2$ ).

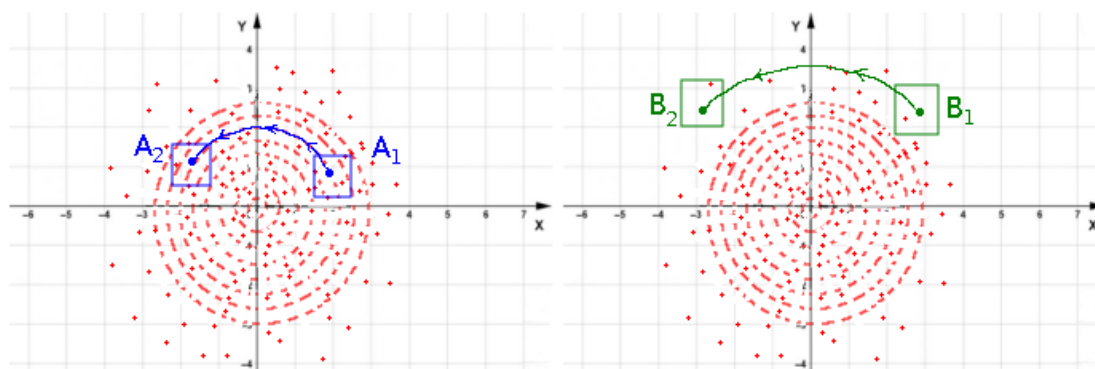


Figura 4: interpretazione visiva del teorema di Liouville

L'esempio appena visto aiuta anche a capire **perché** il teorema di Liouville funziona. Infatti, anche se i sistemi dell'ensemble sono scelti affinché abbiano condizioni iniziali diverse, per il teorema di esistenza ed unicità di Cauchy le diverse traiettorie non si intersecano mai. In altre parole, per ciascun punto dello spazio delle fasi passa una e una sola traiettoria. E' quindi intuitivo che – siccome le traiettorie "corrono quasi parallele tra loro", se un sistema inizia ad evolvere da una zona dove passano poche traiettorie, esso si evolverà muovendosi esclusivamente in quelle zone dello spazio delle fasi che hanno la stessa densità di traiettorie (e quindi la stessa densità di stati).

**Importante:** il teorema di Liouville vale solo per sistemi **conservativi**. In fisica ciò significa che le equazioni del moto sono funzioni analitiche, ovvero continue e infinitamente derivabili. A rigore il teorema di Liouville richiederebbe delle condizioni un più stringenti (relative all'analisi complessa) ma quando il teorema di Liouville viene **violato** ciò non ha importanza. Infatti, se un certo sistema evolve in modo da **non** conservare la densità  $\rho(t)$ , il teorema ci dice che tale evoluzione non è un processo conservativo. In questo contesto non ci interessa sapere se la funzione "avrebbe dovuto" essere continua o derivabile affinché valesse il teorema: siccome il teorema non è rispettato, allora sappiamo che il processo non è conservativo, e questo basta.



### Corollario sui volumi

Come appena visto, il teorema di Liouville afferma che, fintato che le equazioni del moto sono analitiche, allora si ha  $(\partial\rho/\partial t) = 0$ , ovvero la densità degli stati è costante nello spazio delle fasi (se calcolata lungo una traiettoria). Ciò equivale a dire che, se consideriamo i punti iniziali di M sistemi dell'ensemble all'istante  $t_1$ , essi identificheranno un certo volume  $V_1$  nello spazio delle fasi. Se all'istante  $t_2$  gli stessi M punti si spostano in un'altra zona dello spazio delle fasi (ciascuno lungo la propria traiettoria), alla fine essi occuperanno un volume diverso, che indichiamo con  $V_2$ . In questo caso le densità di stati nel punto iniziale e finale sono quindi:

$$\rho(x_1, y_1, t_1) = M/V_1$$

$$\rho(x_2, y_2, t_2) = M/V_2$$

Allora, siccome per il teorema di Liouville deve valere  $\rho(x_1, y_1, t_1) = \rho(x_2, y_2, t_2)$ , segue che:

$$M/V_1 = M/V_2 \quad \rightarrow \quad V_1 = V_2$$

che può essere interpretato come un corollario al teorema di Liouville, o più semplicemente come una sua formulazione alternativa:

**Durante l'evoluzione di M sistemi conservativi descritti dalla stessa equazione, il volume occupato dagli stati di questi sistemi nello spazio delle fasi è costante**

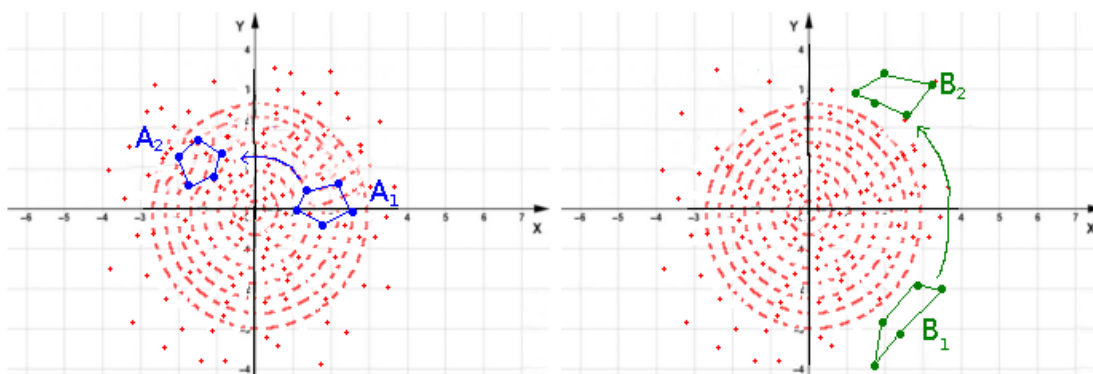


Figura 5: interpretazione del teorema di Liouville dal punto di vista dei volumi

In questo caso, se gli M sistemi (dove in figura si è scelto  $M = 5$ ) iniziano ad evolvere zona ad alta densità ( $A_1$ ) quando esse evolvono nel tempo finiranno ad una zona di pari densità ( $A_2$ ), per cui il volume del poligono da essi individuato resta invariato. Viceversa, se essi partono da una zona a bassa densità ( $B_1$ ), sin dall'inizio essi occuperanno un volume maggiore.

Infatti, poiché il numero è fissato ( $M = 5$ ) e la zona è bassa densità, i 5 punti saranno più lontani tra loro, da cui un maggior volume. Quando questi 5 sistemi evolvono nel tempo, passando dalla zona  $B_1$  alla zona  $B_2$ , essi termineranno la loro evoluzione nuovamente in una zona a bassa densità, per cui la figura geometrica da essi individuata sarà di nuovo caratterizzata dallo stesso volume iniziale (anche se la figura sarà in genere diversa).

**Importante:** abbiamo fatto riferimento alla figura identificata dai punti dei  $M$  sistemi parlando di "poligono" o semplicemente di "figura geometrica". Ricordando però che lo stato delle fasi è la rappresentazione astratta di uno spazio di  $6N$  dimensioni (dove  $N$  è il numero di particelle dell'insieme), nella realtà queste "figure" sono degli ipersolidi praticamente impossibili da visualizzare (altre *varietà differenziali*). Al di là di questa considerazione, tutti i risultati discussi restano comunque validi.

## Conclusioni

In conclusione il teorema di Liouville (nell'ambito della meccanica Hamiltoniana) può essere espresso in due modi equivalenti:

- **Densità costante lungo la traiettoria:** durante l'evoluzione di un qualsiasi sistema conservativo, la derivata rispetto al tempo della densità di stati nello spazio delle fasi è nulla, ovvero la densità  $\rho(t)$  di stati nello spazio delle fasi si conserva
- **Volume costante per un numero di sistemi fissato:** durante l'evoluzione di  $M$  sistemi conservativi descritti dalla stessa equazione, il volume occupato dagli stati di questi sistemi nello spazio delle fasi è costante

In particolare, l'ultima formulazione è particolarmente utile nell'ambito della computazione reversibile o della termodinamica computazionale. Ad esempio, il principio di Landauer, enunciato nel 1961 e poi verificato sperimentalmente, è dimostrabile proprio applicando l'enunciato del teorema di Liouville relativo alla conservazione dei volumi.