De la mecánica estadística a la teoría ergódica

E. Ugalde
*Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí,
Alvaro Obregón 64, San Luis Potosí S.L.P., 78000 México,
e-mail: ugalde@ifisica.uaslp.mx*

Recibido el 9 de marzo de 2007; aceptado el 4 de mayo de 2007

En este artículo revisaremos algunas de las interacciones que desde hace más de un siglo han tenido lugar entre la mecánica estadística y la teoría ergódica. En particular mencionaremos los resultados rigurosos recientemente obtenidos, concernientes a la hipótesis de Boltzmann.

Descriptores: Hipótesis de Boltzmann; teoría ergódica; gas de esfera dura.

In this article we will briefly review some of the interactions occurred during the last hundred years, between Statistical Mechanics and Ergodic Theory. In particular, we will mention the recently proved rigorous results concerning the Boltzmann's hypothesis.

Keywords: Boltzmann's hypothesis; Ergodic Theory; Hard sphere gas.

PACS: 05.20.-y, 51.10.+y, 05.45.-a

1. De una hipótesis de Boltzmann a los teoremas ergódicos

A finales del siglo XIX, en una época en la que algunos científicos prominentes consideraban a la teoría molecular una fantasía, James Maxwell y Ludwig Boltzmann desarrollaron la teoría cinética de los gases. A partir de la teoría cinética de los gases Boltzmann comenzó a desarrollar las ideas que dieron origen a la mecánica estadística. En la última parte de su artículo de 1868 [2], Boltzmann deduce que cuando el número de partículas tiende a infinito, el momento de una partícula en un sistema conservativo satisface la distribución que ahora conocemos como de Maxwell–Boltzmann. Él demuestra que "la probabilidad" de que una partícula tenga momento $\mathbf{p} \pm d\mathbf{p}$ es una cierta función que en el límite de muchas partículas ($N \to \infty$) se aproxima a la distribución

$$f(\mathbf{p} \pm d\mathbf{p}) \propto \exp(-B|\mathbf{p}|^2)d\mathbf{p}. \tag{1}$$

La suposición clave detrás de este resultado es lo que ahora conocemos, por culpa de Paul y Tania Ehrenfest [8], como la hipótesis ergódica^{i}. Esta hipótesis constituye uno de los grandes buscapiés que la naciente mecánica estadistica lanzó hacia el futuro, y de este buscapiés se ocuparía una de las ramas de la teoría de los sistemas dinámicos: la teoría ergódica.

Un cierto folklore establece que en mecánica estadística la relación entre teoría y experimento se fundamenta en la hipótesis ergódica, la que dice que "promedios temporales y promedios de ensemble coinciden en el límite de tiempos muy largos". En realidad la hipótesis que Boltzmann hace en su trabajo de 1868 es que las órbitas recorren toda la hipersuperficie de energía constante, es decir, que hay una sola órbita. En este caso el sistema admitiría una sola distribución invariante en el tiempo, la distrubución uniforme de la que habla el teorema de Liouville. El folklore se originó, si entiendo bien, en el artículo de los Ehrenfests de 1911^{ii}. Ellos hacen un recuento del origen de la mecánica estadística y entre otras cosas resaltan la importancia de la hipótesis de Boltzmann, misma que bautizan como ergódica. La consecuencia relevante de esta hipótesis es la igualdad entre promedios temporales y de ensemble, que en un lenguaje moderno pondríamos así:

$$\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \phi(\mathbf{x}(t))dt = \int_M \phi(\mathbf{y})d\mu(\mathbf{y}). \tag{2}$$

Aquí ϕ es una función definida en la hipersuperficie de energía constante M, μ es la medida de Liouville que se concentra en M, y $\mathbf{x}(t)$ es "cualquier" órbita. En 1913 Michel Plancherel y Artur Rosenthal [5] hacen patente la imposibilidad de la hipótesis ergódica a partir de un argumento que hoy en día no nos sorprende tanto: una curva contínua que no se autocruza no puede llenar una hipersuperficie de dimensión mayor a uno. Como consecuencia se hizo necesario formular una hipótesis menos fuerte, la hipótesis cuasi–ergódica. Según esta última (que entiendo es autoría de los Ehrenfests), las órbitas se reparten densamente en la hipersuperficie de energía constante. Entonces no es que haya una sola órbita, sino que cualquier órbita tiene como adherencia a toda la hipersuperficie de energía contante: el sistema es minimal. El problema es que la densidad de todas o casi todas las órbitas no asegura su permanencia en una región dada de la hipersuperficie de energía constante, un tiempo proporcional al volumen de esa región.

Todas estas preocupaciones alrededor de la hipótesis ergódica y cuasi–ergódica atrajeron la atención de la comunidad matemática. Los principales protagonistas fueron Henri Poincaré, George Birkhoff y John von Neumann. El resultado: los teoremas ergódicos.

El primero en establecer un teorema general basado esencialmente en la hipótesis cuasi–ergódica fue von Neumann, quien demostró el teorema ergódico medio [20], que hoy en día enunciamos así:

Teorema ergódico medio. *Si μ es una medida finita invariante en el tiempo y ϕ es cualquier función cuadrado–*

integrable con respecto a μ, entonces

$$\lim_{T\to\infty}\left\|\frac{1}{T}\int\limits_0^T \phi(\mathbf{x}(t))dt-\phi^*(\mathbf{x}(0))\right\|_{\mathcal{L}_2}=0,$$

donde ϕ^* es la proyección de ϕ sobre el subespacio de funciones invariantes en el tiempo. Si además μ es ergódica^{iii}, entonces

$$\lim_{T\to\infty}\left\|\frac{1}{T}\int_0^T \phi(\mathbf{x}(t))dt-\int\limits_M \phi(\mathbf{y})d\mu(\mathbf{y})\right\|_{\mathcal{L}_2}=0.$$

De esta forma se aseguraba la coincidencia de promedios temporales con promedios de ensemble, al menos en distancia $\mathcal{L}_2$. El siguiente paso lo dió Birkhoff [1], quien probó el teorema cuya formulación moderna es^{iv}:

Teorema ergódico. *Sea μ es una medida finita invariante en el tiempo, entonces, para cualquier función ϕ integrable con respecto a μ, existe una función ϕ^* invariante en el tiempo e integrable con respecto a μ, tal que para toda condición inicial $\mathbf{x}(0)$ en un conjunto de medida total tenemos*

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int\limits_0^T \phi(\mathbf{x}(t))dt=\phi^*(\mathbf{x}(0)).$$

Si además μ es ergódica, i.e., si el sistema es métricamente transitivo, entonces

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int\limits_0^T \phi(\mathbf{x}(t))dt=\int_M \phi(\mathbf{y})d\mu(\mathbf{y}).$$

Todo muy bien hasta aquí, pero ¿hay realmente algún sistema mecánico que sea métricamente transitivo? En particular, ¿será cierto que para el gas de esferas duras la medida de Liouville es ergódica, de modo que el teorema ergódico se cumpla y así se cumplan los deseos de Boltzmann y Maxwell? Bueno, la respuesta a estas preguntas tuvo que esperar algunos decenios.

2. ¿Hay sistemas mecánicos ergódicos?

Esta pregunta ocupó principalmente los espíritus rusos y de Europa del este. Casi todos los resultados en esta dirección tienen que ver con el gas de esferas duras, aunque se tienen algunos principios de respuesta en el caso de interacciones que decaen muy rápido. Motivado por la tesis de Nikolay Krylov sobre el relajamiento al equilibrio y los trabajos de Gustav Hedlund y Heinz Hopf sobre los sistemas dinámicos hiperbólicos, Yakov Sinai formuló en 1963 [14] la versión restringida y moderna de la hipótesis ergódica:

Conjetura de Sinai. *Para todo $N\geq 2$ y en dimensión 2 o 3, el sistema mecánico de N bolas esferas con condiciones de borde periódicas, es un sistema métricamente transitivo, i.e., la medida de Liouville en la hipersuperficie de energía constate es ergódica.*

El mismo Sinai fue capaz, en 1970, de demostrar esta conjetura en el caso particular de 2 esferas duras para dimensión 2 [15] ¡Finalmente, a 100 años del artículo de Boltzmann teníamos un sistema mecánico para el cual promedios temporales y promedios de ensembles son iguales! Pero realmente estabamos lejos de la conjetura de 1963, y todavía más lejos de sistemas realistas. Peor aún, en 1974 Lawrence Markus y Kenneth Meyer [11] demostraron que un sistema hamiltoniano genérico no es ni ergódico ni integrable. O sea, “lo más común” son los sistemas hamiltonianos mixtos, y para ellos la hipótesis ergódica no se satisface. Por otro lado estaba el teorema KAM, nombrado así en honor a Andrei Kolmogorov, Jürgen Moser y Vladimir Arnold. Este teorema asegura que pequeñas perturbaciones de sistemas hamiltonianos integrables siguen siendo casi–integrables. Esto previene que tales sistemas sean métricamente transitivos. La cosa no pintaba bien.

Decenios después, siguiendo el trabajo de la escuela rusa (Yakov Sinai, Nikolai Chernov, Lionid Bunimovich, etc.) los hungaros Nador Simanyi y Domokos Szasz probaron finalmente la conjetura de Sinai de 1963 [17, 18]. El resultado luce así:

Teorema de Simanyi y Szasz. *La hipótesis de Sinai es cierta para toda dimensión y todo número de esferas. De hecho, el sistema mecánico de N esferas duras en dimensión D, con condiciones de borde perióicas, es un sistema mezclante (una propiedad más fuerte que la ergodicidad) para todo $N, D\geq 2$.*

En realidad es más de lo que esperabamos. Que el sistema sea mezclante implica decorrelación y convergencia al equilibrio, de modo que la ecuación de Boltzmann se cumple. Pero, ¿qué pasa con sistemas mecánicos más realistas? En realidad hay pocos resultados al respecto, entre los cuales el de Carlangelo Liverani y Maciej Wojtkowski [10] quienes generalizaron las técnicas de Sinai y las aplicaron a ciertos sistemas hamiltonianos además del de esferas duras.

3. La mecánica estadística de los sistemas ergódicos

Ya vimos como una empresa centenaria hizo posible encontrar sistemas mecánicos para los cuales las medias temporales coincidan con las medias de ensemble. El teorema de Birkhoff sin embargo nos dice que los promedios temporales convergen casi para toda condición inicial, y en el caso de sistemas ergódicos, estos promedios convergen a la media de ensemble. Por otro lado es relativamente fácil construir sistemas que aunque no son mecánicos, si son ergódicos. Este es el caso de los famosos flujos de Anosov, entre los que se encuentran los flujos geodésicos en superficies de curvatura constante negativa^{v}. Resulta que durante la decada de 1960 a 1970, Roland Dobrushin y David Ruelle desarrollaron simultaneamente la mécanica estadística rigurosa para gases en red [7, 12]. Entre otros muchos resultados, ellos lograron caracterizar de forma abstracta las medidas de equilibrio asociadas a una cierta interacción, establecieron un cuadro formal para hablar de coexistencia de fases, y especificaron las condiciones que debe cumplir la interacción para asegurar la unicidad del límite termodinámico. Yakov Sinai [16], el mismo David Ruelle [13], Rufus Bowen [4] y algunos otros, casi luego luego se dieron cuenta de que ciertos sistemas dinámicos pueden verse como gases en una red unidimensional. El truco que permite este mapeo es la codificación simbólica, que se realiza utilizando lo que llamamos partición de Markov [9]. Para este cierto tipo de sistemas dinámicos existe una función continua ϕ definida en el espacio de fase M, y que toma valores reales, y una cantidad cantidad $P = P(\phi)$ tales que

$$\sup_{\mu}\left(\mathrm{h}(\mu) + \int_M \phi(\mathbf{y})d\mu(\mathbf{y})\right) = P(\phi). \tag{3}$$

Aquí $h(\mu)$ es la entropía de Kolmogorov ^{vi} de la medida estacionaria μ, y el supremo se toma sobre el conjunto de todas las medidas estacionarias normalizadas. En este contexto, una medida de equilibrio para este sistema dinámico es una que logra el máximo, es decir, una para la cual

$$\mathrm{h}(\mu) + \int_M \phi d\mu = P(\phi). \tag{4}$$

Uno de los resultados de la teoría afirma que si el sistema es expansivo (más otras cosas), entonces hay sólo una medida de equilibrio. Esa medida es ergódica, o sea, es una medida para la cual la hipótesis de Boltzmann se cumple. En otros casos puede haber muchas medidas de equilibrio, pero por un resultado muy general de Gustave Choquet [6], estas medidas siempre se pueden representar como una combinación convenxa de medidas ergódicas. En este caso podemos hablar de coexistencia de fases.

4. Conclusión

Hemos hablado de una de las muchas interacciones que hay entre física y matemáticas. Se trata de un diálogo que lleva ya 100 años, y que está lejos de terminar. La formalización de la mecánica estadística del equilibrio tiene aún muchas lagunas que colmar. Más reciente que el resultado de Simanyi y Szasz que mencionamos arriba, está la formalización del método de réplicas de Giorgio Parisi, unas de las herramientas escenciales en el estudio de los vidrios de spin, que acaba de llevar a cabo Michel Talagrand [19]. Está además toda la mecánica estadística fuera de equilibrio, para la cual hay muy pocos resultados formales, y todavía queda la tarea de encontrar sistemas mecánicos más realistas en donde por seguro tengamos que la hipótesis de Boltzmann se satisface. Se ve bién que el díalogo, y sobre todo los buscapiés desde la mecánica estadísitica hacia las diversas ramas de las matemáticas van a seguir firme y tendido por muchos decenios.

Agradecimientos

La idea de este trabajo surgió a partir de seminario improvisado que impartí durante el pasado Congreso Nacional de Física. Agradezco las sugerencias de mis colegas presentes el aquella sesión.

---

i No confundir con el famoso *Stoßzahlansatz*, la hipótesis del caos molecular que permite derivar la ecuación de Boltzmann.

ii Se puede consultar la verión en Inglés de 1959. Es interesante también el artículo de Emil Borel de 1906 [3], donde deriva también la distribución de Maxwell–Boltzmann a partir de la invariancia de la medida de Liouville.

iii Una medida es ergódica si los únicos conjuntos invariantes son los que tienen medida total o medida cero. En este caso se dice también que el sistema es métricamente transitivo. En el artículo de von Neumann se habla más bien de sistemas no–integrables en un sentido métrico, ya que en su versión original el teorema érgodico medio se refiere solamente a sistemas hamiltonianos.

iv Aunque se publicó posteriormente, el teorema ergódico medio es anterior al teorema de Birkhoff.

v Conviene darle una hojeada a la Biblia de los sistemas dinámicos [9].

vi Podemos entender la entropía de Kolmogorov como sigue: si $\Omega_{\epsilon,T}$ denota el conjunto de todas los tramos de órbita de longitud temporal T, que son distinguibles hasta la precisión ϵ, entonces

$$h(\mu) \approx \lim_{\epsilon\to 0}\lim_{T\to\infty} \frac{-1}{T} \sum_{\omega\in\Omega_{\epsilon,T}} \mu\{\omega\}\log\mu\{\omega\}.$$

El parecido con la función H del "Teorema H de Boltzmann" no es casual. Para una definición formal de la entropía de Kolmogorov vease [9] por ejemplo.

1. G. Birkhoff, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **17** (1931) 650.
2. L. Boltzmann, *Wiener Berichte* **58** (1868) 517.
3. E. Borel, "Sur les principes de la théorie cinétique des gaz", *Annales Scientifiques de l'École Normale Superieur" 3ème série, tome 23* (1906) p. 9.
4. R. Bowen, "Equilibrium states and the ergodic theory of Anosov diffeomorphisms", *Lecture Notes in Mathematics* **470** (Springer–Velag, 1975).
5. S.G. Brush, "Proof of the impossibility of ergodic systems: the 1913 papers of Rosenthal and Plancherel", en *The Kinetic Theory of Gases: An Anthology of Classical Papers with Historical Commentary* (Imperial College Press, 2003) p. 505.
6. G. Choquet, "Existence et unicité des représentations intégrales", *Séminaire Bourbaki*, Décembre 1956, 139.

7. R.L. Dobrushin,*Funktsional'nyi Analiz i Ego Prilozheniya* **2** (4) (1968) 31. Versión en Inglés en *Functonal Analysis and Applications* **2** (1968) 302.
8. P. Ehrenfest y T. Ehrenfest, "Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik", en: *Encyklopädie der Mathematischen Wissenschaften mit Einschluß ihrer Anwendungen* ***Band IV***, F. Klein and C. Müller Eds. (Leipzig 1911). Versión en Inglés: "The conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics" (Dover Phoenix Editions, 2002).
9. A. Katok y B. Hassenblatt, "Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems" (Cambridge University Press, 1995).
10. C. Liverani y M.P. Wojtkowski, "Ergodicity in Hamiltonian systems", *Dynamics Reported: Expositions in Dynamical Systems N.S. 4* (Springer, 1995) p. 130.
11. L. Markus y K.R. Meyer, "Generic Hamiltonian Dynamical Systems are neither Integrable nor Ergodic", *Memoirs of the American Mathematical Society* **144** (American Mathematical Society, 1974).
12. D. Ruelle, *Communications in Mathematical Physics* **9** (1968) 267.
13. D. Ruelle, *American Journal of Mathematics* **98** (1976) 619.
14. Ya. G. Sinai, *Doklady Akademii Nauk SSSR* **153** (6) (1963) 1261; Versión en Inglés en *Soviet Mathematics. Doklady* **4** (1963) 1818.
15. Ya. G. Sinai, *Uspehi Matematičeskih Nauk* **25** (2) (1970) 141.
16. Ya. G. Sinai, *Uspehi Matematičeskih Nauk* **27** (4) (1972) 21; Versión en Inglés en *Russian Mathematical Surveys* **27** (4) (1972) 21.
17. N. Simanyi y D. Szasz, *Annals of Mathematics* **149** (1) (1999) 35.
18. N. Simanyi, *Inventiones Mathematicae*, **154** (1) (2003) 123.
19. M. Talagrand, *Annals of Mathematics* **163** (1) (2006) 221.
20. J. von Neumann, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **18** (1932) 70.