

23.1. Analisi asintotica: integrali di Laplace.

Un integrale di Laplace ha la forma

$$(1) \quad F(\lambda) = \int_a^b e^{\lambda S(x)} f(x) dx$$

dove assumiamo che $\lambda > 0$. Tipicamente, λ è un parametro grande e siamo interessati nell'andamento asintotico dell'integrale quando $\lambda \rightarrow \infty$. Osserviamo che (analogamente a quanto visto per gli integrali di Fourier), possiamo scrivere $F(\lambda)$ nella forma

$$(2) \quad F(\lambda) = \frac{1}{\lambda} \int_a^b \frac{f(x)}{S'(x)} \left(\frac{d}{dx} e^{\lambda S(x)} \right) dx$$

Integrando per parti

$$F(\lambda) = \underbrace{e^{\lambda S(x)} \frac{f(x)}{\lambda S'(x)} \Big|_a^b}_{\text{termine di bordo}} - \underbrace{\frac{1}{\lambda} \int_a^b \frac{d}{dx} \left(\frac{f(x)}{S'(x)} \right) e^{\lambda S(x)} dx}_{\text{termine integrale}}$$

Se il termine integrale è asintoticamente più piccolo del termine di bordo, cioè

$$\text{termine integrale} = o(\text{termine di bordo})$$

quando $\lambda \rightarrow \infty$, allora

$$F(\lambda) \sim \underbrace{e^{\lambda S(x)} \frac{f(x)}{\lambda S'(x)} \Big|_a^b}_{\text{termine di bordo}}$$

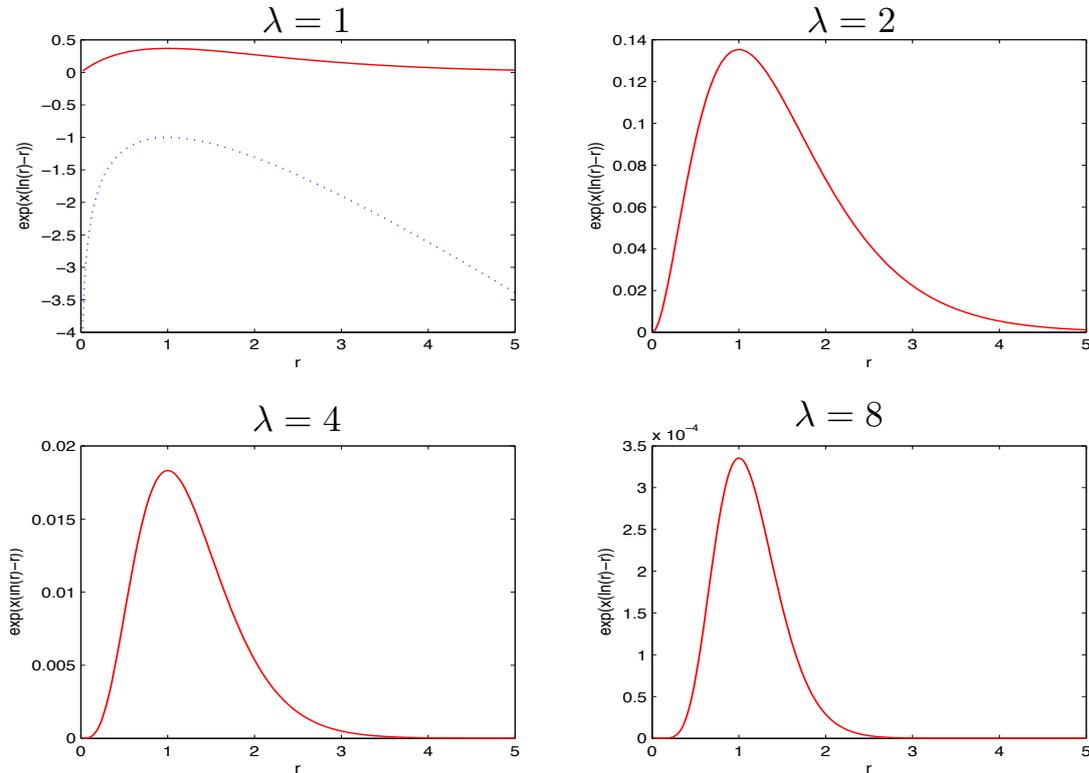
e abbiamo così un'utile approssimazione dell'integrale quando $\lambda \rightarrow \infty$. Tuttavia, in generale, questo metodo non funziona perché la precedente approssimazione vale solo se $S'(x)$ non si annulla.

La situazione è simile a quella degli integrali generalizzati di Fourier. Adesso la situazione è la seguente: *se $S(x)$ ha un massimo globale per $x = c$, con $a \leq c \leq b$, allora è soltanto l'intorno di c che fornisce il contributo dominante all'integrale quando $\lambda \rightarrow \infty$.*

Questo fenomeno può essere illustrato considerando l'integrale

$$\int_0^\infty e^{\lambda(\ln r - r)} dr$$

dove $S(r) = (\ln r - r)$ ha un massimo per $r = 1$. Se riportiamo in figura la funzione integranda per valori crescenti di λ , vediamo che è la regione intorno a $r = 1$ che contribuisce maggiormente all'integrale. La linea tratteggiata (blu) in figura è $S(r) = (\ln r - r)$, le linee continue (rosse) rappresentano la funzione $e^{\lambda(\ln r - r)}$ per diversi valori di λ .



23.1.1. Metodo di Laplace.

Il metodo può essere descritto in maniera analoga al metodo della fase stazionaria.

Primo passo. Possiamo approssimare $F(\lambda)$ con $F(\lambda; \epsilon)$ dove

$$F(\lambda; \epsilon) = \begin{cases} \int_{c-\epsilon}^{c+\epsilon} e^{\lambda S(x)} f(x) dx, & \text{se } a < c < b \\ \int_a^{a+\epsilon} e^{\lambda S(x)} f(x) dx, & \text{se } c = a \\ \int_{b-\epsilon}^b e^{\lambda S(x)} f(x) dx, & \text{se } c = b \end{cases}$$

dove ϵ è *arbitrario* (solo soggetto al vincolo che ciascuno dei sotto-intervalli di integrazione sia contenuto in $[a, b]$). Questo passo è giustificato se l'asintotica di $F(\lambda; \epsilon)$, quando $\lambda \rightarrow \infty$, *non dipende* da ϵ ed è *identica* all'asintotica di $F(\lambda)$ quando $\lambda \rightarrow \infty$. Queste due condizioni sono in effetti verificate. Consideriamo

per esempio il caso $a < c < b$. I termini

$$\left| \int_a^{c-\epsilon} e^{\lambda S(x)} f(x) dx \right| + \left| \int_{c+\epsilon}^b e^{\lambda S(x)} f(x) dx \right|$$

sono dominati da $F(\lambda)$, quando $\lambda \rightarrow \infty$, perché $e^{\lambda S(x)}$ è esponenzialmente piccolo quando è confrontato con $e^{\lambda S(c)}$ in $a \leq x \leq c - \epsilon$ e $c + \epsilon \leq x \leq b$. In altre parole, cambiare i limiti di integrazione e passare da $F(\lambda)$ a $F(\lambda; \epsilon)$ introduce *errori esponenzialmente piccoli*.

Secondo passo. Analogamente al caso della fase stazionaria, consideriamo $F(\lambda a) \sim F(\lambda; \epsilon)$ e facciamo le approssimazioni:

- Se $S'(c) = 0$ per $a \leq c \leq b$ e $S''(c) \neq 0$ allora

$$f(x) \approx f(c)$$

$$S(x) \approx S(c) + \frac{1}{2} S''(c)(x-c)^2$$

- Se $c = a$ o $c = b$ e $S'(c) \neq 0$, facciamo le approssimazioni

$$f(x) \approx f(c) \neq 0$$

$$S(x) \approx S(c) + S'(c)(x-c)$$

Terzo passo. Dopo aver fatto le approssimazioni precedenti, estendiamo gli estremi di integrazione da $-\infty$ a ∞ per valutare gli integrali (questa operazione è legittima perché introduce soltanto errori esponenzialmente piccoli).

- Se $S'(c) = 0$ per $a < c < b$, dobbiamo avere $S''(c) < 0$ ($x = c$ è un massimo) e quindi, per $\lambda \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} F(\lambda) &\approx \int_{c-\epsilon}^{c+\epsilon} e^{\lambda[S(c) + \frac{1}{2} S''(c)(x-c)^2]} f(c) dx \\ &\sim f(c) e^{\lambda S(c)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\lambda \frac{S''(c)}{2} (x-c)^2} \\ &= \frac{\sqrt{2} f(c) e^{\lambda S(c)}}{\sqrt{-\lambda S''(c)}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du \end{aligned}$$

Quindi, poiché l'integrale è uguale a $\sqrt{\pi}$, per $\lambda \rightarrow \infty$ si ha

$$(3) \quad F(\lambda) \sim \frac{\sqrt{2\pi} f(c) e^{\lambda S(c)}}{\sqrt{-\lambda S''(c)}}$$

Se $S'(c) = 0$ e $c = a$ o $c = b$, allora l'andamento asintotico dell'integrale è lo stesso di quello in (3), a parte la moltiplicazione per un fattore $1/2$.

- Se $c = a$ e $S'(c) \neq 0$, dobbiamo avere $S'(c) < 0$, e quando $\lambda \rightarrow \infty$ si ha

$$\begin{aligned} F(\lambda) &\approx \int_a^{a+\epsilon} e^{\lambda[S(a)+S''(a)(x-c)]} f(a) dx \\ &\sim f(a) e^{\lambda S(a)} \int_0^\infty e^{\lambda S'(c)(x-c)} dx \end{aligned}$$

Quindi

$$F(\lambda) \sim -\frac{f(a)e^{\lambda S(a)}}{\lambda S'(a)}$$

Se $c = b$ e $S'(c) \neq 0$, dobbiamo avere $S'(c) < 0$, e un argomento simile al precedente implica che quando $\lambda \rightarrow \infty$ si ha

$$F(\lambda) \sim \frac{f(b)e^{\lambda S(b)}}{\lambda S'(b)}$$

Fine della descrizione del metodo di Laplace. Adesso due osservazioni.

- (1) Se $S(x)$ raggiunge il suo massimo globale in diversi punti in $[a, b]$, allora spezziamo l'integrale in intervalli che contengono solo un punto, li trattiamo indipendentemente usando il metodo appena descritto e poi sommiamo tutti i contributi.
- (2) Se il massimo globale è tale che tutte le derivate di S sono nulle fino alla derivata m -esima, che è non nulla, allora lo sviluppo in serie sarà $S(x) \approx S(c) + \frac{1}{m!} S^{(m)}(c)(x-c)^m$.

23.1.2. Esempio: la formula di Stirling.

Vogliamo determinare l'andamento asintotico della funzione Gamma

$$\Gamma(z+1) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\infty e^{-t} t^z dt,$$

quando $z \rightarrow \infty$. In primo luogo, notiamo che possiamo scrivere

$$\Gamma(z+1) = \int_0^\infty e^{-t+z \ln t} dt.$$

In secondo luogo, ci riconduciamo ad un integrale di Laplace standard, facendo la sostituzione $t = zr$ (questo ha in effetti lo scopo di creare un massimo globale per S),

$$\begin{aligned} \Gamma(z+1) &= \int_0^\infty e^{-zr+z \ln z+z \ln r} z dr \\ &= z^{z+1} \int_0^\infty e^{z(-r+\ln r)} dr \end{aligned}$$

Quindi $f(r) = 1$ e $S(r) = -r + \ln r$. Si ha $S'(r) = -1 + \frac{1}{r}$ e $S''(r) = -\frac{1}{r^2}$, per $r > 0$. Ne concludiamo che S ha un massimo globale per $r = 1$ e che $S''(1) = -1$.

Applichiamo la (3):

$$\Gamma(z+1) \sim z^{z+1} \frac{\sqrt{2\pi} e^{-z}}{\sqrt{z}} = \sqrt{2\pi z} z^z e^{-z}$$

Poiché $\Gamma(n+1) = n!$ per n intero positivo¹, la formula precedente, per n intero positivo, diventa l'usuale formula di Stirling per il fattoriale:

$$n! \sim \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$$

23.1.3. *Lemma di Watson.*

Basandosi sulle idee esposte fin qui si può dimostrare un risultato più sofisticato per un integrale di Laplace più semplice. Per ragioni di tempo non lo dimostriamo, ma chi volesse cimentarsi dovrebbe riuscirci anche da solo: l'esercizio non è facile, ma neanche eccessivamente difficile.

LEMMA DI WATSON. *Per qualche $b > 0$ (eventualmente infinito), si consideri l'integrale di Laplace*

$$I(\lambda) = \int_0^b f(t) e^{-\lambda t} dt$$

Si supponga che $f(t)$ sia continua in $[0, b]$ e che abbia

$$f(t) \sim t^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^{\beta n}$$

come espansione asintotica² quando $t \downarrow 0$. Si assuma che $\alpha > -1$ e $\beta > 0$, cosicché l'integrale è limitato vicino a $t = 0$. Se $b = \infty$, si richiede anche che $f(t)$ sia di ordine esponenziale c per qualche $c > 0$ (ovvero $f(t) = \mathfrak{o}(e^{ct})$) per garantire che l'integrale sia limitato per grandi t . Allora, per $\lambda \rightarrow \infty$,

$$I(\lambda) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n \Gamma(\alpha + \beta n + 1)}{\lambda^{\alpha + \beta n + 1}}$$

¹(1) Dalla definizione della funzione Gamma, mediante integrazione per parti, si dimostra che $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$; (2) $\Gamma(1) = \int_0^\infty e^{-t} dt = 1$. da queste due proprietà segue, per induzione, che $\Gamma(n+1) = n!$.

²Per la nozione di espansione asintotica si veda la prossima lezione.

23.1.4. Applicazione del metodo di Laplace al calcolo delle transizioni di fase magnetiche.

Vogliamo adesso applicare il metodo di Laplace ad un problema di fisica. Calcoleremo l'asintotica per $N \rightarrow \infty$ dell'energia libera per spin di un sistema magnetico di N spin.

Un modello matematico di sistema magnetico è tipicamente basato su un insieme di N spin μ_i , $i = 1, 2, \dots, N$, che possono essere vettori, scalari, o, nel caso quantistico, operatori di spin. Noi considereremo il modello più semplice basato su spin scalari $\mu_i = +1$ o -1 corrispondenti a spin su o spin giù rispettivamente. Si assume che l'energia di interazione tra due spin μ_i e μ_j collocati nei punti fissati \mathbf{r}_i e \mathbf{r}_j nello spazio (per esempio nei vertici di un reticolo regolare) sia $+\phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ se gli spin sono paralleli ($\mu_i\mu_j = +1$) e $-\phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ se gli spin sono anti-paralleli ($\mu_i\mu_j = -1$). In altre parole, l'energia totale di interazione del sistema in una data configurazione $\{\mu\} = (\mu_1, \dots, \mu_N)$ degli spin è

$$E(\{\mu\}) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \mu_i \mu_j - H \sum_{i=1}^N \mu_i$$

dove il primo termine proviene dall'interazione tra gli spin e il secondo termine dall'interazione di ciascun spin con un campo magnetico esterno.

La funzione di partizione del sistema è

$$Z(N, \beta) = \sum_{\{\mu\}} e^{-\beta E(\{\mu\})}$$

Dove la somma è su tutte le configurazioni (in totale 2^N), $\mu_1 = \pm 1, \mu_2 = \pm 1 \dots \mu_N = \pm 1$, T è la temperatura, $\beta = 1/\kappa_B T$ è la temperatura inversa e κ_B è la costante di Boltzmann. Tutte le proprietà termodinamiche del sistema sono ottenute a partire dall'energia libera per spin che è determinata dalla funzione di partizione del seguente modo

$$f = \frac{F}{N} = -\kappa_B T \frac{1}{N} \log Z(N, \beta)$$

Occorre quindi determinare—in questo problema, e più in generale in tutti i problemi di meccanica statistica dell'equilibrio— l'andamento asintotico di

$$\frac{1}{N} \log Z(N, \beta)$$

per $N \rightarrow \infty$. Questo è in generale, anche per il caso di spin scalari che stiamo considerando, un problema di notevole complessità matematica. In molti casi non disponiamo ad oggi di una soluzione analitica.

La teoria classica dei sistemi magnetici si basa su una drastica semplificazione del problema, utilizzando l'approssimazione di *campo medio*: si assume cioè che

ciascun spin interagisce con un campo medio prodotto da tutti gli altri spin. In questa approssimazione

$$\sum_{1 \leq i \leq j \leq N} \phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \mu_i \mu_j \approx -\frac{J}{N} \sum_{1 \leq i \leq j \leq N} \mu_i \mu_j$$

dove

$$J = - \int \phi(r) d^3 \mathbf{r}$$

(ϕ negativo, e quindi J positivo, caratterizza un sistema ferromagnetico). Il problema diventa dunque quello di determinare la funzione di partizione per un'energia d'interazione data da

$$E(\{\mu\}) = -\frac{J}{N} \sum_{1 \leq i \leq j \leq N} \mu_i \mu_j - H \sum_{i=1}^N \mu_i$$

Per valutare la funzione di partizione, per prima cosa riscriviamo l'energia d'interazione in una forma simmetrica:

$$E(\{\mu\}) = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \mu_i \right)^2 + \frac{J}{2} - H \sum_{i=1}^N \mu_i$$

Questa formula segue da $\mu_i^2 = 1$. Adesso, semplifichiamo le notazioni: poniamo

$$\mathcal{A} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^N \mu_i$$

e quindi

$$E(\{\mu\}) = -\frac{J}{2N} \mathcal{A}^2 + \frac{J}{2} - H \mathcal{A}$$

La funzione di partizione diventa

$$(4) \quad Z(N, \beta) = \sum_{\{\mu\}} e^{-\beta E(\{\mu\})} = e^{-\frac{(\beta J)}{2}} \sum_{\{\mu\}} e^{[\frac{(\beta J)}{2N} \mathcal{A}^2 + (\beta H) \mathcal{A}]}$$

Se non ci fosse termine quadratico in \mathcal{A} , sarebbe facile eseguire la somma. Infatti, in tal caso si avrebbe

$$(5) \quad \sum_{\{\mu\}} e^{L \mathcal{A}} = \sum_{\{\mu\}} e^{L \sum_{i=1}^N \mu_i} = (e^L + e^{-L})^N = (2 \cosh L)^N$$

Possiamo ricondurci ad un termine lineare con un trucco basato su integrali gaussiani: si ha

$$e^{A^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2 + Ax} dx$$

(l'identità è ottenuta completando i quadrati). Se poniamo

$$A = \sqrt{\frac{(\beta J)}{N}} \mathcal{A}$$

nella somma a secondo membro della (4), otteniamo

$$\begin{aligned} Z(N, \beta) &= e^{-\frac{(\beta J)}{2}} \sum_{\{\mu\}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2 + \sqrt{\frac{(\beta J)}{N}} \mathcal{A} x} dx e^{(\beta H) \mathcal{A}} \\ &= e^{-\frac{(\beta J)}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{\{\mu\}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2 + \sqrt{\frac{(\beta J)}{N}} \mathcal{A} x + (\beta H) \mathcal{A}} dx \\ &= e^{-\frac{(\beta J)}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{\{\mu\}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2 + \left[\sqrt{\frac{(\beta J)}{N}} x + (\beta H) \right] \mathcal{A}} dx \\ &= e^{-\frac{(\beta J)}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left\{ \sum_{\{\mu\}} e^{\left[\sqrt{\frac{(\beta J)}{N}} x + (\beta H) \right] \mathcal{A}} \right\} dx \end{aligned}$$

Usando la (5), si ha

$$\begin{aligned} Z(N, \beta) &= e^{-\frac{(\beta J)}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left[2 \cosh \left(\sqrt{\frac{(\beta J)}{N}} x + (\beta H) \right) \right]^N dx \\ &= e^{-\frac{(\beta J)}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2 + N \log \left[2 \cosh \left(\sqrt{\frac{(\beta J)}{N}} x + (\beta H) \right) \right]} dx \end{aligned}$$

Con il cambiamento di variabili

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{(\beta J)N}}$$

possiamo ricondurre $Z(N, \beta)$ ad un integrale di Laplace standard:

$$Z(N, \beta) = \sqrt{\frac{(\beta J)N}{2\pi}} e^{-\frac{(\beta J)}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-N[(\beta J)/2]\xi^2 + N \log \{ 2 \cosh [(\beta J)\xi + (\beta H)] \}} d\xi$$

Abbiamo cioè

$$Z(N, \beta) = \sqrt{\frac{(\beta J)N}{2\pi}} e^{-\frac{(\beta J)}{2}} I(N)$$

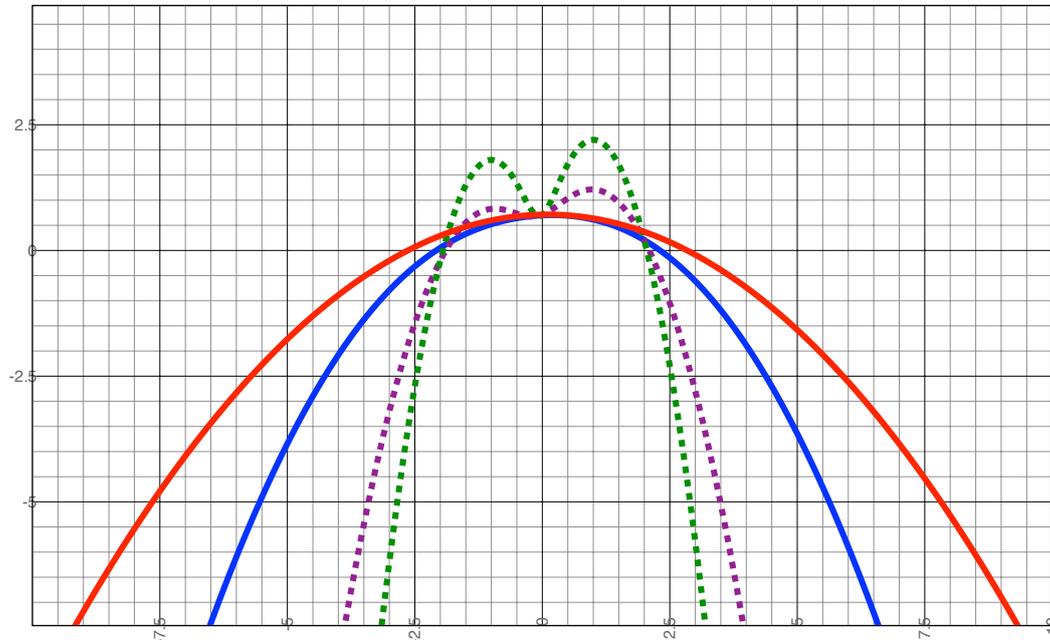
dove

$$I(N) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{NS(\xi)}$$

e

$$S(\xi) = -\frac{1}{2}(\beta J)\xi^2 + \log \{ 2 \cosh [(\beta J)\xi + \beta H] \}$$

Facciamo un grafico della funzione $S(\xi)$: fissiamo βH abbastanza piccolo (abbiamo scelto $\beta H = 0.2$) e facciamo variare βJ

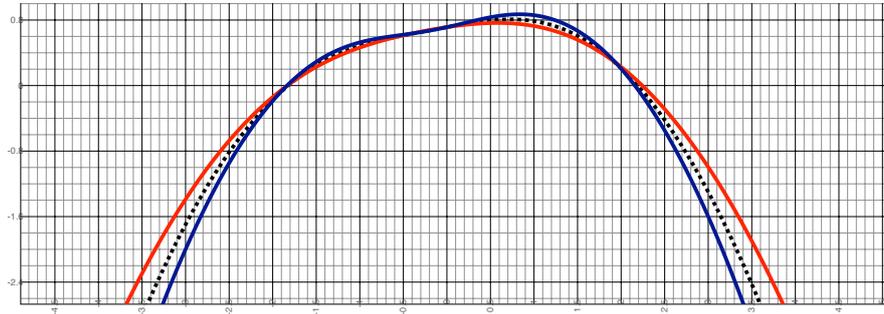


La curva rossa continua (la più scampanata) è per $\beta J = 0.2$; la curva continua blu è per $\beta J = 0.5$; la curva viola tratteggiata è per $\beta J = 2$; la curva verde tratteggiata è per $\beta J = 4$. Le prime due curve hanno un solo massimo per $\xi = 0$, le altre due curve hanno due massimi, uno negativo e uno positivo, ma un solo massimo globale per $\xi = m_0$ positivo: da osservare che è *soltanto questo che contribuisce all'asintotica dell'integrale*. Secondo il metodo di Laplace è l'andamento nell'intorno del massimo globale che domina l'integrale: gli altri massimi danno contributi esponenzialmente piccoli nel limite $N \rightarrow \infty$.

Uno studio grafico più accurato permette di determinare che per $\beta J = 1$ si ha una *biforcazione*³ nel senso che per valori di $\beta J < 1$, la funzione $S(\xi)$ ha un solo massimo per $\xi = 0$, mentre per $\beta J > 1$, $\xi = 0$ cessa di essere il punto di massimo assoluto della funzione: appena βJ diventa maggiore di 1, il massimo assoluto si sposta a destra. Ecco un grafico con la linea tratteggiata che corrisponde a $\beta J = 1$,

³In effetti, nel senso tecnico della teoria delle biforcazioni, ma per ragioni di tempo (e di natura di questo corso) non possiamo sviluppare questo aspetto.

mentre le altre due sono in corrispondenza di βJ di poco sopra e di poco sotto 1.



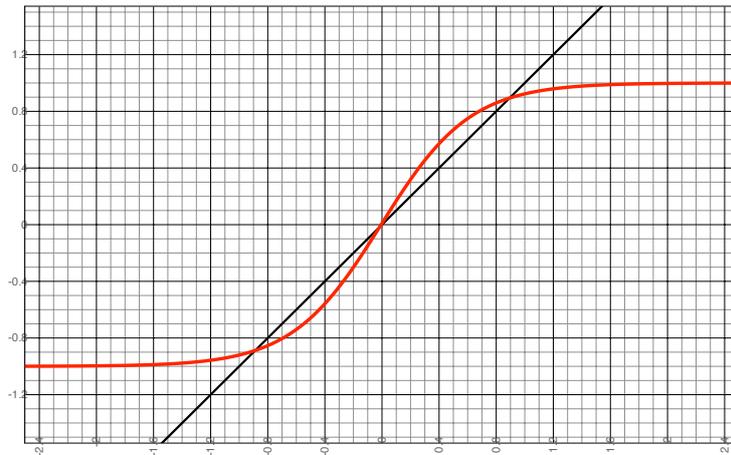
L'andamento della funzione S , discusso sopra graficamente, può essere reso più preciso studiando gli zeri della derivata

$$S'(\xi) = -(\beta J)\xi + (\beta J) \tanh((\beta J)\xi + \beta H) .$$

Il punto di massimo globale è dunque soluzione dell'equazione

$$m = \tanh((\beta J)m + \beta H)$$

(assumiamo βH positivo ma di entità trascurabile). Consideriamo il grafico:



Il grafico mostra che se $(\beta J) < 1$ le due curve si intersecano nello 0 e $m = 0$ è la sola soluzione, mentre per $(\beta J) > 1$, si hanno tre soluzioni. Non è difficile mostrare analiticamente che il massimo assoluto è per $m = m_0 > 0$ (l'altra soluzione è $-m_0$ nel limite di βH trascurabile).

Applichiamo infine a $I(N)$ la (3), per $\lambda = N$ e $f(x) = 1$. Allora

$$I(N) \sim \frac{\sqrt{2\pi} e^{NS(m)}}{\sqrt{-NS''(m)}}$$

da cui

$$Z(N, \beta) \sim \sqrt{\frac{(\beta J)}{-S''(m)}} e^{-\frac{(\beta J)}{2}} e^{NS(m)}$$

Dall'andamento asintotico della funzione di partizione risaliamo a quello dell'energia libera per spin

$$f = \frac{F}{N} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \log Z(N, \beta)$$

per $N \rightarrow \infty$. Quindi si ha

$$f = -\frac{1}{\beta} S(m)$$

vale a dire, la funzione S non è altro che l'energia libera per particella cambiata di segno (a meno di una costante moltiplicativa). Ricordiamo che

$$\text{magnetizzazione media per particella} = -\frac{\partial f}{\partial H} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial S}{\partial H}$$

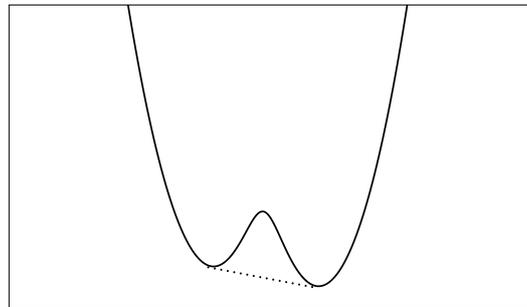
Ma

$$\frac{\partial S}{\partial H} = \beta \tanh((\beta J)m + \beta H) = \beta m$$

Quindi

$$m = \text{magnetizzazione media per particella}$$

Dunque, il massimo globale per la valutazione asintotica dell'integrale con il metodo di Laplace è, nel linguaggio della termodinamica, lo stato di equilibrio termodinamico, cioè lo stato di magnetizzazione media che rende minima l'energia libera (massimo di $S \rightarrow$ minimo di f). Rovesciando le curve di S (ad esempio per $\beta J > 1$) si ottengono i grafici tipici dell'energia libera (al variare della magnetizzazione):



Per ultimo, ma non per importanza, osserviamo che la biforcazione di cui abbiamo parlato prima non è altro che una *transizione di fase*: per $\beta J < 1$ lo stato di equilibrio è quello di una magnetizzazione media nulla, mentre per $\beta J > 1$ si ha una magnetizzazione spontanea anche in assenza di campo magnetico esterno. La temperatura critica corrisponde a $J/\kappa_B T_c = 1$, cioè a $T_c = J/\kappa_B$.