



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PISA

Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali
Corso di Laurea Specialistica in Scienze Fisiche

Tesi di Laurea Specialistica

Dinamica di rilassamento fuori equilibrio nel modello di Ising

Il Candidato
Mario Collura

Il Relatore
prof. Ettore Vicari

ANNO ACCADEMICO 2007-08

Ai pochi che mi amano e che io amo, a coloro che sentono piuttosto che a coloro che pensano, ai sognatori e a coloro che hanno fede nei sogni come nella sola realtà, offro questo Libro di Verità, non come esposizione di verità, ma per la Bellezza che abbonda nella sua Verità, e che lo rende vero.

Edgar Allan Poe

Indice

Introduzione	vii
1 Transizioni di Fase e Fenomeni Critici	1
1.1 Transizioni Continue	1
1.1.1 Esponenti critici	3
1.1.2 Modelli e classi di universalità	4
1.2 Teoria di campo medio	6
1.2.1 Energia libera in campo medio	7
1.2.2 Il criterio di Ginzburg	11
2 Invarianza di Scala e Gruppo di Rinormalizzazione	13
2.1 Il Gruppo di Rinormalizzazione	13
2.1.1 Scaling dell'Energia Libera	16
2.2 <i>Finite Size Scaling</i>	18
2.3 Correzioni allo Scaling ed Hamiltoniana Improved	20
2.3.1 La determinazione dei parametri improved	22
3 Processi Stocastici e Dinamica Critica	25
3.1 Processi Stocastici	25
3.1.1 Distribuzioni di probabilità dipendenti dal tempo	26
3.1.2 Catene di Markov	27
3.1.3 Master Equation	28

3.1.4	Carattere markoviano nelle equazioni di Langevin	32
3.2	Dinamica critica	33
3.3	Approccio di campo alla dinamica di non-equilibrio	35
3.3.1	Rappresentazione della dinamica mediante <i>path-integral</i> . . .	35
3.3.2	Rilassamento puramente dissipativo nel modello di Ising . . .	37
3.3.3	Il modello Gaussiano	39
3.3.4	\mathcal{RG} dinamico	41
4	Simulazione MC della Dinamica di Rilassamento Fuori Equilibrio	49
4.1	Tecniche Monte Carlo	49
4.1.1	L'algoritmo ed il generatore di numeri pseudorandom	51
4.2	Modello ed osservabili dinamiche	51
4.3	Risultati numerici	54
4.3.1	La suscettività: calcolo dell'esponente dinamico	55
4.3.2	Fattore di struttura e lunghezza di correlazione	60
	Conclusioni	65
	Ringraziamenti	67
A	Analisi Statistica nel Metodo Monte Carlo	69
A.1	Catene di Markov all'Equilibrio	69
A.1.1	Tempo di Autocorrelazione	70
A.2	Blocking	71
A.3	Jackknife	72
A.4	Analisi fuori equilibrio	72
	Bibliografia	75

Introduzione

Supponiamo di prendere una grande porzione di materia (per fissare le idee immaginiamo un sistema ferromagnetico) e di misurarne alcune proprietà macroscopiche (magnetizzazione, suscettività, etc.). Quindi, dividiamolo in due parti uguali e, lasciando inalterate le condizioni al contorno (temperatura, campo magnetico etc.), ripetiamo le stesse misure. Evidentemente le proprietà macroscopiche di ciascun pezzo risulteranno le stesse di quelle dell'intero blocco prima che venisse spezzato in due; e ciò continuerà ad essere vero se reiteriamo il processo di divisione.

D'altra parte sappiamo che la materia è costituita da atomi e molecole le cui proprietà sono differenti da quelle del materiale che vanno a costituire; verosimilmente, dopo molte iterazioni del processo di suddivisione, accadrà qualcosa di diverso: le grandezze che tenevamo sotto controllo cominceranno a differire sensibilmente dalle misure effettuate in precedenza. La scala di lunghezze alla quale le proprietà globali di un pezzo cominciano a differire marcatamente da quelle dell'originale dà una misura di ciò che è chiamata *lunghezza di correlazione* del materiale in questione.

Tale lunghezza di correlazione rappresenta la distanza entro la quale le fluttuazioni dei gradi di libertà microscopici (la posizione degli atomi e cose simili) sono significativamente correlate le une alle altre. Normalmente tale lunghezza è dell'ordine di qualche distanza interatomica; ciò significa che anche prendendo una piccola collezione di atomi è possibile avere delle informazioni precise sulle caratteristiche macroscopiche di un materiale.

Ciò detto, è evidente che la dimensione ϵ , più in generale, il concetto di scala occupano una posizione centrale nell'analisi di sistemi complessi caratterizzati da un gran numero di gradi di libertà. Un esempio sono le transizioni di fase del secondo ordine, caratterizzate da una lunghezza di correlazione ξ che diverge al punto critico; in questo caso i gradi di libertà microscopici restano correlati su tutto il campione (Figura 1). Le proprietà di scala al punto critico (invarianza di scala) implicano l'esistenza di leggi di scala dalle quali è possibile ricavare delle relazioni tra le grandezze fisiche e i parametri che determinano la distanza del sistema dal punto critico. Il fatto che un gran numero di gradi di libertà siano fortemente correlati tra loro rende lo studio delle transizioni di fase continue piuttosto difficile. Soltanto negli ultimi anni sono stati sviluppati dei metodi analitici per trattare tali problemi; tali metodi costituiscono un nuovo modo di approcciarsi ai fenomeni critici e prendono il nome di *Gruppo di Rinormalizzazione* (\mathcal{RG}). In pratica, benché sistemi con grande lunghezza di correlazione appaiano particolarmente complessi, mostrano dei

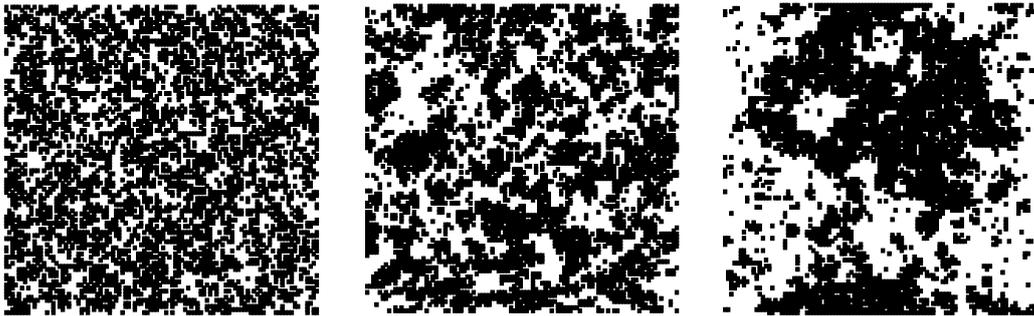


Figura 1: Reticolo di Ising bidimensionale 100×100 con condizioni periodiche al contorno. Da sinistra verso destra mostriamo il sistema all'equilibrio alla temperatura $\beta/\beta_c = 0.5, 0.85, 0.98$. È evidente l'aumento della correlazione spaziale all'avvicinarsi della temperatura critica.

comportamenti universali che permettono notevoli semplificazioni. Di fatto molte proprietà di un sistema vicino ad una transizione di fase continua sono indipendenti dai dettagli microscopici dell'Hamiltoniana; tali proprietà dipendono unicamente da alcune caratteristiche globali del sistema: la simmetria dell'Hamiltoniana, il numero di dimensioni spaziali, il numero di componenti del parametro d'ordine etc. Questo fenomeno di “universalità” è facilmente spiegabile usando le tecniche del \mathcal{RG} . Vicino ad un punto critico la lunghezza di correlazione ed altre quantità termodinamiche mostrano un comportamento tipo “legge di potenza” in funzione dei parametri che specificano la distanza dal punto critico. Queste potenze, o *esponenti critici*, sono dei numeri puri che dipendono soltanto dalla classe d'universalità a cui appartiene il sistema. L'obiettivo principale dello studio dei fenomeni critici è proprio spiegare il perché compaiano tali potenze e predirne i valori.

Le proprietà critiche non si limitano a comparire nell'ambito dei fenomeni statici, bensì influenzano fortemente anche la dinamica di tali sistemi. In pratica, al punto critico la dinamica è anch'essa caratterizzata da divergenze parametrizzabili mediante opportune leggi di potenza. Di fatto, se si verifica una variazione di una grandezza locale in un punto x_0 del campione, essa dovrà propagarsi all'interno di tutto il volume correlato al punto x_0 prima di ottenere una variazione sensibile della media sull'intero sistema della stessa osservabile. Il divergere della lunghezza di correlazione ξ si ripercuote dunque sui tempi di rilassamento del sistema stesso: questo fenomeno prende il nome di *critical slowing down*.

Studiare la dinamica di sistemi caratterizzati da interazioni a breve distanza e parametro d'ordine scalare, (per esempio sistemi ferromagnetici uniassiali) che appartengono dunque alla classe di universalità “tipo modello di Ising”, permette di verificare l'universalità dei comportamenti critici. Così per esempio, migliorare le nostre conoscenze intorno agli esponenti critici che caratterizzano la dinamica all'equilibrio¹, effettuando analisi fuori dall'equilibrio, permette di stabilire la grande universalità di tali esponenti.

¹Si rimanda al capitolo successivo per la definizione di tali esponenti.

Uno dei metodi per affrontare lo studio della dinamica critica fuori e all'equilibrio consiste nella simulazione numerica mediante tecniche Monte Carlo; l'utilizzo di calcolatori sempre più efficienti ha permesso una sempre maggiore accuratezza dei risultati, spingendo le simulazioni su reticoli via via più grandi. Un limite delle tecniche Monte Carlo è proprio la dimensione finita del reticolo su cui si effettua la simulazione. Avere a che fare con un sistema finito altera infatti il comportamento critico, che è tale solo nel limite termodinamico ($L \rightarrow \infty$). Per un sistema di dimensioni finite, come nel caso di qualsiasi simulazione, la lunghezza di correlazione ξ non può divergere (è vincolata a restare sempre minore delle dimensioni lineari del reticolo), e anche le divergenze in tutte le altre quantità risultano “arrotondate” e “spostate”. È come se nelle relazioni di riscaldamento il ruolo di ξ venisse preso dalle dimensioni lineari del sistema.

Nel linguaggio del \mathcal{RG} , avere introdotto un parametro L che misura le dimensioni del sistema induce delle modifiche al comportamento riscaldante delle osservabili alla criticità (*Finite Size Scaling*). Inoltre, la presenza di un eventuale operatore irrilevante introduce delle correzioni non analitiche alla forma di riscaldamento delle stesse osservabili. Tali *scaling corrections* possono essere minimizzate introducendo nuovi parametri nell'Hamiltoniana; parametri che, pur mantenendo il sistema nella stessa classe di universalità, possono essere opportunamente “accordati” per sopprimere quantomeno gli effetti dominanti delle correzioni successive allo scaling.

L'utilizzo di Hamiltoniane “improved” nell'ambito delle tecniche Monte Carlo è un modo per guardare con più attenzione all'influenza che le correzioni successive allo scaling hanno sui risultati. Un'analisi ottimale, infatti, deve tenere conto di tali correzioni: con le hamiltoniane “improved” si riescono a priori a tagliare fuori le correzioni principali, ottenendo dei risultati più precisi; tutto ciò permettendo un miglioramento nelle stime degli esponenti critici e delle altre grandezze di interesse termodinamico.

	z
FT <i>d-fixed</i> [20]	2.017
FT <i>ϵ-expansion</i> [19]	2.02
MC <i>equilibrium</i> [21, 22]	2.04(3), 2.10(2)
MC <i>damage spreading</i> [23, 24]	2.034(4), 2.04(1)
MC <i>critical relaxation</i> [25, 26]	2.05(2), 2.04(2)
MC <i>short-time dynamics</i> [27]	2.042(6)

Tabella 1: Stime dell'esponente dinamico z per il modello di Ising tridimensionale.

In particolare, il nostro interesse nel migliorare la stima dell'esponente dinamico z per il modello di Ising in tre dimensioni è da ricercare nella discrepanza che esiste ancora tra le varie stime che si hanno di tale esponente; soprattutto tra le predizioni

della FT (*fields theory*) e i risultati delle simulazioni MC (in tabella 1 riportiamo i valori raccolti dalla letteratura sull'argomento). Le stime sperimentali dell'esponente dinamico si possono ottenere effettuando diffusione inelastica di neutroni su un qualsiasi sistema che appartiene alla classe di universalità in questione; in particolare, si ottiene un'immagine della dinamica critica all'equilibrio analizzando il fattore di struttura dinamico $S(\mathbf{q}, \omega)$ che è legato alle correlazioni del parametro d'ordine. Abbiamo scelto un modello "improved", facendo particolare attenzione alle correzioni successive allo scaling, per garantire una maggiore affidabilità delle stime ottenute.

Il lavoro di tesi è organizzato nel modo seguente. Nel *Capitolo 1* vengono brevemente illustrate le caratteristiche delle transizioni di fase continue, introdotti gli esponenti critici e discussi i modelli. Nel *Capitolo 2* si introducono le nozioni relative al concetto di Gruppo di Rinormalizzazione in statica, il *finite size scaling* e il concetto di Hamiltoniana "improved"; tutto questo per consentire una semplice derivazione delle leggi di scala e delle relazioni tra gli esponenti critici. Nel *Capitolo 3* si analizza la dinamica stocastica propria di tali sistemi e si introduce il concetto di Catena di Markov per riprodurre tale dinamica. Si effettua anche una prima analisi quantitativa della dinamica fuori equilibrio in approssimazione Gaussiana. Infine vengono date le forme di riscaldamento delle osservabili dinamiche alla criticità facendo uso dell'analisi \mathcal{RG} dinamica. Nel *Capitolo 4* vengono analizzate le tecniche di simulazione Monte Carlo da noi usate e presentati i risultati delle simulazioni effettuate sul nostro modello improved.

Capitolo 1

Transizioni di Fase e Fenomeni Critici

In questo capitolo daremo una descrizione d'insieme delle transizioni di fase, soffermandoci su quelle continue. Analizzeremo qualitativamente il comportamento critico della materia in vicinanza di tali punti critici introducendo la nomenclatura che è propria di tali fenomeni.

1.1 Transizioni Continue

Nell'analisi delle caratteristiche macroscopiche di un sistema arbitrariamente complesso gioca un ruolo fondamentale la *lunghezza di correlazione* ξ ; essa infatti misura l'intervallo spaziale entro il quale i gradi di libertà microscopici sono significativamente correlati. Parti dello stesso sistema separate da qualche lunghezza di correlazione sono effettivamente indipendenti tra loro e mostrano le stesse proprietà macroscopiche del sistema originario. È noto però che il valore effettivo della lunghezza di correlazione dipende fortemente dalle condizioni esterne che determinano lo stato del sistema. Può succedere infatti che il comportamento macroscopico di un sistema possa variare bruscamente per piccoli cambiamenti delle condizioni al contorno. I punti in cui si verifica ciò sono detti *punti critici* e, normalmente, individuano una transizione di fase da uno stato della materia ad un altro. Esistono due possibili modi in cui tale transizione avviene:

1. Nel primo caso due o più stati da una e dall'altra parte del punto critico coesistono esattamente al punto critico. Risultano essere comunque due stati distinti con proprietà macroscopiche differenti. Lontano dal punto critico esiste generalmente una fase unica le cui proprietà sono connesse in modo continuo alla corrispondente fase coesistente al punto critico. Attraversando il punto critico varie quantità termodinamiche presentano delle discontinuità. Una transizione di tale tipo prende il nome di *transizione di fase del 1 ordine*. Esempi di tali transizioni sono la condensazione di un gas o la fusione di un solido.

2. La situazione è molto diversa nelle *trasizioni di fase del secondo ordine o continue*; in questo caso infatti la lunghezza di correlazione diviene infinita e le fluttuazioni risultano correlate su tutte le scale di distanza forzando l'intero sistema ad assumere un'unica fase critica. In pratica, nelle transizioni continue, due o più fasi ai lati del punto critico divengono identiche avvicinandosi al punto critico. Così facendo, non solo diverge la lunghezza di correlazione ma le differenze di varie grandezze termodinamiche (si pensi alla magnetizzazione nel caso dei ferromagneti) tra le fasi in competizione tendono a zero con continuità. Transizioni di questo tipo avvengono alla temperatura di Curie per i ferromagneti ed al punto critico liquido-vapore dell'acqua.

Come già accennato, in corrispondenza di una transizione di fase continua il comportamento del sistema dipende da caratteristiche globali quali le dimensioni spaziali, le simmetrie dell'Hamiltoniana effettiva, il numero di componenti del parametro d'ordine¹. In quanto segue, per esemplificare un modello di transizione continua, prenderemo ad esempio un sistema ferromagnetico uniaassiale. In un sistema di tale tipo esistono due parametri esterni che possono essere variati: la temperatura T e il campo magnetico applicato H . Inoltre, l'esistenza di una direzione privilegiata costringe la magnetizzazione locale a mantenersi parallela o antiparallela ad un particolare asse. Il diagramma di fase di un sistema così fatto è mostrato in Figura 1.1; si vede che tutte le quantità termodinamiche sono funzioni analitiche di T e H

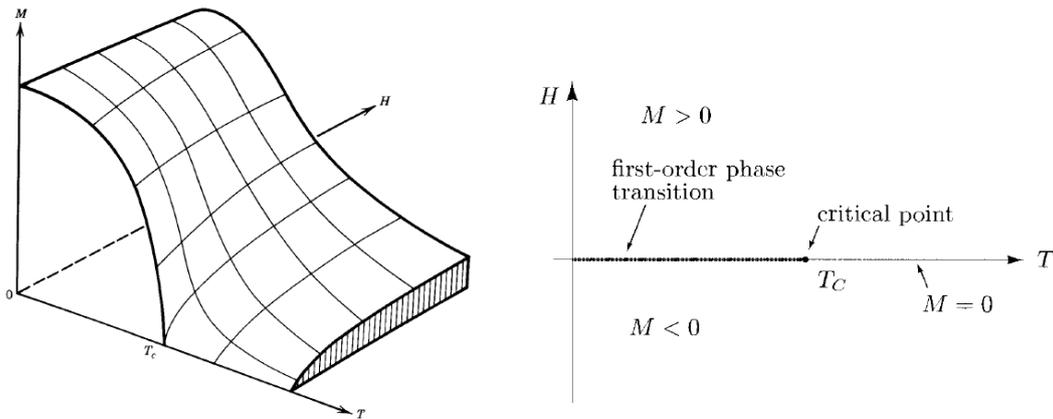


Figura 1.1: *Diagramma di fase di un ferromagnete uniaassiale.*

eccetto nella linea $H = 0, T \leq T_c$. Attraversando la linea $T < T_c$, la magnetizzazione M , come funzione di H è discontinua. Quando T tende al punto di Curie T_c la discontinuità tende a zero. Il punto $H = 0, T = T_c$ è un esempio di punto critico in cui la transizione del primo ordine diviene continua (e dunque del secondo ordine). Quando $T < T_c$ i due limiti $H \rightarrow 0+$ e $H \rightarrow 0-$ danno due valori differenti $\pm M_0$

¹Il parametro d'ordine è generalmente una funzione dei gradi di libertà il cui valore medio è indice dell'ordinamento del sistema.

per la magnetizzazione; quale dei due il sistema scelga dipende dalla storia passata. Questo è un esempio di *rottura spontanea di simmetria*: benché l'hamiltoniana sia invariante sotto inversione simultanea di tutti i gradi di libertà magnetici locali, tale simmetria non è rispettata dallo stato termodinamico d'equilibrio.

1.1.1 Esponenti critici

Come detto in precedenza, molte delle quantità di interesse esibiscono un comportamento tipo legge di potenza avvicinandosi al punto critico. Se scriviamo l'energia libera \mathcal{F} in termini della temperatura ridotta $t \equiv (T - T_c)/T_c$ e del campo magnetico esterno H , i principali esponenti critici sono:

α caratterizza la divergenza del calore specifico ad H nullo:

$$C \propto -\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial t^2} \sim A_{\pm}^C |t|^{-\alpha} + B; \quad (1.1)$$

il termine B determina l'altezza del picco quando α è negativo.

β caratterizza l'andamento della magnetizzazione spontanea nel limite $H \rightarrow 0+$:

$$\lim_{H \rightarrow 0+} M \sim (-t)^{-\beta}; \quad (1.2)$$

γ caratterizza la suscettività a campo magnetico esterno nullo:

$$\chi \equiv \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} \sim A_{\pm}^{\chi} |t|^{-\gamma}; \quad (1.3)$$

δ a $T = T_c$ la magnetizzazione varia con H in accordo a:

$$M \sim |H|^{1/\delta}; \quad (1.4)$$

ν caratterizza la divergenza della lunghezza di correlazione ξ ad $H = 0$ quando $t \rightarrow 0$:

$$\xi \sim A_{\pm}^{\xi} |t|^{-\nu}; \quad (1.5)$$

dove ξ è definita attraverso il comportamento asintotico a grandi r della funzione di correlazione delle fluttuazioni della magnetizzazione locale:

$$G(r) \equiv \langle m(r)m(0) \rangle - \langle m(r) \rangle \langle m(0) \rangle \propto e^{-\frac{|r|}{\xi}} \quad (1.6)$$

dove le $\langle \dots \rangle$ indicano la media statistica sulle configurazioni. Alternativamente, la si può definire mediante il momento secondo $\xi^2 \equiv \frac{1}{2d} \frac{\sum_r r^2 G(r)}{\sum_r G(r)}$ in d dimensioni;

η caratterizza il decadimento della funzione di correlazione $G(r)$ esattamente al punto critico; esso non è più esponenziale ma segue la legge $G(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$;

z è collegato a proprietà dipendenti dal tempo in vicinanza del punto critico. Il tempo di rilassamento τ diverge avvicinandosi al punto critico in accordo a $\tau \propto \xi^z$.

Si verifica che gli esponenti critici non dipendono dal fatto di essere al di sopra o al disotto della temperatura critica, mentre i fattori di proporzionalità A_{\pm} ne dipendono. In effetti sia gli esponenti critici sia i rapporti delle ampiezze dipendono solamente dalla classe di universalità.

1.1.2 Modelli e classi di universalità

Il comportamento di un sistema con molti gradi di libertà, governato a livello microscopico da un Hamiltoniana $\mathcal{H}[s_i]$, è in linea di principio ben definito. Il valore di aspettazione di una generica quantità fisica può essere calcolato direttamente dalla funzione di distribuzione di Gibbs $e^{-\beta\mathcal{H}}$. In particolare, le grandezze termodinamiche come la suscettività o la magnetizzazione si ricavano derivando opportunamente la funzione di partizione

$$Z = \sum_{s_i} e^{-\beta\mathcal{H}[s_i]}. \quad (1.7)$$

Anche quando \mathcal{H} è relativamente semplice, calcolare Z è molto complicato; per Hamiltoniane realistiche fare un conto del genere è fuori discussione. Motivo questo che porta ad introdurre modelli semplificati che catturino l'essenza del problema, riproducendo esattamente il comportamento del sistema reale almeno per quanto riguarda gli aspetti universali della criticità. Essendo questi [gli aspetti universali] indipendenti dai parametri microscopici che entrano in \mathcal{H} , non si pone il problema di individuare il "best fit" per tali parametri: l'appartenenza ad una stessa classe di universalità implica i medesimi comportamenti critici. Il modello che deve catturare l'essenza di una determinata classe o è giusto o è sbagliato; o vi appartiene o no.

Oltretutto, la soluzione esatta di modelli semplificati non permette di separare gli aspetti universali da quelli che non lo sono; fortunatamente, i dettami del \mathcal{RG} permettono una tale distinzione. Da questo punto di vista, la soluzione esatta di hamiltoniane modello va vista come un modo per descrivere alcune caratteristiche microscopiche rilevanti e capire in che termini mostrino carattere universale.

Un'ulteriore semplificazione che possiamo fare viene dal fatto che, a temperatura finita e per sistemi non degeneri, le fluttuazioni termiche dominano completamente quelle quantistiche. Anche quando la fisica che determina il comportamento di tali sistemi ha una natura intrinsecamente quantomeccanica, i modelli possono essere descritti mediante Hamiltoniane classiche e i calcoli fatti sommando sullo spazio delle fasi classico.

Freccette e Lenzuola Il modo più semplice per modellizzare un magnete isotropo è immaginare degli spin classici \mathbf{s}_i localizzati su siti x_i di un reticolo (vedi Figura

1.2) e interagenti secondo l'Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - \sum_i \mathbf{H}_i \mathbf{s}_i, \quad (1.8)$$

dove V_{ij} è l'interazione tra gli spin, che decade all'aumentare della distanza tra i e j , e H_i è il campo magnetico esterno (in generale non uniforme). Se $V_{ij} > 0$ il sistema è detto ferromagnetico poiché si favoriscono le configurazioni con spin paralleli, nel caso contrario si parla di sistema anti-ferromagnetico. In un sistema

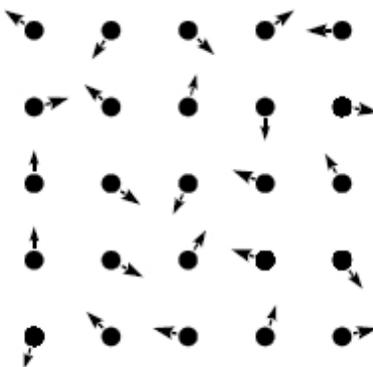


Figura 1.2: Modello di sistema di spin su reticolo.

reale gli spin costituiscono un reticolo cristallino che non gode di una completa simmetria rotazionale; il campo cristallino può vincolare gli spin ad allinearsi lungo alcune direzioni privilegiate. Nel caso in cui gli spin sono vincolati a giacere in un piano, essendo \mathbf{s}_i un vettore a due componenti di modulo unitario, allora si parla di *modello planare* o *XY*. Se il sistema possiede una forte anisotropia lungo un asse, per esempio l'asse z , i gradi di libertà sono ristretti a $s_z = \pm 1$; si parla in questo caso di *modello di Ising*. Per altro, il modello di Ising è uno dei modelli più studiati nella teoria delle transizioni di fase, non solo come prototipo di sistema che presenta comportamento critico descritto da leggi di potenza non banali, ma anche perchè descrive numerosi sistemi fisici; le miscele binarie di fluidi, i sistemi di fluidi coulombiani e così via, sono tutti sistemi caratterizzati da un parametro d'ordine scalare e da un'interazione a corto raggio che li fa ricadere nella classe d'universalità del modello di Ising.

Per il modello di Ising vengono confrontati i risultati delle previsioni teoriche e delle simulazioni Monte Carlo con i dati sperimentali in Tabella 1.1.

Il modello di Blume-Capel Come esempio, consideriamo una generalizzazione del modello di Ising in cui gli spin s_i possono assumere valori nell'insieme $\{-1, 0, +1\}$. Possiamo pensare a tale modello come la versione classica di un sistema quantistico

	γ	ν	η	α	β
FD[17, 18]	1.2396(13)	0.6303(8)	0.0335(25)	0.1091(24)	0.3258(14)
ϵ [17]	1.2380(50)	0.6305(25)	0.0365(50)	0.108(7)	0.3265(15)
IHT[9, 10]	1.2373(2)	0.63012(16)	0.03639(15)	0.1096(5)	0.32653(10)
MC[8]	1.2366(15)	0.6297(5)	0.0362(8)	0.1109(15)	0.3262(4)
EXP[4]:					
lv	1.14(5)	0.62(3)	0.042(6)	0.111(1)	0.324(2)
mx	1.244(42)	0.636(31)	0.045(11)	0.104(11)	0.327(3)
cb		0.641(3)			0.328(10)
ms	1.14(7)			0.11(3)	0.34(2)

Tabella 1.1: Stime di esponenti critici per modello di Ising in dimensione tre ottenute dall'analisi in dimensione fissa (FD) ed espansione ϵ , e da tecniche su reticolo come l'espansione ad alta temperatura improved (IHT) e simulazioni Monte Carlo (MC). I dati sperimentali (EXP) sono ottenuti da sistemi anche molto diversi tra loro ($lv = \text{transizioni liquido vapore}$, $mx = \text{misture binarie}$, $cb = \text{fluidi coulombiani}$, $ms = \text{sistemi magnetici uniaxiali}$), che però appartengono alla stessa classe di universalità.

di spin-1 o, ancora, come un gas di particelle magnetiche su reticolo in cui $|s_i|$ gioca il ruolo di numero di occupazione; in alternativa, i siti in cui $s_i = 0$ possono essere pensati come delle lacune (libere di muoversi) in un reticolo di Ising. Il modello in questione è noto col nome di **modello di Blume-Capel**, e l'Hamiltoniana ridotta è

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} s_i s_j + D \sum_i s_i^2 - H \sum_i s_i, \quad (1.9)$$

dove il nuovo parametro D può essere pensato come un potenziale chimico per le lacune. Vedremo che tale modello sarà molto utile come base di partenza per ridurre gli effetti di *finite size scaling*.

1.2 Teoria di campo medio

Per avere un quadro qualitativamente corretto dei diagrammi di fase di un dato modello si ricorre spesso a delle tecniche che vengono accorpate insieme sotto il nome di *teoria di campo medio*. Si tratta sostanzialmente di sviluppare la funzione di partizione attorno alla configurazione più probabile, in cui si suppone essere molto piccata. Benchè tali metodi falliscono per definizione in vicinanza del punto critico (in cui le correlazioni tra le fluttuazioni statistiche non sono trascurabili), permettono, assieme ai dettami del \mathcal{RG} , di chiarire la natura della transizione di fase che presentano i modelli. Nei casi in cui la correlazione tra le fluttuazioni sia soppressa

per qualche motivo fisico, i risultati sono anche quantitativamente corretti.

1.2.1 Energia libera in campo medio

Come base di partenza per illustrare le tecniche di campo medio, e alla luce di quanto detto nel paragrafo precedente, considereremo il modello di Blume-Capel; a partire dalla (1.9) la funzione di partizione è

$$Z = e^{-\beta\mathcal{F}} = \sum_{s_i} e^{\frac{1}{2}\beta\sum_{i,j} V_{ij}s_i s_j - \beta D \sum_i s_i^2 + \beta H \sum_i s_i}, \quad (1.10)$$

dove, com'è solito, $\beta = 1/K_B T$. Se l'accoppiamento ferromagnetico di scambio V_{ij} fosse assente, calcolare Z sarebbe banale, dal momento che essa si fattorizzerebbe nel prodotto di termini a singolo spin. In questo caso la magnetizzazione sarebbe data semplicemente da

$$\langle s \rangle = \frac{\sum_{s=-1,0,+1} s e^{\beta(Hs - Ds^2)}}{\sum_{s=-1,0,+1} e^{\beta(Hs - Ds^2)}} = \frac{2 \sinh(\beta H)}{2 \cosh(\beta H) + e^{\beta D}}. \quad (1.11)$$

L'approccio di campo medio consiste sostanzialmente nell'approssimare il parametro d'ordine s_i con il suo valore medio $m = \langle s_i \rangle$ il cui valore si trova in maniera consistente minimizzando l'energia libera. Se sviluppiamo il parametro d'ordine in un intorno di m tenendoci solo i termini lineari in s_i , la funzione di partizione si riduce nel prodotto di tante funzioni di partizione quanti sono gli N siti reticolari, e l'energia libera per sito è:

$$f = -\frac{\ln Z}{\beta N} = \frac{1}{2}V_0 m^2 + D - \beta^{-1} \ln \left\{ 2 \cosh [\beta(V_0 m + H)] + e^{\beta D} \right\}, \quad (1.12)$$

avendo posto $V_0 = \sum_j V_{ij}$. Il valore effettivo di m è dato dall'equazione $\partial f / \partial m = 0$ da cui si ottiene

$$m = \frac{2 \sinh [\beta(V_0 m + H)]}{2 \cosh [\beta(V_0 m + H)] + e^{\beta D}}. \quad (1.13)$$

Non è un caso che il risultato coincida proprio con la magnetizzazione di un singolo spin isolato in un campo magnetico di valore $V_0 m + H$; è come se ogni sito reticolare percepisce un campo dato dalla somma del campo esterno H e di un *campo molecolare* $V_0 m$ prodotto dagli spin circostanti. Notare inoltre che se $D \rightarrow -\infty$ si ripristina il risultato noto della teoria di campo medio per il modello di Ising; infatti, quando $D \rightarrow -\infty$, le configurazioni con $s_i = 0$ sono completamente soppresse nella funzione di partizione e si recupera dunque il modello di Ising. Esistono, in generale, differenti soluzioni della (1.13) che dipendono dai vari parametri in gioco; per semplificare l'analisi ci metteremo nella condizione $H = 0$. Per piccoli valori di m possiamo espandere l'energia libera in serie di Taylor tenendoci i termini fino a m^4 ; in generale avremo, per questioni di simmetria

$$f_{MF}(m) = \text{const} + A(\beta, V_0, D)m^2 + B(\beta, V_0, D)m^4 + \mathcal{O}(m^6). \quad (1.14)$$

Il segno di $A(\beta, V_0, D)$ determina la fase (ordinata o disordinata) del sistema; le due fasi sono separate da una curva critica nello spazio dei parametri individuata da $A(\beta_c, V_0, D) = 0$. Il segno di $B(\beta, V_0, D)$ determina invece il tipo di transizione: per $B(\beta, V_0, D) < 0$ siamo in presenza di transizioni del 1° ordine, viceversa la transizione è continua. L'intersezione delle due curve ($A = 0$ e $B = 0$) definisce il confine tra i due tipi di transizione di fase: questo punto è chiamato *punto tricritico*². Il valore della curva delle temperature critiche è realisticamente sovrastimato; questo poiché nell'approssimazione di campo medio si trascurano gli effetti delle fluttuazioni che tendono a deprimere l'ordine magnetico e ad abbassare la temperatura critica reale. In dimensioni sufficientemente basse le fluttuazioni possono ridurre l'ordine magnetico fino a farlo scomparire del tutto; in questo caso la transizione di fase potrà avvenire solo allo zero assoluto. In Figura 1.3 riportiamo il diagramma di fase con gli andamenti qualitativi dell'energia libera nelle varie zone dello spazio delle fasi.

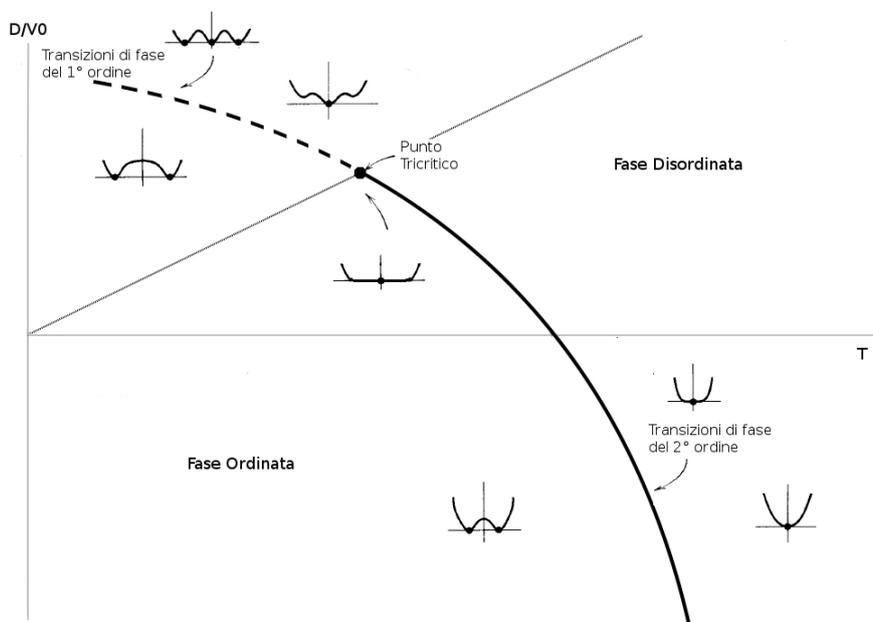


Figura 1.3: Diagramma di fase schematico per il modello di Blume-Capel nell'approssimazione di campo medio.

²Le funzioni A e B possono essere determinate facendo uso degli sviluppi in serie di cosh e ln ottenendo

$$A(\beta, V_0, D) = V_0 \left(\frac{1}{2} - \frac{\beta V_0}{2 + e^{\beta D}} \right)$$

$$B(\beta, V_0, D) = -\frac{\beta^3 V_0^4}{2(2 + e^{\beta D})} \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2 + e^{\beta D}} \right)$$

Nella zona delle transizioni del secondo ordine, l'attraversamento della linea critica, dalla fase disordinata a quella ordinata, comporta la comparsa di due minimi corrispondenti ai due possibili valori della magnetizzazione spontanea: in entrambe le fasi il comportamento di f_{MF} in un intorno dei rispettivi minimi è dominato dal termine quadratico m^2 . Nella curva critica, in seguito all'annullarsi del coefficiente di m^2 , la forma di f_{MF} è determinata dal termine quartico, con un conseguente aumento delle fluttuazioni statistiche. Se ci si sposta lungo tale curva fino a raggiungere la soglia delle transizioni discontinue (*punto tricritico*) anche il coefficiente quartico si annulla e l'energia libera diviene proporzionale a m^6 con un ulteriore aumento delle fluttuazioni della magnetizzazione.

Nella zona di piano che individua le transizioni di fase del primo ordine, almeno in vicinanza della curva critica, l'energia libera presenta tre minimi (uno in corrispondenza di $m = 0$, gli altri due in $m = \pm m_0$): per $T < T_c$ lo stato $m = 0$ è uno stato metastabile corrispondente ad un minimo relativo della f_{MF} , gli altri due minimi (ugualmente probabili) sono invece minimi assoluti; per $T = T_c$ i tre possibili valori della magnetizzazione sono equiprobabili; per $T > T_c$ il valore dell'energia libera in corrispondenza di $m = \pm m_0$ è maggiore di quello corrispondente a magnetizzazione nulla.

La differenza sostanziale tra i due tipi di transizione è resa evidente dall'analisi appena fatta:

- Spostandosi da $T < T_c$ a $T > T_c$, in corrispondenza di una transizione del secondo ordine, la f_{MF} modifica la propria forma avvicinando i due minimi di potenziale ($m_0 \rightarrow 0$) e contemporaneamente abbassando il gradino di potenziale che li separa. È proprio questo che rende continua la transizione.
- Per le transizioni del primo ordine, se ci si sposta da $T < T_c$ a $T > T_c$, in un primo momento si ha un abbassamento dell'energia in corrispondenza della fase disordinata (stato metastabile in $m = 0$), questo senza rimuovere il gap di potenziale o avvicinare i punti corrispondenti ai due minimi assoluti; quindi, superato il valore critico, l'energia corrispondente a $m = \pm m_0$ comincia ad aumentare e la forma di f_{MF} si avvicina a quella di una parabola avente vertice in zero.

L'effetto dominante della presenza di lacune nel modello di Ising (la cui probabilità di configurazione dipende dal parametro D) è quello di modificare la temperatura critica senza alterare le proprietà critiche universali. Se consideriamo infatti gli esponenti critici della teoria, a partire dalla (1.14) si ottiene per $T < T_c$,

$$m_0 = \left(-\frac{A}{2B}\right)^{1/2} \propto (-t)^{1/2} \Rightarrow \beta = 1/2 \quad (1.15)$$

dove si è preso $A \propto t = (T - T_c)/T_c$ e $B \propto \text{cost}$. Altrettanto semplicemente si ottengono i restanti esponenti critici per la teoria di campo medio; riassumiamo di seguito i risultati:

$$\alpha = 0, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = 1, \quad \delta = 3. \quad (1.16)$$

Analogamente, se consideriamo la funzione di Green G_i , che descrive la risposta della magnetizzazione media $\langle m_i \rangle$ ad una sorgente di campo magnetico molto piccola posta nell'origine, possiamo generalizzare la (1.13) e ottenere:

$$G_i = \frac{2 \sinh(\beta \sum V_{ij} G_{ij})}{2 \cosh(\beta \sum V_{ij} G_{ij}) + e^{\beta D}}; \quad (1.17)$$

che per grandi distanze, supponendo G decrescente, si approssima con

$$G_i \approx \beta \sum V_{ij} G_{ij} + \text{correzioni per piccole distanze} \quad (1.18)$$

la cui trasformata è

$$\tilde{G}(k) = \beta \tilde{V}(k) \tilde{G}(k) + \text{cost.} \quad (1.19)$$

Per grandi distanze (e quindi per k piccoli) possiamo espandere $\tilde{V} = V(1 - R^2 k^2)$, dove $R^2 = \sum_i r_i^2 V_i / \sum_i V_i$ misura il range dell'interazione di scambio; in questo modo si ottiene:

$$\tilde{G}(k) \propto \frac{R^{-2}}{k^2 + \xi^{-2}}, \quad (1.20)$$

dove si è posto $\xi \equiv Rt^{-1/2}$. In conclusione:

- ritornando nello spazio reale $G_i \sim e^{-|x_i|/\xi}$ identifica ξ con la lunghezza di correlazione e implica $\nu = 1/2$;
- al punto critico, $G_i \sim |x_i|^{-d+2}$ e $\eta = 0$.

Evidentemente, vicino ad una transizione di fase del secondo ordine, gli esponenti critici non dipendono dal parametro D . Le cose cambiano se ci si mette nel punto tricritico (tale punto infatti compare nel diagramma di fase del modello per un preciso valore D_{3c}); in questo caso, il coefficiente di m^4 è identicamente nullo, e nell'espansione di f_{MF} bisogna tenersi il termine m^6 . Nelle solite ipotesi di linearità del coefficiente quadratico, si ottiene $\beta_{3c} = 1/4$. In questo caso, gli esponenti critici in approssimazione di campo medio sono:

$$\alpha_{3c} = \frac{1}{2}, \quad \beta_{3c} = \frac{1}{4}, \quad \gamma_{3c} = 1, \quad \delta_{3c} = 5. \quad (1.21)$$

I risultati per gli esponenti critici in approssimazione di campo medio mostrano un notevole grado di universalità. Essi non solo sono indipendenti dai dettagli microscopici del modello ma anche dalle dimensioni spaziali e dal numero di componenti dello spin. I loro valori dipendono soltanto dal fatto che l'energia libera di campo medio è una funzione analitica del parametro d'ordine m . Non deve sorprendere quindi che la soluzione di Onsager per il modello di Ising bidimensionale e le osservazioni sperimentali diano risultati ben diversi da quelli calcolati nell'approssimazione di campo medio.

1.2.2 Il criterio di Ginzburg

L'approssimazione che abbiamo fatto nel derivare i risultati del paragrafo 1.2.1 è stata trascurare il termine $\sum_j V_{ij} \delta s_i \delta s_j$ nel calcolo dell'energia libera, dove $\delta s_i = s_i - m$. Chiaramente, i risultati ottenuti devono essere consistenti con tale approssimazione; di fatto, l'energia libera nell'approssimazione di campo medio deve essere molto più grande delle fluttuazioni che abbiamo tagliato fuori.

Vicino al punto critico e trascurando le correzioni dovute alla presenza di D (che abbiamo visto essere irrilevanti ai fini del comportamento critico del sistema, salvo non essere in un intorno del punto tricritico)³, dalla 1.14 si ha $f_{MF} \approx V_0(1 - \beta V_0)^2$. La densità di energia in approssimazione di campo medio risulta quindi

$$\frac{\partial \beta f_{MF}}{\partial \beta} \sim V_0 t; \quad (1.22)$$

nell'ipotesi in cui V_{ij} ha un range molto più corto della funzione di correlazione, possiamo valutare le fluttuazioni della densità d'energia (in $d > 2$) con:

$$\sum_j V_{ij} G_{ij} \approx V_0 G_0 \sim \frac{V_0}{R^2} \int \frac{d^d k}{k^2 + \xi^{-2}} \sim \frac{V_0 \xi^{2-d}}{R^2}. \quad (1.23)$$

Il contributo delle fluttuazioni alla densità d'energia sarà dunque di molto inferiore al contributo di campo medio se $V_0 \xi^{2-d}/R^2 \ll V_0 t$; ricordando che in approssimazione di campo medio si ha $\xi = R t^{-1/2}$ otteniamo

$$\xi^{4-d} \ll R^4, \quad (1.24)$$

che prende il nome di *criterio di Ginzburg*.

Si vede che, se $d < 4$, avvicinandoci al punto critico la lunghezza di correlazione ξ crescerà fino a raggiungere il punto in cui la (1.24) verrà violata, rendendo non più valida l'approssimazione di campo medio. Evidentemente, il punto in cui essa fallisce dipende dal range dell'interazione R , misurato in termini del passo reticolare a . D'altra parte, se $d > 4$, i termini correttivi alla teoria di campo medio sono meno singolari della teoria stessa e vanno a modificare le ampiezze predette dall'approssimazione di campo medio lasciando inalterati gli esponenti critici.

³In quanto segue ci siamo messi nelle condizioni $D \rightarrow -\infty$.

Capitolo 2

Invarianza di Scala e Gruppo di Rinormalizzazione

In questo capitolo introduciamo i concetti che stanno alla base dell'approccio moderno alla teoria del comportamento critico, e che vengono raggruppati sotto il nome di *Gruppo di Rinormalizzazione*. L'idea di base è quella di esprimere i parametri che definiscono un problema in termini di altri, più semplici, che non cambiano gli aspetti fondamentali a cui siamo interessati. Nell'ambito dei fenomeni critici, dove siamo interessati alla fisica a "grandi lunghezze", ciò può essere fatto attraverso una sorta di "coarse-graining" dei gradi di libertà locali.

2.1 Il Gruppo di Rinormalizzazione

In vicinanza di un punto critico le osservabili macroscopiche sono determinate dalle correlazioni a lungo raggio dei gradi di libertà locali; ciò suggerisce di eliminare i gradi di libertà irrilevanti attraverso un'operazione di sgranamento a scale di lunghezza sempre più grandi, mediando così sui dettagli microscopici. In pratica tale procedura viene realizzata attraverso una trasformazione del parametro d'ordine associata ad una dilatazione, vale a dire, mediante una "trasformazione di scala" che può essere interpretata come una trasformazione nello spazio delle Hamiltoniane. In quanto segue generalizzeremo l'analisi ad Hamiltoniane dipendenti da un parametro d'ordine scalare¹ $\phi(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Consideriamo dunque un'Hamiltoniana $H(\phi)$ a cui corrispondono le funzioni di correlazione connesse

$$W^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle_c = \frac{\int [d\phi] \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) e^{-\beta H(\phi)}}{\int [d\phi] e^{-\beta H(\phi)}} \quad (2.1)$$

e supponiamo che a seguito di una dilatazione globale con parametro λ sia possibile trovare una funzione $Z(\lambda)$ e un'Hamiltoniana $H_\lambda(\phi)$ con funzioni connesse W_λ tali

¹Nel passare al limite continuo, si effettuano le modifiche seguenti:

$$\sum_i \rightarrow \int dx \quad , \quad \sum_{s_i} \rightarrow \int [d\phi].$$

che ($Z(1) = 1$):

$$W_\lambda^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = Z(\lambda)^{-\frac{n}{2}} W^{(n)}(\lambda x_1, \dots, \lambda x_n); \quad (2.2)$$

il *mapping* $H(\phi) \rightarrow H_\lambda(\phi)$ definisce una trasformazione di scala. Supponiamo che esista il limite per grandi λ della (2.2), a cui corrisponde l'Hamiltoniana di punto fisso H_* con correlazioni connesse:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} W_\lambda^{(n)}(\lambda x_1, \dots, \lambda x_n) = Z(\lambda)^{\frac{n}{2}} W_*^{(n)}(x_1, \dots, x_n), \quad (2.3)$$

da cui, introducendo un ulteriore parametro μ , si ricavano le seguenti relazioni

$$W_*^{(n)}(\mu x_1, \dots, \mu x_n) = Z_*(\mu)^{\frac{n}{2}} W_*^{(n)}(x_1, \dots, x_n), \quad (2.4)$$

$$Z_*(\mu) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{Z(\lambda \mu)}{Z(\lambda)}, \quad (2.5)$$

$$Z_*(\lambda_1 \lambda_2) = Z_*(\lambda_1) Z_*(\lambda_2), \quad (2.6)$$

$$Z_*(\lambda) = \lambda^{-2d_\phi}, \quad (2.7)$$

dove la dimensione del parametro d'ordine d_ϕ è una proprietà del punto fisso. Il comportamento asintotico della Z unito alla (2.3) mostra che le funzioni di correlazione che corrispondono ad Hamiltoniane che fluiscono nello stesso punto fisso H_* hanno lo stesso comportamento a grandi distanze:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} W_\lambda^{(n)}(\lambda x_1, \dots, \lambda x_n) \sim \lambda^{-nd_\phi} W_*^{(n)}(x_1, \dots, x_n). \quad (2.8)$$

Questa proprietà di universalità si basa sull'esistenza di punti fissi stabili su cui converge il flusso \mathcal{RG} per grandi λ . Lo spazio delle Hamiltoniane si divide quindi in superfici critiche in cui il flusso porta ad un punto fisso d'attrazione a cui corrisponde una precisa classe di universalità.

La versione differenziale della trasformazione \mathcal{RG} è definita da una mappa \mathcal{R} nello spazio delle Hamiltoniane che si ottiene confrontando un cambiamento di scala λ con uno di parametro $\lambda + \delta\lambda$:

$$\lambda \frac{d}{d\lambda} H_\lambda = \mathcal{R}[H_\lambda], \quad (2.9)$$

$$\lambda \frac{d}{d\lambda} \ln Z(\lambda) = 2 - d - \eta[H_\lambda], \quad (2.10)$$

che per un punto fisso H_* diventano:

$$\mathcal{R}[H_*] = 0, \quad d_\phi = \frac{2 - d - \eta[H_*]}{2}. \quad (2.11)$$

L'andamento asintotico (2.8) per la funzione a due punti identifica l'esponente critico η con il valore al punto fisso della funzione $\eta[H]$ definita nello spazio delle Hamiltoniane in (2.10).

Le proprietà di stabilità del punto fisso si ottengono dalla linearizzazione delle equazioni del \mathcal{RG} (2.9). Un'Hamiltoniana quasi critica si trova per definizione vicino alla superficie critica e con una trasformazione di scala con parametro λ opportuno la si può portare in vicinanze del punto critico, dove

$$H_\lambda = H_* + \Delta H_\lambda, \quad \lambda \frac{d}{d\lambda} \Delta H_\lambda = \mathcal{L}_*(\Delta H_\lambda), \quad (2.12)$$

con \mathcal{L}_* operatore lineare indipendente da λ , la cui diagonalizzazione in auto-operatori \mathcal{O}_i , $\mathcal{L}_*[\mathcal{O}_i] = y_i \mathcal{O}_i$, porta a

$$\Delta H_\lambda = \sum_i \mu_i(\lambda) \mathcal{O}_i, \quad (2.13)$$

$$\lambda \frac{d}{d\lambda} \mu_i(\lambda) = y_i \mu_i(\lambda). \quad (2.14)$$

Se integriamo l'equazione precedente otteniamo:

$$H_\lambda = H_* + \sum_i \mu_i \lambda^{y_i} \mathcal{O}_i. \quad (2.15)$$

A questo punto, in funzione del valore che assumono gli autovalori y_i , possiamo classificare gli auto-operatori in tre famiglie:

- Se $\Re y_i > 0$, \mathcal{O}_i è detto *rilevante*: la reiterazione del processo di riscaldamento porta ad allontanarsi dal punto fisso.
- Se $\Re y_i < 0$, \mathcal{O}_i è detto *irrilevante*: in questo caso infatti, al crescere di λ ci si avvicina al punto critico annullando la componente di \mathcal{O}_i ; il loro numero individua la dimensione della superficie critica.
- Se $\Re y_i = 0$, \mathcal{O}_i è detto *marginale*: in questo caso la linearizzazione delle equazioni del \mathcal{RG} non ci dà informazioni sul comportamento della componente corrispondente all'operatore \mathcal{O}_i ; andando oltre l'approssimazione lineare si vede che tali operatori comportano generalmente un andamento logaritmico al punto critico.

I punti critici sono classificati in base alle loro proprietà di stabilità locali. Intorno ad un punto fisso esiste un ipersuperficie, di dimensione pari al numero di operatori irrilevanti, i cui punti sono attratti verso il punto fisso; sufficientemente vicino ad esso, tale superficie è proprio il sottospazio lineare generato dagli \mathcal{O}_i irrilevanti. Il numero dei restanti operatori (rilevanti) coincide di fatto col numero di parametri fisici da fissare per imporre ad una generica Hamiltoniana di stare sulla superficie critica.

2.1.1 Scaling dell'Energia Libera

Una delle proprietà delle trasformazioni del Gruppo di Rinormalizzazione è quella di preservare la funzione di partizione:

$$\int [d\phi] e^{-\beta H(\phi)} = \int [d\phi'] e^{-\beta H'(\phi')}. \quad (2.16)$$

Se consideriamo la parte singolare della densità di energia libera $f(\{\mu_i\})$ in funzione delle variabili di riscaldamento μ_i , otteniamo la seguente relazione di scala:

$$f_s(\{\mu_i\}) = \lambda^{-d} f_s(\{\lambda^{y_i} \mu_i\}), \quad (2.17)$$

che per un sistema di tipo Ising, che sarà l'unico effettivamente trattato, con due variabili rilevanti μ_t e μ_h , e reiterando il processo di riscaldamento n volte, diviene

$$f_s(\mu_t, \mu_h) = \lambda^{-nd} f_s(\lambda^{ny_t} \mu_t, \lambda^{ny_h} \mu_h). \quad (2.18)$$

Dal momento che sia μ_t sia μ_h crescono al crescere di n , non possiamo prendere n troppo grande, altrimenti l'approssimazione lineare alle equazioni del \mathcal{RG} verrebbe violata; così scegliamo di bloccare l'iterazione per $|\lambda^{ny_t} \mu_t| = 1$, e si ottiene

$$f_s(\mu_t, \mu_h) = |\mu_t|^{d/y_t} f_s(\pm 1, \mu_h |\mu_t|^{-y_h/y_t}). \quad (2.19)$$

Assumendo per motivi di simmetria $\mu_t = t/t_0 + O(t^2, h^2)$ e $\mu_h = h/h_0 + O(th)$, e sostituendo nella (2.19) arriviamo alla legge di omogeneità di Widom:

$$f_s(t, h) = |t/t_0|^{d/y_t} \Phi_{\pm} \left(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right), \quad (2.20)$$

in cui la funzione Φ_{\pm} è universale, essendo la dipendenza da un particolare sistema fisico riassorbita interamente nei fattori di scala t_0 e h_0 . Dalla (2.20) si ricavano gli esponenti critici:

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t}, \quad \beta = \frac{d - y_h}{y_t}, \quad \gamma = \frac{2y_h - d}{y_t}, \quad \delta = \frac{y_h}{d - y_h}, \quad (2.21)$$

in termini dei due autovalori degli autovettori del \mathcal{RG} . Dagli esponenti di sopra si ottengono anche le seguenti relazioni di scala:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad \alpha + \beta(1 + \delta) = 2. \quad (2.22)$$

Benchè le relazioni tra gli esponenti critici e gli autovalori del gruppo di rinormalizzazione sono state stabilite per la classe di universalità di Ising, equazioni simili valgono per qualsiasi classe di universalità che abbia un singolo autovalore rilevante termico ed un autovalore rilevante associato ad un campo che rompa la simmetria per inversione spaziale. Chiaramente, per casi più complicati esistono relazioni di scala differenti che possono essere ricavate con lo stesso principio degli autovalori del

\mathcal{RG} .

La presenza di una variabile di scala irrilevante μ_3 con autovalore $y_3 < 0$ comporta delle correzioni alla forma di riscaldamento vista in precedenza; per un'analisi che tenga conto di ciò si rimanda alle sezioni successive.

Consideriamo invece l'effetto di una perturbazione $\mathcal{O}_i(r)$ dipendente dalla posizione in (2.12) per cui si abbia

$$\mathcal{L}_*[\mathcal{O}_i(r)] = -x_i \mathcal{O}_i(r), \quad (2.23)$$

dove x_i definisce la dimensione di scala dell'operatore. L'integrazione di tale equazione per trasformazioni finite del parametro λ si scrive

$$e^{\lambda \mathcal{L}_*} \mathcal{O}_i(r) = e^{-\lambda x_i} \mathcal{O}_i(r e^{-\lambda}), \quad (2.24)$$

o in termini della trasformata di Fourier, $\mathcal{O}(q) \equiv \int d^d r e^{iqr} \mathcal{O}(r)$

$$e^{\lambda \mathcal{L}_*} \mathcal{O}_i(q) = e^{\lambda(d-x_i)} \mathcal{O}_i(q e^\lambda). \quad (2.25)$$

Per uniformarci alla notazione precedente possiamo arbitrariamente porre $\lambda = \ln \lambda$. Partendo da una hamiltoniana

$$H_0 = H_* + \sum_i \mu_i \mathcal{O}_i(q) \quad (2.26)$$

dopo un numero finito di passi si arriva a

$$H_\lambda = H_* + \sum_i \mu_i \lambda^{x_i-d} \mathcal{O}_i(\lambda q) \quad (2.27)$$

che implica per le funzioni di correlazione di operatori mediate su H_0

$$G_{ij}(q; \mu_n) = \langle \mathcal{O}_i(q) \mathcal{O}_j(-q) \rangle_0 - \langle \mathcal{O}_i(q) \rangle_0 \langle \mathcal{O}_j(-q) \rangle_0 = -\frac{\partial^2 f(\{\mu_n\})}{\partial \mu_i \partial \mu_j}, \quad (2.28)$$

la seguente relazione di scala:

$$G_{ij}(q; \mu_n) = \lambda^{y_i+y_j-d} G_{ij}(\lambda q; \mu_n \lambda^{y_n}), \quad (2.29)$$

con $y_n = x_n - d$. Solo per gli operatori di scala definiti dalla (2.24) le funzioni di correlazione hanno un comportamento critico che decresce come una potenza al punto critico:

$$\langle \mathcal{O}_i(r_1) \mathcal{O}_i(r_2) \rangle \sim |r_1 - r_2|^{-2x_i}. \quad (2.30)$$

Per un operatore generico, trascurando le correzioni allo scaling, vale l'espansione in termini di operatori rilevanti \mathcal{O}_i

$$\langle \mathcal{O}(r_1) \mathcal{O}(r_2) \rangle \sim \sum_{ij} \frac{A_{ij}}{|r_1 - r_2|^{x_i+x_j}}. \quad (2.31)$$

In particolare la funzione di correlazione del parametro d'ordine diventa:

$$G(q; \mu_t) = \lambda^{2y_h-d} G(\lambda q; \mu_t \lambda^{y_t}), \quad (2.32)$$

da cui si ricavano gli esponenti critici η e ν

- al punto critico $\mu_t = 0$, posto $\lambda|q| = 1$ si ottiene

$$G(q, 0) = |q|^{d-2y_h}, \quad \eta = 2 + d - 2y_h; \quad (2.33)$$

- vicino al punto critico $\mu_t \neq 0$, ponendo $|\mu_t|\lambda^{y_t} = 1$ si ottiene

$$G(q, \mu_t) = |\mu_t|^{-\gamma} G(q|\mu_t|^{-1/y_t}, \pm 1) = |\mu_t|^{-\gamma} g_0^\pm(q\xi), \quad (2.34)$$

dove $\xi = A_\pm^\xi |\mu_t|^{-\nu}$ e $\nu = 1/y_t$. In particolare, per $q = 0$ otteniamo lo scaling della suscettività $\chi = A_\pm^\chi |\mu_t|^{-\gamma}$.

Eliminando la dipendenza dagli autovalori rilevanti indipendenti y_t e y_h , seguono le ulteriori relazioni di scala

$$\alpha = 2 - d\nu, \quad \gamma = \nu(2 - \eta). \quad (2.35)$$

Queste equazioni legano esponenti critici termodinamici con quelli della funzione di correlazione del parametro d'ordine e possono non essere verificate se l'hamiltoniana non è a corto raggio o se sono presenti operatori irrilevanti che non modificano le funzioni di correlazione ma per cui non esiste l'espansione di Taylor dell'energia libera (2.47) o il limite $\mu \rightarrow 0$ non è ben definito.

2.2 *Finite Size Scaling*

La teoria dello scaling ed il \mathcal{RG} si rivelano estremamente utili anche quando si considerano sistemi di dimensione finita. Le singolarità termodinamiche, che compaiono nella descrizione dei sistemi statistici in vicinanza di una transizione di fase del secondo ordine, si presentano esclusivamente nel limite termodinamico in cui il campione in esame è descritto da un numero infinito di gradi di libertà. D'altra parte, per estrarre gli esponenti critici e le altre grandezze universali da simulazioni numeriche, che sono evidentemente effettuate su sistemi finiti, è necessario conoscere in che modo estrapolare i risultati a dimensione infinita.

Supponiamo che le dimensioni tipiche di un sistema fisico in ciascuna delle direzioni spaziali sia data da L (così per esempio la periodicità spaziale in una simulazione su un reticolo ipercubico con condizioni periodiche al contorno), e sia ξ la lunghezza di correlazione del corrispondente sistema infinito. Consideriamo esclusivamente interazioni a corto range, in maniera tale da garantire, in vicinanza del punto critico, la comparsa di un comportamento riscalante universale quando ξ diviene molto più grande in confronto a qualsiasi scala di lunghezze microscopica. Adesso, l'estensione del sistema rappresenta chiaramente un'ulteriore scala rilevante: per $\xi \ll L$, ci aspettiamo di osservare lo stesso comportamento singolare del sistema infinito. Se il sistema è finito in d_L direzione, ma infinito nelle altre, il limite $\xi \gg L$ avrà l'effetto di ridurre le dimensioni effettive del sistema a $d - d_L$. Per un sistema effettivamente finito la comparsa di singolarità verrà "smussata" avvicinandosi al punto critico.

Tutte queste osservazioni possono essere raggruppate in una proposta di riscaldamento generalizzata per le variabili termodinamiche. Per esempio, consideriamo un sistema limitato in tutte le direzioni. In vicinanza del punto critico la suscettività dovrebbe avere la forma

$$\chi(t, L) = |t|^{-\gamma} \chi_{\pm}(\xi/L), \quad (2.36)$$

dove la funzione riscalante con incorporati gli effetti di *finite size* mostra il comportamento asintotico $\chi_{\pm}(y) \rightarrow A_{\pm}^{\chi}$ per $y \rightarrow 0$ ($L \rightarrow \infty$). D'altra parte, per $\xi \propto |t|^{-\nu} \gg L$ ci aspettiamo che $\chi_{\pm}(y) \propto y^{-\gamma/\nu}$, in maniera tale da cancellare la singolarità per $t \rightarrow 0$. In questo modo si arriva alla forma

$$\chi(t, L) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}_{\pm} \left(|t|(L/\xi_{\pm})^{1/\nu} \right), \quad (2.37)$$

dove la funzione $\tilde{\chi}_{\pm}$ dipende dalla geometria del sistema e dalla scelte delle condizioni al contorno, ma è comunque regolare per qualsiasi valore finito di L . In quanto funzione della temperatura t , $\tilde{\chi}_{\pm}$ dovrebbe mostrare un picco pronunciato che però non sarà più necessariamente in corrispondenza del punto critico per il sistema infinito $t = 0$. Diversamente, la posizione della singolarità "smussata" si sarà spostata di una quantità che dovrebbe riscalare come $L^{1/\nu}$; inoltre, dalla (2.37) si deduce che l'ampiezza cresce come $L^{\gamma/\nu}$ al crescere delle dimensioni del sistema.

È possibile derivare il *finite size scaling Ansatz* introducendo nelle trasformazioni del \mathcal{RG} il parametro L . In particolare, esso trasforma sotto un cambiamento di scala di parametro λ come

$$L' = L/\lambda. \quad (2.38)$$

Come abbiamo visto, poiché la funzione di partizione è invariante sotto il \mathcal{RG} , anche l'energia libera lo è. In particolare, anche dopo aver introdotto le dimensioni lineari del sistema, si ha per la parte singolare di f :

$$f_s(\mu_t, \mu_h, L) = \lambda^{-d} f_s(\lambda^{y_t} \mu_t, \lambda^{y_h} \mu_h, \lambda^{-1} L). \quad (2.39)$$

Avendo a che fare con un reticolo di dimensioni finite L^d , la magnetizzazione è data da

$$m = \frac{1}{L^d} \sum_x \phi_x, \quad (2.40)$$

dove ϕ_x è un campo generico definito sul reticolo; la (2.40) ed i momenti associati riscalano nella maniera seguente:

$$\langle m^k \rangle(\mu_t, \mu_h, L) = \lambda^{-kd_{\phi}} \langle m^k \rangle(\lambda^{y_t} \mu_t, \lambda^{y_h} \mu_h, \lambda^{-1} L). \quad (2.41)$$

Infine, la lunghezza di correlazione (ed anche quella definita attraverso il secondo momento (4.12)) trasforma semplicemente come

$$\xi' = \xi/L. \quad (2.42)$$

Ne consegue che il rapporto ξ/L è un invariante sotto il \mathcal{RG} .

In generale quindi abbiamo a che fare con grandezze \mathcal{O} che riscalano come

$$\mathcal{O}(\mu_t, \mu_h, L) = \lambda^{-x_{\mathcal{O}}} \mathcal{O}(\lambda^{y_t} \mu_t, \lambda^{y_h} \mu_h, \lambda^{-1} L). \quad (2.43)$$

Adesso, se reiteriamo le trasformazioni del \mathcal{RG} finché non viene raggiunto un certo valore $L' \gg 1$ tale che $L' = \lambda^{-n}L$, otteniamo

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\mu_t, \mu_h, L) &= \lambda^{-nx} \mathcal{O}(\lambda^{ny_t} \mu_t, \lambda^{ny_h} \mu_h, \lambda^{-n}L) \\ &= \left(\frac{L}{L'}\right)^{x_{\mathcal{O}}} \mathcal{O}\left(\mu_t \left(\frac{L}{L'}\right)^{ny_t}, \mu_h \left(\frac{L}{L'}\right)^{ny_h}, L'\right). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Ancora una volta, usando lo sviluppo analitico dei campi di riscaldamento μ_t e μ_h otteniamo finalmente la forma di riscaldamento in presenza di dimensioni finite:

$$\mathcal{O}(t, h, L) = L^{x_{\mathcal{O}}} \Phi_{\mathcal{O}}\left(\frac{t}{t_0} L^{y_t}, \frac{h}{h_0} L^{y_h}\right), \quad (2.45)$$

dove $\Phi_{\mathcal{O}}$ è una funzione universale.

2.3 Correzioni allo Scaling ed Hamiltoniana Improved

Nella sezione precedente abbiamo visto come cambia il riscaldamento al punto critico di alcune grandezze termodinamiche se introduciamo un parametro L che misura le dimensioni lineari finite del campione. Evidentemente, se vogliamo analizzare correttamente i dati di una simulazione Monte Carlo (soprattutto nel caso in cui siamo molto distanti dal limite termodinamico) non possiamo trascurare la dimensione finite del sistema.

Esistono poi correzioni allo scaling (presenti anche nel limite termodinamico) legate semplicemente all'esistenza di operatori irrilevanti; anche tali *scaling corrections* vanno tenute sotto controllo se si vuole avere una stima degli errori che si commettono nella determinazione delle grandezza universali. È però possibile agire in maniera più profonda ed eliminare a priori, dal modello che si sta analizzando, le correzioni principali allo scaling introdotte dagli operatori irrilevanti. Il \mathcal{RG} ci offre infatti (almeno in principio) un metodo per raggiungere tale obiettivo. L'hamiltoniana di punto fisso del \mathcal{RG} è libera da qualsiasi correzione allo scaling; ma in generale, tale Hamiltoniana conterrà un numero infinito di costanti di accoppiamento. Nella pratica è necessario troncare l'“Hamiltoniana perfetta” ad un numero finito di termini, ed è proprio tale approssimazione che introduce le suddette correzioni. Per annullare (o quantomeno ridurre drasticamente) l'ampiezza di tali correzioni si procede nel modo seguente:

1. Si aggiungono nuovi termini all'hamiltoniana e quindi nuove costanti di accoppiamento su cui è possibile agire; tali termini sono scelti in maniera tale da non modificare la classe di universalità del sistema in esame.²
2. Imponendo certe condizioni su alcune grandezze osservabili, si regolano i parametri dell'Hamiltoniana fino a ridurre il più possibile le correzioni allo scaling.

²Questa è una proprietà fondamentale poiché ci garantisce la possibilità di muoverci nello spazio dei parametri senza mai modificare i valori delle grandezze “universali”.

In questa maniera si determina l'Hamiltoniana "improved" che poi successivamente può essere usata come modello di partenza per il calcolo delle quantità termodinamiche di interesse.

Per chiarire l'idea che sta alla base di tale "improving", consideriamo un modello con due operatori rilevanti (uno termico ed uno magnetico) ed un operatore irrilevante. Se μ_t , μ_h e μ_λ sono i campi scalari non lineari associati a tali operatori, la parte singolare dell'energia libera F_s si comporta nella maniera seguente

$$F_s(\mu_t, \mu_h, \mu_\lambda) = |\mu_t|^{d\nu} f_s \left(\pm 1, \mu_h |\mu_t|^{-(d+2-\eta)\nu/2}, \mu_\lambda |\mu_t|^\Delta \right), \quad (2.46)$$

dove il ± 1 individua due differenti funzioni f_s a seconda della fase in cui ci si trova ($T > T_c$ o $T < T_c$). Poiché l'operatore associato a μ_λ è irrilevante, $\Delta > 0$ e $\mu_\lambda |\mu_t|^\Delta \rightarrow 0$ al punto critico. Dunque, possiamo espandere l'energia libera e otteniamo

$$F_s(\mu_t, \mu_h, \mu_\lambda) = |\mu_t|^{d\nu} \sum_{n=0}^{\infty} f_{n,\pm} \left(\mu_h |\mu_t|^{-(d+2-\eta)\nu/2} \right) \mu_\lambda^n |\mu_t|^{n\Delta}. \quad (2.47)$$

La presenza di un operatore irrilevante introduce delle correzioni non analitiche proporzionali a $|\mu_t|^{n\Delta}$. Supponiamo adesso che l'Hamiltoniana del nostro modello dipenda da tre parametri t , h e λ , associati, i primi due rispettivamente alla temperatura e al campo magnetico, e il terzo essendo un parametro irrilevante. Per ciascun valore di λ e per $h = 0$ la teoria possiede un punto critico individuato dalla traiettoria $t = t_c(\lambda)$. I campi scalari non lineari μ_t , μ_h e μ_λ sono funzioni analitiche dei parametri che compaiono in $H(t, h, \lambda)$ e dunque possono essere sviluppati in un intorno del punto in potenze di $\tau = t - t_c(\lambda)$

$$\mu_t = \tau + g_{1\mu_t}(\lambda)\tau^2 + g_{2\mu_t}(\lambda)h^2 + O(\tau^3, \tau h^2, h^4), \quad (2.48)$$

$$\mu_h = h \left[1 + g_{1\mu_h}(\lambda)\tau + g_{2\mu_h}(\lambda)h^2 + O(\tau^3, \tau h^2, h^4) \right], \quad (2.49)$$

$$\mu_\lambda = g_{1\mu_\lambda}(\lambda) + g_{2\mu_\lambda}(\lambda)\tau + g_{3\mu_\lambda}(\lambda)h^2 + O(\tau^3, \tau h^2, h^4). \quad (2.50)$$

Se adesso ci mettiamo nella condizione di campo magnetico identicamente nullo, e sostituiamo gli sviluppi dei campi nella (2.47), nell'ipotesi in cui $g_{1\mu_\lambda}(\lambda) \neq 0$, l'energia libera presenta delle correzioni dell'ordine $\tau^{n\Delta}$; infatti, se ci teniamo il primo ordine in τ nello sviluppo dei campi si ha

$$F_s(\mu_t, \mu_h, \mu_\lambda) \approx |\tau + \dots|^{d\nu} \sum_{n=0}^{\infty} f_{n,\pm}(0) (g_{1\mu_\lambda}(\lambda) + g_{2\mu_\lambda}(\lambda)\tau + \dots)^n |\tau + \dots|^{n\Delta}. \quad (2.51)$$

A partire dalla energia libera (tenendoci anche le correzioni dovute alla presenza di un campo magnetico non nullo) è possibile calcolare tutte le altre grandezze termodinamiche e le rispettive forme di riscaldamento. Per esempio, la suscettività a campo magnetico nullo si può espandere nel modo seguente

$$\chi = \tau^{-\gamma} \sum_{m,n=0}^{\infty} \chi_{1,mn}(\lambda) \tau^{m\Delta+n} + \tau^{1-\alpha} \sum_{m,n=0}^{\infty} \chi_{2,mn}(\lambda) \tau^{m\Delta+n} + \sum_{n=0}^{\infty} \chi_{3,n}(\lambda) \tau^n, \quad (2.52)$$

dove il contributo proporzionale a $\tau^{1-\alpha}$ deriva dai termini dell'ordine h^2 che appaiono nell'espansione di μ_τ e μ_λ e l'ultimo termine viene dalla parte regolare dell'energia libera. Nella maggior parte dei casi possiamo cancellare le correzioni dominanti dovute all'operatore irrilevante scegliendo opportunamente $\lambda = \lambda^*$ in maniera tale che $g_{1\mu_\lambda}(\lambda^*) = 0$. Così facendo $\mu_\lambda \mu_t^\Delta \sim \tau^{1+\Delta}$ e i termini proporzionali a $\tau^{m\Delta+n}$ con $n < m$ non appariranno nell'espansione.

Scaling corrections e finite size Ansätze Nell'ambito dell'analisi sul *finite size scaling*, è possibile considerare le modifiche introdotte dalla presenza di un operatore irrilevante. In particolare, se consideriamo la (2.43), essa diviene

$$\mathcal{O}(\mu_t, \mu_h, \mu_\omega, L) = \lambda^{-x_\mathcal{O}} \mathcal{O}(\lambda^{y_t} \mu_t, \lambda^{y_h} \mu_h, \lambda^{-\omega} \mu_\omega, \lambda^{-1} L), \quad (2.53)$$

con $\omega > 0$. Se reiteriamo il processo di riscaldamento, possiamo seguire quanto fatto in precedenza e otteniamo (nell'ipotesi di campo magnetico nullo)

$$\mathcal{O}(t, h, \mu_\omega, L) = L^{x_\mathcal{O}} \Phi_\mathcal{O} \left(\frac{t}{t_0} L^{y_t}, \mu_\omega L^{-\omega} \right). \quad (2.54)$$

2.3.1 La determinazione dei parametri improved

Esistono diversi metodi che possono essere usati per determinare l'Hamiltoniana improved. Un primo metodo è molto simile alla tecnica impiegata per la determinazione di β_c . L'idea è la seguente: si consideri un osservabile \mathcal{O} invariante sotto il gruppo di rinormalizzazione su un reticolo di dimensioni finite L , e sia \mathcal{O}^* il suo valore al punto critico, cioè

$$\mathcal{O}^* = \lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{\beta \rightarrow \beta_c(\lambda)} \mathcal{O}(\beta, \lambda, L). \quad (2.55)$$

La quantità \mathcal{O}^* è una costante universale indipendente quindi dal parametro λ . La teoria dello scaling predice

$$\mathcal{O}(\beta_c(\lambda), \lambda, L) \approx \mathcal{O}^* + a_1(\lambda) L^{-\omega} + a_2(\lambda) L^{-2\omega} + \dots + b_1(\lambda) L^{-\omega_2} \dots, \quad (2.56)$$

dove $\omega = \Delta/\nu$, $\omega_2 = \Delta_2/\nu$, Δ_2 rappresentando l'esponente associato alla correzione successiva allo scaling. Poiché per $\lambda = \lambda^*$, $a_1(\lambda^*) = a_2(\lambda^*) = \dots = 0$, possiamo espandere l'equazione precedente in un intorno del valore improved del parametro, ottenendo

$$\mathcal{O}(\beta_c(\lambda), \lambda, L) \approx \mathcal{O}^* + (\lambda - \lambda^*) (a_{11} L^{-\omega} + a_{12} L^{-2\omega} + \dots) + b_1(\lambda^*) L^{-\omega_2} \dots. \quad (2.57)$$

Se adesso supponiamo noto il valore di \mathcal{O}^* , possiamo definire un valore effettivo $\lambda^{eff}(L)$ come soluzione dell'equazione

$$\mathcal{O}(\beta_c(\lambda^{eff}(L)), \lambda^{eff}(L), L) = \mathcal{O}^*. \quad (2.58)$$

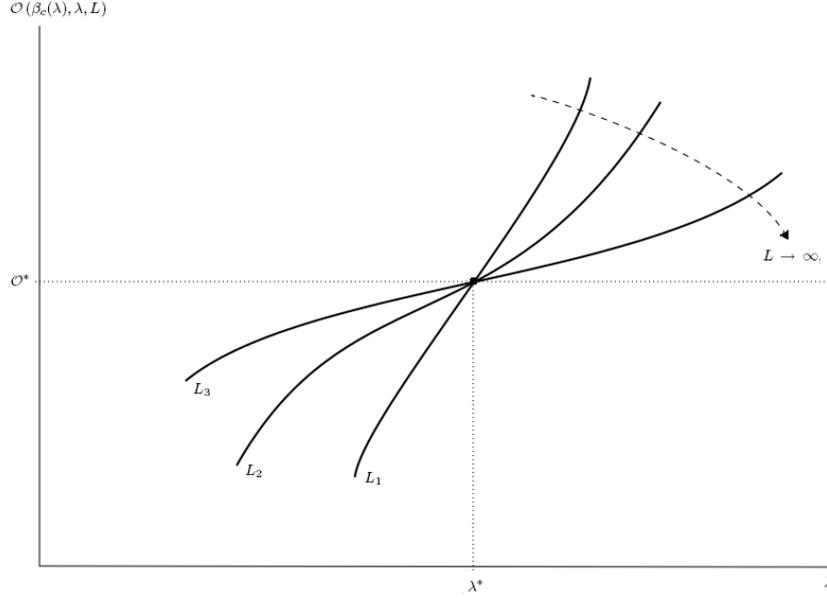


Figura 2.1: Andamento di un osservabile in un intorno di λ^* per differenti valori di L . Le curve si intendono tutte calcolate in $\beta_c(\lambda)$.

Dalla (2.57) si ottiene immediatamente

$$\lambda^{eff}(L) = \lambda^* - \frac{b_1(\lambda^*)}{a_{11}} L^{\omega-\omega_2} + \dots \quad (2.59)$$

Poiché $\omega_2 > \omega$, per $L \rightarrow \infty$, $\lambda^{eff}(L)$ converge a λ^* con correzioni dell'ordine di $L^{\omega-\omega_2}$. Per poter applicare tale metodo è necessario conoscere con precisione \mathcal{O}^* e $\beta_c(\lambda)$. È possibile aggirare il problema considerando due quantità differenti \mathcal{O}_1 e \mathcal{O}_2 che possiedono entrambe un limite universale per $L \rightarrow \infty$. In questo caso si definisce una “temperatura di riferimento” $\beta_f(\lambda, L)$ imponendo la condizione

$$\mathcal{O}_1(\beta_f, \lambda, L) = \bar{\mathcal{O}}_1, \quad (2.60)$$

dove $\bar{\mathcal{O}}_1$ viene scelto tra i valori che assume l'osservabile in questione. Una stima di λ^* si ottiene a questo punto risolvendo l'equazione

$$\mathcal{O}_2(\beta_f(\lambda, L), \lambda, L) = \mathcal{O}_2(\beta_f(\lambda, bL), \lambda, bL), \quad (2.61)$$

per qualche valore di b .

In Figura 2.1 mostriamo l'andamento qualitativo di un osservabile in un intorno del parametro improved per differenti valori di L ; risulta dalla (2.57) che, restando sempre sulla curva $\beta_c(\lambda)$, per differenti valori di L le curve attraversano il valore corrispondente al limite termodinamico dell'osservabile in questione in corrispondenza proprio di λ^* .

Capitolo 3

Processi Stocastici e Dinamica Critica

In questo capitolo sviluppiamo gli strumenti di base per lo studio della dinamica dei fenomeni critici. Vedremo che sotto le più generali condizioni di non-equilibrio, è possibile far uso della teoria dei processi stocastici. Introduciamo inoltre le funzioni di risposta e correlazione dinamica, analizzandone le loro caratteristiche generali facendo anche uso della teoria di campo. Infine, presentiamo le forme di riscaldamento dinamico delle osservabili alla criticità.

3.1 Processi Stocastici

In situazioni lontane dall'equilibrio termico la distribuzione di probabilità dei microstati accessibili ad un sistema fisico sarà in generale una funzione non banale del tempo t . Date delle condizioni al contorno indipendenti dal tempo e fissata la corrente di particelle o energia che determina la dinamica del sistema, ci si aspetta che lo stesso, dopo che sufficiente tempo sia passato dalla sua preparazione, raggiunga una *stato stazionario*. Identificare e caratterizzare le distribuzioni e le correnti di probabilità di tali stati stazionari, e allo stesso tempo dare una descrizione quantitativa dei fenomeni di rilassamento verso tali stati sono i principali obiettivi della meccanica statistica fuori dall'equilibrio.

Per fare ciò, in linea di principio, si potrebbe ricorrere ad una descrizione completamente microscopica del sistema in esame e risolvere (ci stiamo limitando al caso classico) l'equazione di Liouville per la densità nello spazio delle fasi,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = - \{H, \rho\}. \quad (3.1)$$

Di fatto, un tale approccio è difficilmente attuabile nella pratica; diversamente, possiamo usare le conoscenze sulle possibili transizioni tra i vari microstati ed applicare la teoria matematica dei processi stocastici. Sempre attraverso un'operazione di *coarse graining*, possiamo sperare di arrivare ad equazioni del moto che descrivono l'evoluzione temporale di appropriate variabili macroscopiche.

3.1.1 Distribuzioni di probabilità dipendenti dal tempo

Consideriamo una variabile random x che dipende da un parametro reale t che chiameremo “tempo”; la sequenza ordinata $\{x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)\}$ con $t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n$ prende il nome di *processo stocastico* (Fig.3.1).

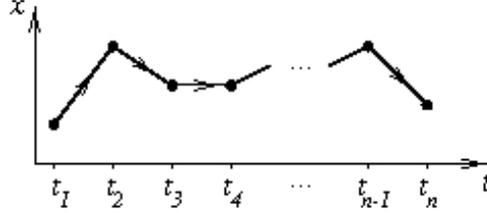


Figura 3.1: Un processo stocastico come una sequenza temporale di variabili random $\{x(t_i)\}$.

Se definiamo adesso la distribuzione di probabilità ad n -punti P_n , allora la probabilità che la variabile random x assuma un valore nell'intervallo $[x_1, x_1 + dx_1]$ al tempo t_1 , un valore nell'intervallo $[x_2, x_2 + dx_2]$ al tempo t_2 , e così via è data da:

$$P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n. \quad (3.2)$$

Trattandosi di una densità di probabilità, abbiamo che $P_n(\dots) \geq 0$; inoltre l'ordine degli argomenti è irrilevante:

$$P_n(\dots; x_i, t_i; \dots; x_j, t_j; \dots) = P_n(\dots; x_j, t_j; \dots; x_i, t_i; \dots). \quad (3.3)$$

In aggiunta, richiedere che $\int dx_1 P_1(x_1, t_1) = 1$, unito alla regola gerarchica

$$\int dx_n P_n(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}; x_n, t_n) = P_{n-1}(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}), \quad (3.4)$$

assicura la corretta normalizzazione

$$\int dx_1 \dots dx_n P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = 1. \quad (3.5)$$

Le medie dipendenti dal tempo dei momenti e delle correlazioni sono definite attraverso la

$$\langle x(t_1) \dots x(t_n) \rangle = \int dx_1 \dots dx_n x_1 \dots x_n P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n). \quad (3.6)$$

Un processo stocastico si dice *stazionario* se la funzione di probabilità a n -punti è invariante per traslazione temporale:

$$P_n(x_1, t_1 + \tau; \dots; x_n, t_n + \tau) = P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n). \quad (3.7)$$

In questo caso sia $P_1(x)$ e, per conseguenza, le medie di funzioni ad una sola variabile $\langle O(x) \rangle$, non dipendono dal tempo; mentre $\langle x_1(t_1), x_2(t_2) \dots x_n(t_n) \rangle = \langle x_1(0), x_2(t_2 - t_1) \dots x_n(t_n - t_1) \rangle$, dipende dalla differenza di tempi $t_2 - t_1, \dots, t_n - t_1$.

Per codificare la causalità in una sequenza di variabili random si introduce il concetto di *probabilità condizionata*. Sia

$$P_{m|k}(x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_{k+m}, t_{k+m} | x_1, t_1; \dots; x_k, t_k) dx_{k+1} \dots dx_{k+m} \quad (3.8)$$

la probabilità di trovare x nei rispettivi intervalli $[x_{k+1}, x_{k+1} + dx_{k+1}], \dots, [x_{k+m}, x_{k+m} + dx_{k+m}]$ nei vari istanti di tempo t_{k+1}, \dots, t_{k+m} , con la condizione che la stessa variabile negli istanti temporali t_1, \dots, t_k ha assunto valori negli intervalli $[x_1, x_1 + dx_1], \dots, [x_k, x_k + dx_k]$. In termini della distribuzione ad n -punti, la probabilità condizionata si scrive:

$$\begin{aligned} P_{m|k}(x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_{k+m}, t_{k+m} | x_1, t_1; \dots; x_k, t_k) &= \\ &= \frac{P_{k+m}(x_1, t_1; \dots; x_{k+m}, t_{k+m})}{P_k(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k)}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

che a seguito della (3.5) risulta correttamente normalizzata.

Se la sequenza dei primi k eventi $\{x_1(t_1), \dots, x_k(t_k)\}$ non influenza gli eventi successivi $\{x_{k+1}(t_{k+1}), \dots, x_{k+m}(t_{k+m})\}$, e cioè

$$\begin{aligned} P_{m|k}(x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_{k+m}, t_{k+m} | x_1, t_1; \dots; x_k, t_k) &= \\ &= P_m(x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_{k+m}, t_{k+m}), \end{aligned} \quad (3.10)$$

si dice che le due sequenze sono *statisticamente indipendenti* e come conseguenza

$$\begin{aligned} &P_{k+m}(x_1, t_1; \dots; x_{k+m}, t_{k+m}) = \\ &= P_k(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k) P_m(x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_{k+m}, t_{k+m}). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Quindi, i due set di variabili random $\{x_1, \dots, x_k\}$ e $\{x_{k+1}, \dots, x_{k+m}\}$ sono *scorrelati*; affinché un processo stocastico sia *completamente scorrelato*, senza alcuna memoria della storia passata, la funzione di distribuzione ad n -punti deve fattorizzare completamente:

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = \prod_{j=1}^n P_1(x_j, t_j). \quad (3.12)$$

3.1.2 Catene di Markov

Le *catene di Markov* sono un ulteriore caso speciale di processo stocastico: in questo caso, il valore della variabile random x al tempo t_n dipende esclusivamente dal valore assunto nell'istante temporale precedente t_{n-1} ; in altre parole, esiste una memoria a breve termine: l'influenza che ha la variabile random nel determinare il futuro della catena si estingue già nell'immediato passato. Il carattere markoviano di un processo stocastico si traduce matematicamente in

$$P_{1|n-1}(x_n, t_n | x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}) = P_{1|1}(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}). \quad (3.13)$$

Evidentemente un processo di Markov è completamente determinato dalla configurazione iniziale $P_1(x_1, t_1)$ e dalla sequenza di *probabilità di transizione* intermedie $P_{1|1}(x_{n+1}, t_{n+1}|x_n, t_n)$. Difatti, usando la (3.9) e la proprietà di cui sopra, si prova immediatamente

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = P_{1|1}(x_n, t_n|x_{n-1}, t_{n-1})P_{1|1}(x_{n-1}, t_{n-1}|x_{n-2}, t_{n-2}) \cdots \cdots P_{1|1}(x_2, t_2|x_1, t_1)P_1(x_1, t_1). \quad (3.14)$$

Per esempio, per $t \leq \tilde{t} \leq t'$ possiamo scrivere

$$\begin{aligned} P_2(x, t; x', t') &= \int d\tilde{x} P_3(x, t; \tilde{x}, \tilde{t}; x', t') = \\ &= \int d\tilde{x} P_{1|1}(x', t'|\tilde{x}, \tilde{t})P_{1|1}(\tilde{x}, \tilde{t}|x, t)P_1(x, t), \end{aligned} \quad (3.15)$$

che divisa per $P_1(x, t)$ porta all'equazione di *Chapman-Kolmogorov*

$$P_{1|1}(x', t'|x, t) = \int d\tilde{x} P_{1|1}(x', t'|\tilde{x}, \tilde{t})P_{1|1}(\tilde{x}, \tilde{t}|x, t). \quad (3.16)$$

Tale equazione sta a significare che la transizione dallo stato x allo stato x' può essere spezzata in passi intermedi: prima $x \rightarrow \tilde{x}$ quindi $\tilde{x} \rightarrow x'$, con la seconda transizione che è indipendente dallo stato iniziale della prima transizione. La probabilità associata si ottiene moltiplicando le due probabilità di transizione separate e integrando su tutti i possibili stati intermedi.

Un processo stocastico *Gaussiano* è completamente caratterizzato dal momento secondo, eq. (3.6) per $n = 2$, poiché tutte le correlazioni di ordine superiore si fattorizzano. Si può mostrare che la proprietà di fattorizzazione degli incrementi

$$\langle [x(t + \tau) - x(t)][x(t' + \tau) - x(t')] \rangle = \langle x(t + \tau) - x(t) \rangle \langle x(t' + \tau) - x(t') \rangle \quad (3.17)$$

(per $t \neq t'$) è equivalente al carattere markoviano di un processo.

3.1.3 Master Equation

Il passo successivo nell'analisi dei processi stocastici (markoviani e non) è costruire una "equazione del moto" per la distribuzione di probabilità $P_1(x, t)$. Se usiamo l'identità

$$P_1(x, t') = \int dx' P_{1|1}(x, t'|x', t)P_1(x', t), \quad (3.18)$$

posto $t' = t + \tau$, possiamo prendere il limite continuo:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_1(x, t) = \int dx' P_1(x', t) \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{P_{1|1}(x, t + \tau|x', t) - P_{1|1}(x, t|x', t)}{\tau}. \quad (3.19)$$

Evidentemente, per $\tau = 0$, $P_{1|1}(x, t|x', t) = \delta(x - x')$ che è già soluzione della (3.18) per $t = t'$. Al primo ordine in τ possiamo cercare una soluzione nella forma

$$P_{1|1}(x, t + \tau|x', t) = A(\tau)\delta(x - x') + \tau W(x' \rightarrow x, t); \quad (3.20)$$

dove $W(x' \rightarrow x, t)$ rappresenta il *rate di transizione* della variabile random dal valore x' al valore x (che quindi possono essere interpretati come stati o configurazioni di un sistema fisico) nell'intervallo temporale $[t, t+dt]$. Dalla condizione di normalizzazione della $P_{1|1}$ si ha $A(\tau) = 1 - \tau \int dx W(x' \rightarrow x, t) + \mathcal{O}(\tau^2)$; e sostituendo il tutto nella (3.19) si ottiene la *Master equation*:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_1(x, t) = \int dx' [P_1(x', t)W(x' \rightarrow x, t) - P_1(x, t)W(x \rightarrow x', t)], \quad (3.21)$$

Questa equazione fondamentale è di facile interpretazione: la probabilità che un sistema fisico occupi lo stato x al tempo t *cresce* per merito della probabilità che ha il sistema stesso di transitare da un qualsiasi stato x' verso lo stato x in questione; *decrece* a causa della probabilità che il sistema lasci lo stato x per uno qualsiasi degli altri stati accessibili x' .

Nel caso speciale in cui il rate di transizione sia indipendente dal tempo $\partial W/\partial t = 0$, si può mostrare che esiste almeno una *soluzione stazionaria* $P_{st}(x)$ con $\partial P_{st}/\partial t = 0$ (a condizione che x sia confinata in un intervallo finito). Inoltre, se $P_{st}(x)$ è unica, risulta anche stabile e

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_1(x, t) = P_{st}(x). \quad (3.22)$$

Una condizione *sufficiente* per l'esistenza di una tale soluzione stazionaria stabile è che valga il principio del *bilancio dettagliato*:

$$P_{st}(x')W(x' \rightarrow x) = P_{st}(x)W(x \rightarrow x'). \quad (3.23)$$

L'approccio verso la soluzione stazionaria $P_{st}(x)$ rappresenta un processo irreversibile che termina quando $P_1(x, t) = P_{st}(x)$ per tutti gli stati x . Da notare che per verificare la condizione (3.23) è necessario conoscere a priori la distribuzione di probabilità all'equilibrio; un criterio basato esclusivamente sui rate di transizione sarebbe preferibile. In effetti, condizione necessaria e sufficiente per l'esistenza di una soluzione che soddisfi il criterio del bilancio dettagliato è che comunque preso un ciclo di lunghezza arbitraria N (Figura 3.2),

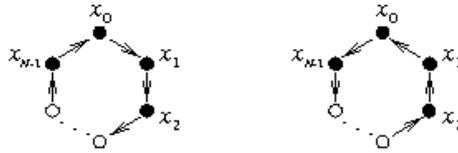


Figura 3.2: Condizione per l'esistenza di una soluzione che soddisfi il principio del bilancio dettagliato: per ogni ciclo, il prodotto dei rate di transizione in un verso e nell'altro deve essere uguale.

con stati intermedi $\{x_i\}$ non necessariamente distinti, sia ugualmente probabile

percorrerlo in un verso e nell'altro:

$$\begin{aligned} & W(x_0 \rightarrow x_1)W(x_1 \rightarrow x_2) \cdots W(x_{N-1} \rightarrow x_0) \\ & = W(x_0 \rightarrow x_{N-1}) \cdots W(x_2 \rightarrow x_1)W(x_1 \rightarrow x_0). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Per un *processo di Markov*, che è completamente caratterizzato da $P_1(x, t)$ e dalla probabilità di transizione $P_{1|1}(x', t'|x, t)$, la master equation governa la dinamica di entrambe le suddette distribuzioni di probabilità. In pratica, nelle stesse condizioni di stabilità introdotte in precedenza, qualunque sia lo stato iniziale della catena (x_0, t_0) si ha:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{1|1}(x, t|x_0, t_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} P_1(x, t) = P_{st}(x) \quad \forall (x_0, t_0). \quad (3.25)$$

Si consideri adesso un sistema fisico che si muove all'interno di uno spazio degli stati \mathcal{S} costituito da un set discreto $\{n\}$; la master equation che governa la probabilità di occupazione nel tempo di uno di tali stati può essere scritta in forma matriciale

$$\frac{\partial}{\partial t} P_i(t) = \sum_j [P_j(t)W_{ji}(t) - P_i(t)W_{ij}(t)] = - \sum_j L_{ij}(t)P_j(t). \quad (3.26)$$

Se raccogliamo le probabilità $P_n(t)$ in un vettore di stato $|P(t)\rangle$, l'equazione può essere scritta in forma compatta "a mo' di" un'equazione di Schrödinger con tempo immaginario

$$\partial_t |P(t)\rangle = -\mathcal{L}(t)|P(t)\rangle, \quad (3.27)$$

dove l'*operatore di Liouville* $\mathcal{L}(t)$, che genera l'evoluzione temporale, ha elementi di matrice

$$L_{ij}(t) = -W_{ji}(t) + \delta_{ij} \sum_k W_{ik}(t). \quad (3.28)$$

Quando i rate di transizione e quindi \mathcal{L} sono indipendenti dal tempo, l'equazione (3.27) ammette la soluzione formale

$$|P(t)\rangle = e^{-\mathcal{L}t}|P(0)\rangle. \quad (3.29)$$

In particolare, se siamo nelle condizioni in cui è soddisfatto il principio del bilancio dettagliato, e cioè $P_i W_{ij} = P_j W_{ji}$, con soluzione stazionaria $P_i = \lim_{t \rightarrow \infty} P_i(t)$, possiamo costruire esplicitamente una soluzione per P_{n_N} a partire da un qualsiasi stato P_{n_0} , attraverso una sequenza di stati intermedi con rate di transizione non nullo:

$$P_{n_N} = P_{n_{N-1}} \frac{W_{n_{N-1}n_N}}{W_{n_N n_{N-1}}} = \cdots = P_{n_0} \prod_{j=0}^{N-1} \frac{W_{n_j n_{j+1}}}{W_{n_{j+1} n_j}}. \quad (3.30)$$

Facendo uso della condizione (3.24), la relazione di sopra diviene

$$P_{n_N} = P_{n_0} \frac{W_{n_0 n_N}}{W_{n_N n_0}}, \quad (3.31)$$

indipendentemente dal particolare cammino $n_0 \rightarrow \dots \rightarrow n_N$. Possiamo a questo punto introdurre un *potenziale* ϕ_n definendo

$$P_n = \frac{1}{Z} e^{-\phi_n}, \quad Z = \sum_n e^{-\phi_n}, \quad (3.32)$$

così che l'equazione (3.31) diviene

$$\phi_{n_N} - \phi_{n_0} = -\ln \frac{W_{n_0 n_N}}{W_{n_N n_0}}. \quad (3.33)$$

È possibile identificare il potenziale con un Hamiltoniana effettiva (con energia misurata in unità di $k_B T$), e Z con l'associata funzione di partizione canonica. Risulta dunque che *un processo stocastico che soddisfa il principio del bilancio dettagliato può essere visto come la descrizione di un sistema fisico che rilassa verso l'equilibrio termico*. Comunque, quando i rate di transizione violano la (3.24), esiste una corrente di probabilità non nulla tra configurazioni differenti, e il sistema è fuori dall'equilibrio.

Nell'*ensemble microcanonico* all'equilibrio il sistema è vincolato ad avere un'energia totale fissata; ma per tutti i microstati accessibili nella shell d'energia deve valere la micro-reversibilità, cioè $W(x \rightarrow x') = W(x' \rightarrow x)$. Il principio del bilancio dettagliato implica dunque $P_{st}(x) = P_{st}(x')$: all'equilibrio termico il sistema può essere trovato con uguale probabilità in uno qualunque dei microstati compatibili col vincolo dell'energia totale fissata.

Nell'*ensemble canonico*, un sistema fisico descritto da una Hamiltoniana $H(x)$ è in contatto termico con un serbatoio a temperatura T fissata. La probabilità associata è data dal fattore di Boltzmann,

$$P_{st}(x) = \frac{1}{Z(T)} e^{-H(x)/k_B T}. \quad (3.34)$$

I rate di transizione, nel soddisfare il principio del bilancio dettagliato, devono quindi obbedire alla relazione seguente

$$\frac{W(x \rightarrow x')}{W(x' \rightarrow x)} = e^{-[H(x') - H(x)]/k_B T}. \quad (3.35)$$

Una simulazione Monte Carlo può essere vista proprio come una soluzione numerica di una master equation. Per prima cosa, si definiscono i possibili microstati del sistema, assegnando i valori permessi a ciascun sito del reticolo. Quindi, si stabiliscono certe regole che corrispondono ai rate di transizione, in accordo alle quali il sistema evolve. A questo punto, si effettuano delle medie sull'ensemble, collezionando differenti *runs*, e/o delle medie temporali con lo scopo di misurare le osservabili fisiche di interesse. Nel linguaggio della master equation, queste informazioni sono codificate all'interno della densità di probabilità $P_1(x, t)$; se in una simulazione ci si vuole assicurare che verrà raggiunto uno stato stazionario, per potere accedere

eventualmente alle proprietà del sistema all'equilibrio termico, i rate di transizione assegnati devono soddisfare il principio del bilancio dettagliato. Come vedremo in seguito, un algoritmo ampiamente usato è il *Metropolis*; tale algoritmo usa i seguenti rate di transizione:

$$W(x \rightarrow x') = \min \left\{ 1, e^{-[H(x')-H(x)]/k_B T} \right\}. \quad (3.36)$$

Lo spostamento dalla configurazione x alla x' è sempre effettuato se l'energia associata diminuisce, mentre tale update è fatto con una probabilità finita se $H(x') > H(x)$; probabilità che decade esponenzialmente al crescere della differenza di energia.

3.1.4 Carattere markoviano nelle equazioni di Langevin

Si consideri un'equazione di tipo-Langevin

$$\frac{\partial}{\partial t} x(t) = F[x(t)] + \zeta(t), \quad (3.37)$$

dove $F(x)$ è una generica funzione ed x un generico vettore (con un arbitrario numero di componenti). Se dovessero comparire derivate temporali di ordine superiore, è sempre possibile incorporare $y(t) = \dot{x}(t)$ etc. in un vettore x con un numero di componenti maggiore e, riarrangiando gli accoppiamenti, riottenere un'equazione della forma (3.37). Per poter risolvere equazioni di questo tipo è necessario specificare le proprietà statistiche della forza random $\zeta(t)$. Il valore medio di tale forza si annulla

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad (3.38)$$

e se si assume invarianza per traslazione temporale e si considerano scorrelate le componenti spaziali di tale forza, si ha per il momento secondo:

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = \phi(t-t') \delta_{ij}. \quad (3.39)$$

Nello spirito del teorema del limite centrale, l'aver specificato i primi due momenti dovrebbe essere sufficiente a caratterizzare completamente il processo stocastico. La funzione $\phi(t)$ determina la "memoria" che il sistema preserva entro una certa scala temporale τ_c ; d'altra parte ci aspettiamo che due eventi stocastici sufficientemente distanti nel tempo siano scorrelati. Se introduciamo l'operatore $K(t-t')$ tale che

$$\int dt'' K(t-t'') \phi(t''-t') = \delta(t-t'), \quad (3.40)$$

la distribuzione di probabilità per la forza stocastica $\zeta(t)$ è

$$P[\zeta] = e^{-\frac{1}{2} \int dt dt' \zeta_i(t) K(t-t') \zeta_i(t')}. \quad (3.41)$$

Se siamo interessati al limite di tempi lunghi $t \gg \tau_c$ possiamo effettivamente porre $\phi(t) \rightarrow \lambda \delta(t)$ ottenendo per la distribuzione di probabilità

$$P[\zeta] = C e^{-\frac{1}{2\lambda} \int dt \zeta^2(t)}. \quad (3.42)$$

Ciò detto, la soluzione $\{x(t)\}$ della (3.37) può essere vista come un processo stocastico; tale processo ha un carattere markoviano *se e solo se* (dopo aver incorporato la media $\langle \zeta \rangle$ in F) $\zeta(t)$ rappresenta proprio un *rumore bianco Gaussiano*, e cioè:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = \lambda_i \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (3.43)$$

In pratica, la parte deterministica della (3.37) è un'equazione differenziale del primo ordine e quindi $x(t + \tau)$ segue direttamente da $x(t)$. Il rumore bianco con δ -correlazioni implica che la parte stocastica non induce alcuna forma di memoria. Volendo essere più precisi, ricordando che la derivata temporale è definita come il limite

$$\frac{\partial}{\partial t} x(t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{x(t + \tau) - x(t)}{\tau}, \quad (3.44)$$

si trova per il momento secondo di tale incremento:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^2} \langle [x_i(t + \tau) - x_i(t)] [x_j(t' + \tau) - x_j(t')] \rangle &= \\ &= F_i [x(t)] F_j [x(t')] + \langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle, \end{aligned} \quad (3.45)$$

che si fattorizza per $t \neq t'$ solo se è verificata la condizione (3.43). Ciò, in virtù di quanto detto alla fine del paragrafo 3.1.2, garantisce il carattere markoviano della dinamica.

3.2 Dinamica critica

Raramente è possibile risolvere esattamente le equazioni del moto microscopiche di un sistema dinamico stocastico; d'altra parte, quasi mai ciò è richiesto: spesso è preferibile una descrizione del sistema in termini di pochi gradi di libertà *mesoscopici* i cui valori medi diano le osservabili macroscopiche. Chiaramente ciò richiede una sorta di *coarse-graining*. Inoltre, si è interessati tipicamente al comportamento “a lungo termine” di certe quantità caratteristiche e non alla loro completa dinamica (su brevi scale temporali).

Effettuando un'opportuna separazione delle scale temporali è possibile formulare equazioni del moto per i gradi di libertà ‘lenti’; ne risulta che, la dinamica delle osservabili mesoscopiche può essere descritta come il risultato di una lenta evoluzione deterministica verso uno stato stazionario, “disturbata” dall'azione delle variabili microscopiche ‘veloci’ che formano delle forze casuali e possono essere viste come un *rumore* stocastico insito nel sistema. Tali considerazioni motivano l'assunzione che sia possibile descrivere la dinamica mediante equazioni differenziali tipo-*Langevin*.

Si consideri un sistema le cui proprietà mesoscopiche siano descritte da un set di variabili ϕ_i , e sia $\mathcal{H}[\phi]$ l'hamiltoniana dello stesso. La dinamica risulta essere descritta dall'equazione

$$\partial_t \phi_i(t) = - \sum_j \mathbf{D}_{ij} \frac{\delta \mathcal{H}[\phi]}{\delta \phi_j(t)} + \zeta_i(t). \quad (3.46)$$

Il primo termine dell'equazione rappresenta l'evoluzione deterministica (e irreversibile) verso il minimo di \mathcal{H} e \mathbf{D}_{ij} è chiamato coefficiente cinetico. La natura stocastica di tale equazione è contenuta nel rumore random $\zeta_i(t)$ che risulta specificato dalla propria distribuzione di probabilità o, equivalentemente dai momenti corrispondenti. Nell'ipotesi in cui il rumore risulta distribuito gaussianamente, basta specificare i primi due momenti; se indichiamo con $\langle \dots \rangle$ la media sulle possibili realizzazioni del rumore, assumiamo $\langle \zeta_i(t) \rangle = 0$ e $\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = 2\mathbf{N}_{ij} \delta(t - t')$.

A partire dall'equazione di Langevin (3.46) è possibile derivare un'equazione differenziale alle derivate parziali (equazione di Fokker-Planck) per la distribuzione di probabilità $P[\{\phi_i\}, t]$ dei ϕ_i al tempo t data una condizione iniziale

$$\partial_t P[\{\phi_i\}, t] = \frac{\delta}{\delta \phi_j} \left[\mathbf{N}_{jk} \frac{\delta P}{\delta \phi_k} + \mathbf{D}_{jk} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi_k} P \right]. \quad (3.47)$$

La distribuzione stazionaria ($\partial_t P[\{\phi_i\}, t] = 0$) è la distribuzione di probabilità di Boltzmann all'equilibrio $P_{st}[\{\phi_i\}] \propto e^{-\beta \mathcal{H}[\phi]}$ se e solo se è verificata la *relazione di Eistein*:

$$\mathbf{D} = \beta \mathbf{N}. \quad (3.48)$$

Se, comunque date due configurazioni $\{\phi_i\}$ e $\{\phi'_i\}$, esiste sempre una realizzazione del rumore ζ_i tale che partendo da $\{\phi_i\}$ e lasciando evolvere il sistema secondo la (3.46) si raggiunga in un tempo finito la configurazione $\{\phi'_i\}$, allora il sistema si dice *ergodico*. Se è verificata l'ergodicità, il limite per tempi lunghi di $P[\{\phi_i\}, t]$ è $P_{st}[\{\phi_i\}]$ indipendentemente dalle condizioni iniziali.

La dinamica del sistema può essere studiata osservando quantità dipendenti dal tempo definite in termini delle variabili $\{\phi_i\}$ e mediate sulle possibili realizzazioni del rumore termico. Le grandezze più semplici che possiamo considerare sono quelle che risultano dall'aver osservato il sistema ad un dato istante temporale (per esempio $\langle \phi_i(t) \rangle$). Queste grandezze mostreranno una dipendenza temporale fin tanto che il sistema non avrà raggiunto l'equilibrio termodinamico; nel limite di tempi lunghi, ci aspettiamo che tali grandezze raggiungano un valore asintotico e quindi non sarà più possibile ricavare da esse informazioni sulla dinamica del sistema. Il passo successivo consiste nel considerare grandezze che risultano dall'aver osservato il sistema in due istanti di tempo differenti; a differenza delle grandezze ad un tempo, le grandezze a due tempi continuano a dare informazioni sulla dinamica del sistema anche nel limite di tempi lunghi. Una quantità a due tempi di grande interesse per lo studio della dinamica fuori e all'equilibrio è la funzione di correlazione delle variabili mesoscopiche $\{\phi_i\}$

$$C_{ij}(t, s) \equiv \langle \phi_i(t) \phi_j(s) \rangle, \quad (3.49)$$

che è legata al rilassamento delle fluttuazioni termiche spontanee delle variabili $\{\phi_i\}$. Un'altra grandezza interessante è la funzione di risposta, che misura la risposta del sistema ad una perturbazione esterna. In particolare, se assumiamo che tale perturbazione sia generata da un campo esterno $\{h_i\}$ che si accoppia linearmente alle variabili $\{\phi_i\}$ nell'hamiltoniana \mathcal{H} : $\mathcal{H}_h[\phi] = \mathcal{H}[\phi] - \sum_i h_i \phi_i$, la funzione di risposta

lineare $R_{ij}(t, s)$ si difinisce attraverso

$$R_{ij}(t, s) \equiv \left. \frac{\delta \langle \phi_i(t) \rangle_h}{\delta h_j(s)} \right|_{h=0}. \quad (3.50)$$

3.3 Approccio di campo alla dinamica di non-equilibrio

I fenomeni critici sono caratterizzati da lunghezze e scale temporali che divergono. Ciò suggerisce l'utilizzo di una descrizione continua in termini di variabili opportunamente riscalate. In effetti, la scala temporale t_c associata alla dinamica del parametro d'ordine diverge avvicinandoci ad un punto critico. Vicino ad una transizione di fase continua tutte le altre quantità fluttueranno molto più velocemente del parametro d'ordine $\varphi(x, t)$. L'effetto di tutte queste altre variabili può essere pensato come una forza stocastica che agisce su φ , con correlazioni temporali e spaziali a breve distanza. Le proprietà statiche e dinamiche del sistema, in vicinanza del punto critico, dipenderanno esclusivamente da queste opportune variabili mesoscopiche; i dettagli microscopici non avranno influenza sul comportamento collettivo del sistema. Questa proprietà, che è nota come *universalità*, ci permette di utilizzare opportuni modelli della teoria di campo che descrivano la classe di universalità in cui ricade il sistema in esame; così è possibile definire una hamiltoniana effettiva che dipende dal solo parametro d'ordine ma che rifletta le simmetrie originarie del sistema, i gradi di libertà etc. In termini della teoria di campo è possibile dunque determinare il comportamento non analitico delle varie quantità dinamiche (all'equilibrio e non) quando ci si avvicina al punto critico. Tali non-analicità, parametrizzate attraverso gli esponenti critici standard, opportuni rapporti tra ampiezze e particolari funzioni, risultano quantità universali. I valori di tali quantità universali caratterizzano proprio la *classe di universalità dinamica* del modello considerato. In particolare, si trova che una particolare classe di universalità statica consiste di svariate sottoclassi dinamiche; tali classi dinamiche mostrano comportamenti dinamici universali differenti, ma esibiscono le stesse proprietà universali statiche.

Consideriamo la dinamica fuori equilibrio: per fissare le idee, immaginiamo di effettuare sul sistema in esame un repentino abbassamento di temperatura da $T = \infty$ a $T = T_c$. Dal punto di vista teorico, il comportamento fuori equilibrio è indotto dalle condizioni iniziali e non è generico. Difatti, se il raffreddamento viene fatto ad una temperatura appena al di sotto della temperatura critica il sistema termalizza in un tempo finito $t_{eq} \sim \xi^z$ e raggiunge uno stato di equilibrio caratterizzato dalla funzione di distribuzione canonica associata all'hamiltoniana mesoscopica \mathcal{H} . Al punto critico, viceversa, gli effetti delle condizioni iniziali persistono per un tempo infinito (*critical slowing down*) e danno origine ad un comportamento critico fuori equilibrio che presenta alcune caratteristiche universali.

3.3.1 Rappresentazione della dinamica mediante *path-integral*

È possibile studiare la dinamica fuori equilibrio semplicemente tenendo conto delle condizioni iniziali nel descrivere l'evoluzione delle variabili mesoscopiche. Utiliz-

ziamo dunque una rappresentazione mediante campi in termini di un'opportuna generalizzazione dell'equazione di Langevin per un campo scalare $\varphi(x, t)$.

$$\partial_t \varphi(x, t) = \mathcal{F}[\varphi(x, t)] + \zeta(x, t), \quad (3.51)$$

dove \mathcal{F} è una funzione locale di $\varphi(x, t)$ e $\zeta(x, t)$ è un rumore bianco gaussiano a valore medio nullo e con correlazioni

$$\langle \zeta(x, t) \zeta(x', t') \rangle = 2\Gamma \delta(x - x') \delta(t - t'). \quad (3.52)$$

Data una condizione iniziale $\varphi(x, t_0) = \varphi_0(x)$, ciò che ci interessa è calcolare il valore di aspettazione di una generica osservabile $\mathcal{O}[\varphi]$ del sistema. Tale calcolo va fatto mediando l'osservabile sul rumore stocastico e tenendo a mente che lo stesso parametro d'ordine dipende attraverso l'equazione (3.51) dal rumore:

$$\langle \mathcal{O}[\varphi] \rangle_\zeta \propto \int d[\zeta] \mathcal{O}[\varphi_\zeta] \mathcal{P}[\zeta]. \quad (3.53)$$

Per garantire che l'integrazione venga fatta esclusivamente sulle funzione φ che sono soluzione della (3.51) possiamo introdurre la seguente identità valida per ogni punto dello spazio-tempo

$$\begin{aligned} 1 &= \int d[\varphi] \prod_{(x,t)} \delta(\partial_t \varphi(x, t) - \mathcal{F}[\varphi(x, t)] - \zeta(x, t)) \det \left[\partial_t - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi} \right] \\ &= \int d[i\tilde{\varphi}] \int d[\varphi] \exp \left\{ - \int dt \int d^d x \tilde{\varphi} (\partial_t \varphi - \mathcal{F}[\varphi] - \zeta) \right\} \end{aligned} \quad (3.54)$$

l'ultima uguaglianza non è altro che la rappresentazione mediante integrale funzionale della funzione delta (notare che l'integrale viene fatto lungo l'asse immaginario); così facendo abbiamo introdotto un campo ausiliario $\tilde{\varphi}$ che prende il nome di *campo di risposta* per ragioni che vedremo in seguito. Notiamo inoltre che sempre nell'ultimo passaggio abbiamo omesso il determinante funzionale conseguenza del cambiamento di variabili $\{\zeta\} \rightarrow \{\varphi\}$; se infatti usiamo la "standard $It\hat{o}$ " come prescrizione per il calcolo dell'integrale funzionale, tale determinante risulta una costante che può essere riassorbita nella misura $d[\varphi]$.

Sostituendo quest'ultima uguaglianza nel calcolo del valore medio di un osservabile e esplicitando i termini che contengono la funzione di rumore termico si ha

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}[\varphi] \rangle_\zeta &\propto \int d[i\tilde{\varphi}] \int d[\varphi] \exp \left\{ - \int dt \int d^d x \tilde{\varphi} (\partial_t \varphi - \mathcal{F}[\varphi]) \right\} \\ &\quad \times \mathcal{O}[\varphi] \int d[\zeta] \exp \left\{ - \int dt \int d^d x \left[\frac{\zeta^2}{4\Gamma} - \tilde{\varphi} \zeta \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.55)$$

possiamo integrare sul rumore e riassorbendo sempre la normalizzazione otteniamo:

$$\langle \mathcal{O}[\varphi] \rangle = \int d[i\tilde{\varphi}] d[\varphi] \mathcal{O}[\varphi] e^{-S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi]} \quad (3.56)$$

dove $S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi]$ è l'azione efficace

$$S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi] = \int d^d x \int_{t_0}^{\infty} dt \{ \tilde{\varphi} (\partial_t \varphi - \mathcal{F}[\varphi]) - \tilde{\varphi} \Gamma \tilde{\varphi} \}. \quad (3.57)$$

Abbiamo esplicitamente indicato la dipendenza dall'istante iniziale t_0 in cui vengono definite le condizioni iniziali dei campi. Aver assorbito lo jacobiano della trasformazione nella misura dell'integrale funzionale è equivalente a definire $\theta(0) = 0$ e dunque $\langle \varphi(x, t) \tilde{\varphi}(y, s) \rangle_{s=t} \equiv R(x - y; t, s)_{s=t} = 0$.¹ In pratica ciò esclude automaticamente nella teoria perturbativa qualsiasi diagramma con loop del propagatore di risposta; in effetti si potrebbe dimostrare che lo Jacobiano cancella esattamente tutti i diagrammi di questo tipo.

3.3.2 Rilassamento puramente dissipativo nel modello di Ising

Nel caso di rilassamento puramente dissipativo di un campo a N-componenti φ_i , abbiamo

$$\mathcal{F}_i[\varphi(x, t)] = -\Gamma \frac{\delta \mathcal{H}[\varphi]}{\delta \varphi_i(x, t)} \quad (3.58)$$

dove la costante Γ coincide con quella che compare in (3.52) per garantire che valgano le relazioni di Einstein, e quindi la convergenza verso uno stato stazionario che coincida con la distribuzione di probabilità canonica. Seguendo quanto fatto nel paragrafo precedente, si arriva alla seguente azione dinamica:²

$$S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi] = \int d^d x \int_{t_0}^{\infty} dt \left\{ \tilde{\varphi} \left(\partial_t \varphi + \Gamma \frac{\delta \mathcal{H}[\varphi]}{\delta \varphi} \right) - \tilde{\varphi} \Gamma \tilde{\varphi} \right\}. \quad (3.59)$$

La dinamica critica di alcuni magneti anisotropi è descritta dall'azione (3.59) con un hamiltoniana del tipo

$$\mathcal{H}[\varphi] = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{2} r_0 \varphi^2 + \frac{1}{4!} g_0 (\varphi^2)^2 \right\}, \quad (3.60)$$

che con $N = 1$ è proprio l'hamiltoniana effettiva per la classe di universalità del modello di Ising. A questo punto, sostituendo

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \varphi} = -\Delta \varphi + r_0 \varphi + \frac{1}{6} g_0 \varphi^3 \quad (3.61)$$

¹Abbiamo esplicitamente scritto la dipendenza della *Funzione di Risposta* R dall'intervallo spaziale $x - y$ poiché il sistema in esame è invariante per traslazione spaziale. Diversamente, come vedremo in seguito, a causa delle condizioni iniziali $\varphi(x, t_0)$ non è garantita l'invarianza per traslazione temporale.

²Notiamo che, se al posto di \mathcal{H} utilizziamo \mathcal{H}_h che incorpora un accoppiamento lineare tra il campo φ ed un campo magnetico h , allora nella (3.59) tale campo risulterà accoppiato al campo di risposta $\tilde{\varphi}$; ne risulta che $R(x - y; t, s) = \delta \langle \varphi(x, t) \rangle / \delta h(y, s) = \langle \varphi(x, t) \tilde{\varphi}(y, s) \rangle$; ecco spiegato il motivo per cui il campo $\tilde{\varphi}$ prende il nome di campo di risposta.

nella (3.59) si ottiene

$$S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi] = \int d^d x \int_{t_0}^{\infty} dt \left\{ \tilde{\varphi} \left[\partial_t \varphi + \Gamma(r_0 - \Delta)\varphi + \frac{1}{6}g_0\varphi^3 \right] - \Gamma\tilde{\varphi}^2 \right\}. \quad (3.62)$$

I valori medi, come abbiamo visto, si ottengono come medie funzionali con peso pari a $\exp(-S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi])$. Per specificare completamente la dinamica, occorre a questo punto provvedere ad inserire le condizioni iniziali (macroscopiche) per il campo $\varphi(x, t) : \varphi(x, t_0) = \varphi_0(x)$; per fare ciò notiamo che il funzionale $\exp(-S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi])$ può essere interpretato come una densità di probabilità sui cammini definiti dalle configurazioni $\{\tilde{\varphi}(x, t), \varphi(x, t)\}$. Risulta dunque un funzionale della configurazione iniziale a $t = t_0$, $\varphi(x, t_0) = \varphi_0(x)$ che corrisponde alla condizione iniziale dell'equazione differenziale di Langevin. Più in generale quindi possiamo assegnare una distribuzione di probabilità per le condizioni iniziali, nella forma $\exp(-\mathcal{H}_0[\varphi_0])$ e quindi mediare sul campo iniziale $\varphi_0(x)$. Se il sistema è già all'equilibrio termico al tempo t_0 , allora $\mathcal{H}_0[\varphi_0] = \mathcal{H}[\varphi_0]$ e possiamo estendere il tempo di integrazione in S da $-\infty$ a ∞ . Ciò è possibile poiché, se si assume che la dinamica sia ergodica, indipendentemente dalle condizioni iniziali nel lontano passato, la medesima distribuzione stazionaria del parametro d'ordine viene raggiunta al tempo t_0 . La teoria che ne risulta è invariante per traslazione sia spaziale sia temporale. Comunque, se siamo interessati all'influenza delle condizioni iniziali corrispondenti ad uno stato iniziale macroscopicamente preparato, dobbiamo effettuare una media su $\varphi_0(x)$ con distribuzione di probabilità $\exp(-\mathcal{H}_0[\varphi_0])$, dove

$$\mathcal{H}_0[\varphi_0] = \int d^d x \frac{\tau_0}{2} [\varphi_0(x) - a(x)]^2. \quad (3.63)$$

Questa specifica uno stato iniziale con valore medio e correlazione spaziale date da

$$\langle \varphi_0(x) \rangle = a(x), \quad \langle [\varphi_0(x) - a(x)][\varphi_0(x') - a(x')] \rangle = \tau_0^{-1} \delta(x - x'). \quad (3.64)$$

La funzione δ rispecchia il carattere a breve distanza delle correlazioni. Quindi, in quanto segue tutte le funzioni di correlazione e di risposta possono essere ottenute come derivate funzionali rispetto ai campi coniugati $h(x, t)$ e $\tilde{h}(x, t)$, a partire dal funzionale generatore delle funzioni di correlazione

$$\begin{aligned} Z[\tilde{h}, h] &= \int d[i\tilde{\varphi}]d[\varphi] \exp \left\{ -S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi] - \mathcal{H}_0[\varphi_0] \right. \\ &\quad \left. + \int_{t_0}^{\infty} dt \int d^d x (\tilde{h}\tilde{\varphi} + h\varphi) \right\}, \end{aligned} \quad (3.65)$$

e delle funzioni di correlazione connesse:

$$W[\tilde{h}, h] = \ln Z[\tilde{h}, h]. \quad (3.66)$$

A questo punto è già possibile fare alcune osservazioni essenziali. Se indichiamo con μ una scala esterna di impulsi, allora le dimensioni in termini di μ dei parametri e dei

campi che entrano in $S_{t_0}[\tilde{\varphi}, \varphi]$ e $\mathcal{H}_0[\varphi_0]$ possono essere determinate usando l'analisi dimensionale: si trova in particolare che $\tau_0 \sim \mu^2$. Quindi sotto il \mathcal{RG} i possibili punti fissi di τ_0 posso essere $\pm\infty$ o 0. Dal momento che $\tau_0^* = 0$ e $\tau_0^* = -\infty$ descrivono probabilità non normalizzabili, l'unico punto fisso di interesse fisico corrisponde a $\tau_0 \rightarrow \infty$: correzioni dovute a valori finiti di τ_0^{-1} sono irrilevanti nel senso del gruppo di rinormalizzazione.

3.3.3 Il modello Gaussiano

In questa sezione discuteremo la parte quadratica del funzionale generatore (3.65); esso definisce la “parte libera” della teoria completa, attorno alla quale è eventualmente possibile sviluppare una teoria perturbativa.

In seguito alle scelte fatte sul determinante jacobiano della trasformazione si ha la seguente normalizzazione:

$$Z[0, 0] = 1, \quad W[0, 0] = 0. \quad (3.67)$$

Le equazioni del moto per i campi φ e $\tilde{\varphi}$ si ottengono annullando la variazione prima di W rispetto ai campi stessi; le due variazioni indipendenti portano a:

$$\begin{aligned} h &= \left\langle \frac{\delta S}{\delta \varphi}[\tilde{\varphi}, \varphi] \right\rangle \\ \tilde{h} &= \left\langle \frac{\delta S}{\delta \tilde{\varphi}}[\tilde{\varphi}, \varphi] \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Notiamo inoltre che, in termini del funzionale generatore, il valore di aspettazione di un'osservabile \mathcal{O} è:

$$\langle \mathcal{O}[\tilde{\varphi}, \varphi] \rangle = \mathcal{O} \left[\frac{\delta}{\delta \tilde{h}}, \frac{\delta}{\delta h} \right] W[\tilde{h}, h] \Big|_{\tilde{h}=h=0}, \quad (3.69)$$

e in particolare

$$\begin{aligned} \langle \varphi \rangle &= \frac{\delta}{\delta h} W[\tilde{h}, h] \Big|_{\tilde{h}=h=0} \\ \langle \tilde{\varphi} \rangle &= \frac{\delta}{\delta \tilde{h}} W[\tilde{h}, h] \Big|_{\tilde{h}=h=0}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Nel nostro caso, se introduciamo la trasformata di Fourier

$$\varphi(x, t) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \varphi(q, t) e^{-iqt} \quad (\text{analogamente per le altre funzioni}) \quad (3.71)$$

e ci limitiamo alla parte quadratica dell'azione ($g_0 = 0$), otteniamo le seguenti equazioni (dove d'ora in avanti assumeremo $t_0 = 0$)

$$\begin{aligned} [\partial_t + \Gamma(r_0 + q^2)] \langle \varphi(q, t) \rangle - 2\Gamma \langle \tilde{\varphi}(q, t) \rangle &= \tilde{h}(q, t) \quad \langle \tilde{\varphi}(q, \infty) \rangle = 0 \\ [-\partial_t + \Gamma(r_0 + q^2)] \langle \tilde{\varphi}(q, t) \rangle = h(q, t) \quad \langle \varphi(q, 0) \rangle - a(q) &= \tau_0^{-1} \langle \tilde{\varphi}(q, 0) \rangle. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Se sviluppiamo $\tilde{\varphi}$ e φ intorno ai valori di aspettazione $\langle \tilde{\varphi} \rangle$ e $\langle \varphi \rangle$, trasformiamo la misura dell'integrale funzionale e usiamo la condizione di normalizzazione (3.67), troviamo:

$$W_G[\tilde{h}, h] = \frac{1}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int_0^\infty dt \left\{ \tilde{h} \langle \tilde{\varphi} \rangle + h \langle \varphi \rangle + a \delta(t) \langle \tilde{\varphi} \rangle \right\}, \quad (3.73)$$

dove G a pedice sta ad indicare che stiamo lavorando in approssimazione gaussiana. A questo punto occorre risolvere le (3.72); per fare ciò basta introdurre le funzioni di Green "ritardata" e "anticipata"

$$\begin{aligned} G_+(t, s) &= \theta(t-s) e^{-\Gamma(r_0+q^2)(t-s)} \\ G_-(t, s) &= \theta(t-s) e^{\Gamma(r_0+q^2)(t-s)}, \end{aligned} \quad (3.74)$$

(n.b.: $G_-(t, s) = G_+(s, t)$) soluzioni delle equazioni funzionali

$$\begin{aligned} [\partial_t + \Gamma(r_0 + q^2)] G_+(t, s) &= \delta(t-s) \\ [-\partial_t + \Gamma(r_0 + q^2)] G_-(t, s) &= \delta(t-s). \end{aligned} \quad (3.75)$$

In termini delle funzioni di Green le soluzioni delle (3.72) si scrivono:

$$\langle \tilde{\varphi}_q(t) \rangle = \int_0^\infty ds \theta(s-t) e^{\Lambda(t-s)} h_q(s), \quad (3.76)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_q(t) \rangle &= \int_0^\infty ds \theta(t-s) e^{-\Lambda(t-s)} \left\{ \tilde{h}_q(s) + 2\Gamma \langle \tilde{\varphi}_q(s) \rangle \right. \\ &\quad \left. + [a_q + \tau_0^{-1} \langle \tilde{\varphi}_q(s) \rangle] \delta(s) \right\}, \end{aligned} \quad (3.77)$$

dove per alleggerire la notazione abbiamo introdotto $\Lambda = \Gamma(r_0 + q^2)$ e messo a pedice la dipendenza dal momento q poiché di natura semplicemente algebrica. Inserendo le soluzioni appena trovate nella (3.73) possiamo scriverlo nella forma:

$$\begin{aligned} W_G[\tilde{h}, h] &= \int_0^\infty dt \int_0^\infty ds \left\{ h_q(t) R_q(t, s) \tilde{h}_q(s) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} h_q(t) C_q(t, s) h_q(s) \right\} \\ &\quad + \int_0^\infty dt h_q(t) R_q(t, 0) a_q, \end{aligned} \quad (3.78)$$

dove R_q e C_q sono rispettivamente la funzione di risposta e la funzione di correlazione; in particolare si ha:

$$R_q(t, s) = \theta(t-s) e^{-\Gamma(r_0+q^2)(t-s)} \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned} C_q(t, s) &= \frac{1}{r_0 + q^2} \left[e^{-\Gamma(r_0+q^2)|t-s|} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{r_0 + q^2}{\tau_0} - 1 \right) e^{-\Gamma(r_0+q^2)(t+s)} \right]. \end{aligned} \quad (3.80)$$

$$(3.81)$$

A questo punto è necessario fare alcune osservazioni:

1. Finché τ_0 risulta finito ($\tau_0 \neq 0$) il termine $\tau_0^{-1}(r_0 + q^2)$ sarà molto più piccolo di 1 nel limite critico. Quindi, si può porre $\tau_0^{-1} = 0$ all'ordine più grande nella teoria perturbativa ed eventualmente studiare le correzioni allo scaling in termini di un'espansione in τ_0^{-1} :

$$C_q(t, s) = C_q^{(D)}(t, s) + \tau_0^{-1} R_q(t, 0) R_q(s, 0), \quad (3.82)$$

dove $C_q^{(D)}(t, s)$ individua il correlatore di Dirichlet

$$C_q^{(D)}(t, s) = \frac{1}{r_0 + q^2} \left[e^{-\Gamma(r_0 + q^2)|t-s|} - e^{-\Gamma(r_0 + q^2)(t+s)} \right]. \quad (3.83)$$

Tutto ciò è equivalente all'osservazione fatta alla fine del paragrafo 3.3.2 in termini della sola analisi dimensionale, che ha permesso di dire che il punto fisso rilevante si ha per $\tau_0^{-1} = 0$.

2. Rispetto alla teoria dinamica all'equilibrio, il correlatore $C_q(t, s)$ non presenta più invarianza per traslazione temporale; esso non dipende più dalla sola differenza dei tempi $t - s$. Viceversa, la funzione di risposta è identica a quella all'equilibrio: ciò è conseguenza della natura causale del campo di risposta (L'accensione di un campo magnetico al tempo s può avere effetti solo in un tempo $t > s$).
3. La funzione di correlazione all'equilibrio può essere recuperata mediante un opportuna scelta dell'accoppiamento τ_0 : $\tau_0 = r_0 + q^2$. Tale scelta corrisponde infatti ad aver definito una distribuzione iniziale con correlazioni uguali alle correlazioni all'equilibrio.

3.3.4 \mathcal{RG} dinamico

In maniera formalmente analoga a quanto fatto nel paragrafo 2.1, possiamo costruire un'azione dinamica effettiva $S_\lambda[\tilde{\varphi}, \varphi]$ che dipende da un parametro di scala λ e che possiede funzioni di correlazione connesse $G_{n, \tilde{n}} = \langle [\varphi]^n [\tilde{\varphi}]^{\tilde{n}} \rangle_c$ che soddisfano

$$G_{n, \tilde{n}}^{(\lambda)}(\{x, t\}) = \mathcal{Z}^{-n/2}(\lambda) \tilde{\mathcal{Z}}^{-\tilde{n}/2}(\lambda) G_{n, \tilde{n}}(\{\lambda x, \lambda^z t\}) \quad (3.84)$$

dove $G_{n, \tilde{n}}^{(\lambda)}$ sono le funzioni di correlazione calcolate con l'azione S_λ (possiamo arbitrariamente porre $S_{\lambda=1} = S$); $\{x, t\}$ individua la collezione degli $n + \tilde{n}$ punti dello spazio-tempo; l'esponente z permette un possibile scaling anisotropo tra spazio e tempo.

Ancora una volta, il *mapping* $S[\tilde{\varphi}, \varphi] \rightarrow S_\lambda[\tilde{\varphi}, \varphi]$ prende il nome di *trasformazione del Gruppo di Rinormalizzazione* e $\{S_\lambda[\tilde{\varphi}, \varphi]\}_{\lambda \geq 1}$ individua una traiettoria nello spazio dei funzionali generatori. Le costanti di accoppiamento che compaiono in S_λ sono funzioni del parametro di scala; se per $\lambda \rightarrow \infty$ l'azione $S_\lambda[\tilde{\varphi}, \varphi]$ ammette limite

$S^*[\tilde{\varphi}, \varphi]$, esso prende il nome di *azione di punto fisso* e le funzioni di correlazione si comportano nella maniera seguente

$$G_{n,\tilde{n}}(\{\lambda x, \lambda^z t\}) \sim \mathcal{Z}_*^{-n/2}(\lambda) \tilde{\mathcal{Z}}_*^{-\tilde{n}/2}(\lambda) G_{n,\tilde{n}}^*(\{x, t\}) \quad \text{per } \lambda \rightarrow \infty, \quad (3.85)$$

dove $*$ individua le quantità al punto fisso calcolate usando l'azione al punto fisso S^* . È possibile mostrare che, analogamente a quanto già visto nella statica,

$$\mathcal{Z}_*(\lambda) = \lambda^{-2d_\varphi}, \quad \tilde{\mathcal{Z}}_*(\lambda) = \lambda^{-2d_{\tilde{\varphi}}}. \quad (3.86)$$

Alla luce di ciò, le funzioni di correlazione presentano un comportamento critico a tempi lunghi e grandi distanze dato dalla seguente relazione di scala:

$$G_{n,\tilde{n}}(\{\lambda x, \lambda^z t\}) \sim \lambda^{-2d_\varphi - 2d_{\tilde{\varphi}}} G_{n,\tilde{n}}^*(\{x, t\}) \quad \text{per } \lambda \rightarrow \infty, \quad (3.87)$$

dove gli esponenti d_φ , $d_{\tilde{\varphi}}$ e z sono proprietà del punto fisso, cioè dipendono esclusivamente da $S^*[\tilde{\varphi}, \varphi]$. Funzioni di correlazione relative ad azioni che fluiscono sotto le trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione verso la stessa azione fissa S^* presentano le stesse relazioni di scala: è proprio questa l'ipotesi di base che giustifica l'universalità che si osserva nei fenomeni critici.

Le equazioni del \mathcal{RG} per le funzioni di correlazione posso essere derivate usando l'approccio della teoria di campo. Per fissare le idee, rivediamo inizialmente le caratteristiche di regolarizzazione e rinormalizzazione del modello A in assenza di condizioni iniziali. (D'ora in avanti ci metteremo nelle condizioni $a(x) = 0$). In primo luogo la teoria risulta invariante per traslazione spaziale e temporale. L'origine delle divergenze nei vari termini della serie perturbativa può essere attribuita al comportamento singolare dei propagatori e dei correlatori per piccole distanze spaziali e temporali ($x - y \rightarrow 0, t - s \rightarrow 0$). Nello spazio di Fourier ciò si traduce in una divergenza ultravioletta derivante dal contributo a grandi impulsi e frequenze negli integrali di Feynman. Per rendere la serie perturbativa formalmente trattabile tali divergenze devono essere regolarizzate (in particolare assumeremo una regolarizzazione dimensionale). L'ipotesi che la teoria sia rinormalizzabile implica che un numero finito di riparametrazioni delle costanti di accoppiamento e dei campi sia sufficiente a rendere tali contributi convergenti nel limite $\epsilon = 4 - d \rightarrow 0$, cioè una volta rimossa la regolarizzazione.

Nel momento in cui specifichiamo le condizioni iniziali, rompiamo l'invarianza per traslazione temporale. Come conseguenza, è necessario rinormalizzare direttamente le funzioni di Green riducibili ad una particella (*1PR*) invece delle funzioni vertice irriducibili (*1PI*). In quel che segue è utile spezzare il correlatore di Dirichlet (3.83) nella sua parte all'equilibrio $C_q^{(e)}(t - s)$ e nella sua parte iniziale $C_q^{(i)}(t, s)$:

$$C_q^{(e)}(t - s) = \frac{1}{r_0 + q^2} e^{-\Gamma(r_0 + q^2)|t-s|}, \quad (3.88)$$

$$C_q^{(i)}(t, s) = \frac{1}{r_0 + q^2} e^{-\Gamma(r_0 + q^2)(t+s)}. \quad (3.89)$$

Tutti i grafici che contengono soltanto la parte all'equilibrio del correlatore possono essere resi finiti come nella teoria invariante per traslazione temporale; in particolare si introducono i parametri rinormalizzati:

$$\begin{aligned} \varphi_b &= Z^{1/2} \varphi, & \tilde{\varphi}_b &= \tilde{Z}^{1/2} \tilde{\varphi} \\ \Gamma_b &= (Z/\tilde{Z})^{1/2} \Gamma, & r_0 \equiv r_b &= Z^{-1} Z_r r, & g_0 \equiv g_b &= Z_g \mu^{4-d} g, \end{aligned} \quad (3.90)$$

dove i parametri con a pedice b sono i parametri “nudi” (*bare parameters*) cioè quelli che compaiono originariamente nell'azione (3.62), mentre gli altri rappresentano quelli rinormalizzati. Si noti che la costante di accoppiamento rinormalizzata g è definita in maniera tale da essere adimensionata, μ essendo un parametro di scala arbitrario delle dimensioni di una massa. I fattori Z si chiamano costanti di rinormalizzazione e possono essere calcolati in molti modi differenti. In quanto segue faremo riferimento allo schema della *minimal subtraction* (MS) che permette lo studio diretto della teoria critica, cioè fissando $r = 0$. All'interno di tale schema, le costanti di rinormalizzazione prendono la forma $Z = 1 + \sum \alpha_n(g)/\epsilon^n$, dove i coefficienti $\alpha_n(g) = O(g^n)$ possono essere calcolati ordine per ordine in teoria perturbativa.

In realtà le sole condizioni espresse dalla (3.90) non sono sufficienti poichè curano esclusivamente le divergenze indotte dal comportamento singolare a piccoli tempi di $C_q^{(e)}(t-s)$ per $t \rightarrow s$. In aggiunta, ci sono ulteriori singolarità derivanti dalla parte iniziale del correlatore $C_q^{(i)}(t,s)$ per $t+s \rightarrow 0$. Queste nuove divergenze sono chiaramente localizzate “nella superficie”, esse si possono presentare esclusivamente in una data funzione di Green se uno dei tempi da cui dipende è fissato a zero. Dalla semplice analisi dimensionale si vede che il tempo riscalda come $t \sim (\mu^2)^{-1}$ nel caso del modello preso in considerazione. Quindi, il grado di divergenza superficiale di una funzione di Green con n gambe esterne fissate a $t = 0$ è ridotto di un fattore $(\mu^2)^{-n}$ in confronto al corrispondente valore di bulk. Come conseguenza, si richiedono nuovi fattori di rinormalizzazione esclusivamente per le funzioni di Green a due punti. Se osserviamo più da vicino le funzioni di Green a due punti notiamo che, a causa delle condizioni al contorno del propagatore di Dirichlet, la funzione di correlazione con una gamba esterna fissata alle condizioni iniziali è identicamente nullo:

$$G_{2,0}(x,t;y,0) = \langle \varphi(x,t) \varphi(y,0) \rangle = \langle \varphi(x,t) \varphi_0(y) \rangle = 0. \quad (3.91)$$

Si potrebbe tentare di rinormalizzare la derivata temporale

$$\partial_s G_{2,0}(x,t;y,s)|_{s=0} \langle \varphi(x,t) \dot{\varphi}_0(y) \rangle, \quad (3.92)$$

e in aggiunta la funzione di risposta $G_{1,1}(x,t;y,s)$. In realtà si può dimostrare che, inserita all'interno delle funzioni di Green, vale la seguente uguaglianza:

$$\dot{\varphi}_0(x) = 2\Gamma \tilde{\varphi}_0(x). \quad (3.93)$$

Ne consegue che una sola nuova costante di rinormalizzazione è necessaria per rendere finita la teoria con incorporate le condizioni iniziali. In particolare si pone:

$$\tilde{\varphi}_0 \rightarrow (Z_0 \tilde{Z})^{1/2} \tilde{\varphi}_0. \quad (3.94)$$

Alla luce di quanto detto, le funzioni di correlazioni connesse (incorporando anche le condizioni iniziali determinate dalle inserzioni del campo $\tilde{\varphi}_0$)

$$G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0} = \langle [\varphi]^n [\tilde{\varphi}]^{\tilde{n}} [\tilde{\varphi}_0]^{\tilde{n}_0} \rangle_c \quad (3.95)$$

riscritte in termini delle (3.90) e (3.94) obbediscono alla seguente relazione di rinormalizzazione:

$$G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0} \rightarrow \left(G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0} \right)_b = Z^{n/2} \tilde{Z}^{\tilde{n}/2} (\tilde{Z} Z_0)^{\tilde{n}_0/2} G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}. \quad (3.96)$$

Le equazioni del \mathcal{RG} possono essere derivate sfruttando il fatto che le funzioni di correlazioni “nude” sono indipendenti dalla scala esterna μ introdotta per definire la teoria rinormalizzata:

$$\mu \frac{d}{d\mu} \left(G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0} \right)_b \Big|_0 = 0, \quad (3.97)$$

dove la notazione $|_0$ sta ad indicare che le derivate vanno calcolate a parametri “nudi” fissati. Come vedremo, questa equazione definisce un flusso del \mathcal{RG} nello spazio dei parametri $\{g, \mu, \Gamma\}$. In termini delle quantità rinormalizzate l’equazione (3.97) diviene

$$\left[\mu \partial_\mu + \frac{n}{2} \gamma + \frac{\tilde{n}}{2} \tilde{\gamma} + \frac{\tilde{n}_0}{2} (\tilde{\gamma} + \gamma_0) + \gamma_\Gamma \Gamma \partial_\Gamma + \beta_g \partial_g \right] G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}; g, \mu, \Gamma) = 0, \quad (3.98)$$

dove sono state introdotte le così dette funzioni di Wilson:

$$\begin{aligned} \gamma(g) &= \mu \partial_\mu \ln Z|_0, & \tilde{\gamma}(g) &= \mu \partial_\mu \ln \tilde{Z}|_0, & \gamma_0(g) &= \mu \partial_\mu \ln Z_0|_0 \\ \gamma_\Gamma(g) &= \mu \partial_\mu \ln \Gamma|_0, & \beta_g(g) &= \mu \partial_\mu g|_0, \end{aligned} \quad (3.99)$$

che sono regolari per $\epsilon = 0$.

Per risolvere l’equazione (3.98) si utilizza normalmente il metodo delle caratteristiche. Introduciamo un parametro di scala continuo ℓ , in termini del quale la traiettoria della scala delle masse è $\mu(\ell) = \mu\ell$, con μ che rappresenta la condizione iniziale per $\ell = 1$. Il comportamento infrarosso (IR) si ottiene nel limite $\ell \rightarrow 0$. Incorporando esplicitamente la dipendenza da ℓ nelle funzioni di Wilson, si ottengono delle equazioni differenziali ordinarie per i parametri rinormalizzati:

$$\begin{aligned} \ell \frac{dZ(\ell)}{d\ell} &= Z(\ell) \gamma(\ell), & \ell \frac{d\tilde{Z}(\ell)}{d\ell} &= \tilde{Z}(\ell) \tilde{\gamma}(\ell), & \ell \frac{dZ_0(\ell)}{d\ell} &= Z_0(\ell) \gamma_0(\ell), \\ \ell \frac{d\Gamma(\ell)}{d\ell} &= \Gamma(\ell) \gamma_\Gamma(\ell), & \ell \frac{dg(\ell)}{d\ell} &= \beta(\ell), \end{aligned} \quad (3.100)$$

con $\Gamma(\ell = 1) = \Gamma$, $g(\ell = 1) = g$ etc., e dove le funzioni che compaiono in tali equazioni dipendono da ℓ attraverso $g(\ell)$. L’equazione del \mathcal{RG} per le funzioni di correlazione diviene un’equazione differenziale ordinaria

$$\left[\frac{n}{2} \gamma(\ell) + \frac{\tilde{n}}{2} \tilde{\gamma}(\ell) + \frac{\tilde{n}_0}{2} (\tilde{\gamma}(\ell) + \gamma_0(\ell)) + \ell \frac{d}{d\ell} \right] G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}; g(\ell), \mu(\ell), \Gamma(\ell)) = 0 \quad (3.101)$$

la cui soluzione è

$$G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}; g(\ell), \mu(\ell), \Gamma(\ell)) = G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}; g, \mu, \Gamma) \exp \int_{\ell}^1 \frac{d\ell'}{2\ell'} \{n\gamma(\ell') + \tilde{n}\tilde{\gamma}(\ell') + \tilde{n}_0[\tilde{\gamma}(\ell') + \tilde{\gamma}_0(\ell')]\}. \quad (3.102)$$

Dal punto di vista fisico variare il parametro ℓ significa variare la scala al quale si esplora il modello; il regime infrarosso viene raggiunto per $\ell \rightarrow 0$. I parametri $g(\ell)$ e $\Gamma(\ell)$ possono essere visti come costanti di accoppiamento i cui valori effettivi ad un certo ℓ corrispondono ai valori d'origine ma su una scala di lunghezze e tempi definita da $\mu\ell$. Essi evolvono sotto la trasformazione di scala in accordo alle equazioni (3.100). In particolare, la costante di accoppiamento rinormalizzata $g(\ell)$ cresce per $\ell \rightarrow 0$ se la funzione β è negativa, viceversa decresce. Un punto fisso nella traiettoria di g corrisponde ad uno zero \bar{g} della funzione β ($\beta(\bar{g}) = 0$). Gli zeri per i quali $\beta'(\bar{g}) < 0$ non sono stabili nel limite $\ell \rightarrow 0$: la costante di accoppiamento si allontana dal punto fisso. Diversamente, se $\beta'(\bar{g}) > 0$ lo zero è stabile. Infatti, se linearizziamo l'equazione per $g(\ell)$ in un intorno di uno zero otteniamo:

$$g(\ell) - \bar{g} = (g - \bar{g})\ell^{\beta'(\bar{g})} \quad \ell \ll 1. \quad (3.103)$$

Si assuma di aver trovato un punto di tale tipo (un punto fisso IR-stabile) $g = g^*$; possiamo assegnare alle funzioni di Wilson i loro valori al punto fisso definendo così gli esponenti critici:

$$\begin{aligned} \eta &= \gamma(g^*), & \tilde{\eta} &= \tilde{\gamma}(g^*), & \eta_{\Gamma} &= \gamma_{\Gamma}(g^*) = (\tilde{\eta} - \eta)/2 \\ \eta_0 &= \gamma_0(g^*), & z &= 2 + \eta_{\Gamma}, & \theta &= -\eta_0/2z; \end{aligned} \quad (3.104)$$

inoltre, dall'equazione per $\Gamma(\ell)$ si ottiene $\Gamma(\ell \rightarrow 0) = \Gamma\ell^{z-2}$.

Il comportamento IR si ottiene a partire dalla (3.102) mettendoci al punto fisso stabile:

$$G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}; g, \mu, \Gamma) \simeq \ell^{\frac{n\eta}{2} + \frac{\tilde{n}\tilde{\eta}}{2} + \frac{\tilde{n}_0(\tilde{\eta} + \tilde{\eta}_0)}{2}} G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}; g(\ell), \mu(\ell), \Gamma(\ell)) \quad (3.105)$$

Dall'analisi dimensionale si trova che

$$G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}; g, \mu, \Gamma) = \lambda^{-\frac{n(d-2)}{2} - \frac{\tilde{n}(d+2)}{2} - \frac{\tilde{n}_0(d+2)}{2}} G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x/\lambda, t/\tau\}; g, \mu\lambda, \Gamma\tau/\lambda^2), \quad (3.106)$$

dove λ e τ sono delle unità di misura arbitrarie rispettivamente per le lunghezze ed i tempi. Sostituendo la (3.106) nel lato destro della (3.105), avendo posto $\mu = 1$ e $\Gamma = 1$ e scegliendo $\lambda = (\ell)^{-1}$ e $\tau = \lambda^2\ell^{2-z}$, si ottiene finalmente:

$$G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}) = \ell^{\delta(n,\tilde{n},\tilde{n}_0)} G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{\ell x, \ell^z t\}) \quad \text{per } g = g^*, \quad (3.107)$$

dove³

$$\delta(n, \tilde{n}, \tilde{n}_0) = n \frac{d-2+\eta}{2} + \tilde{n} \frac{d+2+\tilde{\eta}}{2} + \tilde{n}_0 \frac{d+2+\tilde{\eta}+\eta_0}{2}. \quad (3.108)$$

³Dal confronto con la (3.87) si vede che i fattori che moltiplicano gli esponenti n sono proprio le dimensioni di scala dei campi d_{φ} ; in particolare l'analisi \mathcal{RG} modifica le dimensioni canoniche di tali campi introducendo gli esponenti η che per tale motivo prendono il nome di *dimensioni anomale*.

Alla luce di quanto detto, se consideriamo la funzione di correlazione a due punti $C_q(t, s)$ e la funzione di risposta $R_q(t, s)$, dalle equazioni precedenti si ha (per $t > s > 0$)

$$\begin{aligned} C_q(t, s) &\equiv \int d^d x e^{iqx} G_{2,0}^0 = \ell^{\eta-2} C_{\ell^{-1}q}(\ell^z t, \ell^z s), \\ R_q(t, s) &\equiv \int d^d x e^{iqx} G_{1,1}^0 = \ell^{\eta+z-2} R_{\ell^{-1}q}(\ell^z t, \ell^z s); \end{aligned} \quad (3.109)$$

se poniamo $\ell = t^{-1/z}$, la forma di riscaldamento delle funzioni di correlazione può essere riscritta nel modo seguente:

$$\begin{aligned} C_q(t, s) &= t^{(2-\eta)/z} \tilde{F}_C(qt^{1/z}, s/t), \\ R_q(t, s) &= t^{(2-\eta-z)/z} \tilde{F}_R(qt^{1/z}, s/t), \end{aligned} \quad (3.110)$$

dove la differenza sostanziale dalle analoghe funzioni calcolate all'equilibrio è la dipendenza dal rapporto s/t . Si osservi inoltre che le funzioni di scaling \tilde{F}_C e \tilde{F}_R che abbiamo introdotto non ci aspettiamo siano regolari per $s \rightarrow 0$. A partire dalla funzione di correlazione in (3.110), se poniamo $t = s > 0$ otteniamo

$$C_q(t, t) = t^{(2-\eta)/z} \tilde{F}_C(qt^{1/z}, 1), \quad (3.111)$$

da cui ponendo $q = 0$ si ottiene la forma dello scaling temporale della suscettività dinamica

$$\chi(t) = \chi_0 t^{(2-\eta)/z}, \quad (3.112)$$

a meno di correzioni successive allo scaling, e sempre nell'ipotesi in cui t sia distante dalla superficie temporale iniziale ($t = 0$).

Per determinare la forma funzionale delle funzioni di correlazione (3.110) nel caso in cui uno degli argomenti temporali tende a zero bisogna usare l'espansione a brevi distanze temporali. Il punto di partenza è espandere i campi $\varphi(x, s)$ e $\tilde{\varphi}(x, s)$ intorno a $s = 0$. Tenuto conto delle condizioni iniziali $\varphi(x, 0) = \varphi_0(x) = 0$ e della relazione (3.93), per piccoli s si possono formalmente espandere i campi

$$\begin{aligned} \varphi(x, s) &\sim \phi(s) \tilde{\varphi}_0(x) + \dots, \\ \tilde{\varphi}(x, s) &\sim \tilde{\phi}(s) \tilde{\varphi}_0(x) + \dots, \end{aligned} \quad (3.113)$$

con $\phi(s) = a_C s^{1-\theta}$ e $\tilde{\phi}(s) = a_R s^{-\theta}$. Sotto tali ipotesi si ha

$$\begin{aligned} C_q(t, s) &= \phi(s) \langle \varphi(q, t) \tilde{\varphi}_0(-q) \rangle, \\ R_q(t, s) &= \tilde{\phi}(s) \langle \varphi(q, t) \tilde{\varphi}_0(-q) \rangle. \end{aligned} \quad (3.114)$$

Dall'equazione (3.107) può essere determinata la forma riscalante di $\langle \varphi(q, t) \tilde{\varphi}_0(-q) \rangle \equiv G_{1,0}^1(\{q, t\})$ alla criticità

$$G_{1,0}^1(\{q, t\}) = \ell^{-\theta z - (2-z-\eta)} G_{1,0}^1(\{\ell^{-1}q, \ell^z t\}). \quad (3.115)$$

Facendo uso delle espansioni per tempi piccoli unite alla relazione di scaling si ottiene:

$$\begin{aligned} C_q(t, s) &= a_C t^{(2-\eta)/z} (t/s)^{\theta-1} f_C(qt^{1/z}), \\ R_q(t, s) &= a_R t^{(2-\eta-z)/z} (t/s)^\theta f_R(qt^{1/z}). \end{aligned} \quad (3.116)$$

Confrontando queste forme di riscaldamento con la (3.110) si conclude che per $y \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_C(x, y) &\sim a_C y^{-\theta+1} f_C(x), \\ \tilde{F}_R(x, y) &\sim a_R y^{-\theta} f_R(x). \end{aligned} \quad (3.117)$$

Notare che se si pone adesso $s = t$ si riottiene la stessa forma della (3.111), che quindi risulta valida anche per tempi piccoli, non avendo considerato correzioni successive allo scaling.

L'effetto delle condizioni iniziali Nelle relazioni di riscaldamento che abbiamo derivato si fatto uso delle condizioni iniziali $\varphi_0(x) = 0$. Sotto tale ipotesi, la suscettività $\chi(t)$ si è visto non dipendere dall'*intial slip exponent* θ . Se vogliamo studiare come si modificano le forme di riscaldamento sotto la presenza di una magnetizzazione iniziale $a(x)$ differente da zero possiamo farlo incorporando nel funzionale generatore (sempre nella condizione $\tau_0^{-1} = 0$) $a(x)$ come una sorgente ulteriore al tempo $t = 0$:

$$\begin{aligned} W_a[\tilde{h}, h] &= \ln \int d[i\tilde{\varphi}]d[\varphi] \exp \left\{ -S[\tilde{\varphi}, \varphi] \right. \\ &\left. + \int_0^\infty dt \int d^d x (\tilde{h}\tilde{\varphi} + h\varphi) + \int d^d x a(x)\tilde{\varphi}_0(x) \right\} \end{aligned} \quad (3.118)$$

Il parametro d'ordine e la suscettività sono⁴:

$$\begin{aligned} M(t) &\equiv \langle \varphi(x, t) \rangle_a = \left. \frac{\delta W_a}{\delta h(x, t)} \right|_{h=\tilde{h}=0}, \\ \chi(t) &\equiv \langle \varphi(x, t)\varphi(x, t) \rangle_a = \left. \frac{\delta W_a}{\delta h(x, t)\delta \tilde{h}(x, t)} \right|_{h=\tilde{h}=0}. \end{aligned} \quad (3.119)$$

$$(3.120)$$

Espandendo la (3.118) in potenze di $a(x)$, e supponendo $a(x) = a \sim 0$ si ha

$$\begin{aligned} M(t) &= \langle \varphi(x, t) \rangle + a \int d^d y \langle \varphi(x, t)\tilde{\varphi}_0(y) \rangle = a \int d^d y \langle \varphi(x, t)\tilde{\varphi}_0(y) \rangle, \\ \chi(t) &= \langle \varphi(x, t)\varphi(x, t) \rangle + a \int d^d y \langle \varphi(x, t)\varphi(x, t)\tilde{\varphi}_0(y) \rangle = \chi_0 t^{(2-\eta)/z} \\ &+ a \int d^d y \langle \varphi(x, t)\varphi(x, t)\tilde{\varphi}_0(y) \rangle \end{aligned} \quad (3.121)$$

⁴Con tale notazione intendiamo implicitamente $\lim_{(y,s) \rightarrow (x,t)} \langle \varphi(x, t)\varphi(y, s) \rangle_a$.

facendo uso della (3.107) si ottiene per la magnetizzazione

$$M(t) = t^{\theta'} a F_M(t^{\theta'+\beta/\nu z} a), \quad (3.122)$$

e per la suscettività

$$\chi(t) = \chi_0 t^{(2-\eta)/z} \left[1 + at^{\theta'+\beta/\nu z} + \dots \right], \quad (3.123)$$

dove $\theta' \equiv \theta + (2 - z - \eta)/z$, e la funzione F_M ha comportamento asintotico

$$F_M(x) \sim 1/x \quad \text{per } x \rightarrow \infty, \quad \lim_{x \rightarrow 0} F_M(x) = 1. \quad (3.124)$$

In conclusione, la presenza di una piccola magnetizzazione iniziale non nulla si ripercuote sull'andamento temporale di $M(t)$: di fatto, pur essendo al punto critico il sistema inizialmente tende ad ordinarsi (è come se non fosse ancora arrivata l'informazione che ci si trova esattamente a T_c). Ciò può essere compreso se si pensa che, nei primi istanti temporali, il sistema evolve secondo la dinamica di campo medio e, in tale approssimazione la temperatura critica $T_c^{(mf)}$ è maggiore della temperatura a cui abbiamo raffreddato il sistema stesso (T_c): di fatto, ci troviamo in fase ordinata. Diversamente, la suscettività, che presenta già un comportamento dinamico critico non banale senza la necessità di una magnetizzazione iniziale non nulla, incorpora una correzione non analitica al primo ordine in a che dipende anch'essa dall'esponente θ' .

Correzioni allo scaling dovute a τ_0^{-1} Nella sezione precedente, in seguito ad un'analisi dimensionale, abbiamo concluso che τ_0^{-1} è una variabile irrilevante e l'abbiamo trascurata per tutto il calcolo essendo interessati al comportamento critico senza correzioni ulteriori allo scaling. Difatti, è possibile includere esplicitamente le correzioni allo scaling indotte da un $\tau_0^{-1} \neq 0$ se teniamo conto del fatto che per la rinormalizzazione di tale parametro non occorre introdurre nuovi fattori, e si ha:

$$\tau_0 \rightarrow \tau_0^{-1} (Z/\tilde{Z})^{1/2} = Z_\Gamma \tau_0^{-1}. \quad (3.125)$$

In questo senso, se si procede come abbiamo fatto nel paragrafo precedente, possiamo introdurre un'ulteriore funzione di Wilson

$$\gamma_{\tau_0}(g) = \mu \partial_\mu \ln \tau_0|_0 \quad (3.126)$$

e facendo uso del metodo delle caratteristiche, e mettendoci al punto fisso stabile si ottiene il seguente andamento IR:

$$\tau_0^{-1}(\ell \rightarrow 0) = \tau_0^{-1} \ell^{z-2}. \quad (3.127)$$

Dal confronto con l'analisi dimensionale, si ottiene finalmente la forma di riscalamiento della (3.107) con incluse le correzioni allo scaling dovute a τ_0^{-1}

$$G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{x, t\}; \tau_0^{-1}) = \ell^{\delta(n,\tilde{n},\tilde{n}_0)} G_{n,\tilde{n}}^{\tilde{n}_0}(\{\ell x, \ell^z t\}; \ell^z \tau_0^{-1}) \quad \text{per } g = g^*. \quad (3.128)$$

Capitolo 4

Simulazione MC della Dinamica di Rilassamento Fuori Equilibrio

In questo capitolo introduciamo il metodo di simulazione numerica Monte Carlo, la sua implementazione ed i risultati che abbiamo ottenuto relativamente alla dinamica di rilassamento fuori equilibrio nel modello di Blume-Capel in tre dimensioni. Riportiamo le nostre stime dell'esponente dinamico z che, come vedremo, risultano in ottimo accordo con i risultati della FT.

4.1 Tecniche Monte Carlo

La meccanica statistica dei sistemi complessi propone diversi quesiti che sono spesso difficili da risolvere usando l'approccio analitico. Le tecniche di simulazione numerica risultano dunque uno strumento indispensabile per avere una migliore comprensione di tali sistemi. Le aree in cui si possono applicare tali tecniche sono molteplici: spaziano dalla fisica alla chimica, dai sistemi biologici a quelli sociologici ed economici. Il metodo Monte Carlo è una tecnica molto potente per effettuare calcoli molto complessi. In generale, ricade sotto il nome di "metodo Monte Carlo" qualsiasi tecnica di simulazione numerica che fa uso di numeri random per risolvere il problema in questione. In particolare il metodo Monte Carlo propriamente detto è a tutti gli effetti equivalente ad un problema di integrazione. Va detto sin da subito che, quando si tratta di risolvere un problema di integrazione numerica in dimensioni d piccole, tale metodo non è affatto efficiente: infatti, l'errore sulla stima diminuisce come $1/\sqrt{n}$, dove n è il numero di punti in cui viene valutata la funzione, indipendentemente dalla dimensionalità d dell'integrale (questo è essenzialmente il teorema del limite centrale). Ciò in contrasto con i metodi numerici deterministici tradizionali: per esempio, la *regola dei trapezi* converge come $n^{-2/d}$, la *regola di Simpson* come $n^{-4/d}$ e la *regola di Gauss a m -punti* come $n^{-(2m-1)/d}$. È chiaro che per $d = 1$ ciascuno di questi algoritmi sarà migliore del Monte Carlo, mentre per grandi valori di d il metodo Monte Carlo li batte tutti.

In particolare, nei problemi di meccanica statistica si è spesso interessati ad effettua-

re delle integrazioni funzionali; tali integrazioni, discretizzate su reticolo, coinvolgono un altissimo numero di gradi di libertà; il metodo Monte Carlo “statico” non è più efficiente: in questi casi si usa il cosiddetto Monte Carlo “dinamico”.

Per fissare le idee, supponiamo di voler calcolare una quantità della forma

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_i d\phi_i \mathcal{O} e^{-\beta H[\phi]}, \quad (4.1)$$

dove ϕ_i sono i campi di base della teoria, i corre su i siti reticolari, \mathcal{O} è una generica osservabile e Z è la funzione di partizione

$$Z = \int \prod_i d\phi_i e^{-\beta H[\phi]}. \quad (4.2)$$

I campi ϕ_i possono essere sia continui sia discreti; in quest’ultimo caso gli integrali vanno rimpiazzati da somme. Per esempio, per il modello di Ising si avrebbe

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O}[\sigma] \exp \left\{ -\beta \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right\}, \quad (4.3)$$

dove $\sum_{\{\sigma\}}$ indica la somma su tutte le possibili configurazioni degli spin, con σ_i che può assumere i valori ± 1 .

Per calcolare $\langle \mathcal{O} \rangle$ si potrebbe provare ad usare il MC statico: nel caso di Ising, bisognerebbe generare una successione di configurazioni random $\{\sigma\}_{i=1,\dots,N}$ in cui ciascuna configurazione è ottenuta scegliendo in maniera casuale il valore dello spin in ciascun sito reticolare. Quindi, si avrebbe

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N \mathcal{O}[\{\sigma\}_i] e^{-\beta H[\{\sigma\}_i]}}{\sum_{i=1}^N e^{-\beta H[\{\sigma\}_i]}}. \quad (4.4)$$

Questo metodo è certamente corretto ma, ai fini dello studio che vogliamo effettuare (dinamica di rilassamento), risulta totalmente inutile: la (4.4) ci permette di calcolare i valori di aspettazione di un’osservabile generica quando il sistema ha già raggiunto l’equilibrio termodinamico alla temperatura β . D’altra parte, anche nel caso in cui si volesse studiare il sistema all’equilibrio, il metodo appena esposto risulta totalmente inefficiente. Infatti, dalla meccanica statistica sappiamo che le configurazioni che danno un contributo rilevante alla (4.4) sono quelle che hanno energia E tale che $E_m - \Delta E \leq E \leq E_m + \Delta E$, dove E_m è il valore medio dell’energia ad una data temperatura β ; ΔE può essere preso multiplo della deviazione standard di E_m ed ha la proprietà di andare a zero nel limite in cui il volume tende ad infinito. Si può aggirare il problema nel modo seguente: possiamo produrre delle configurazioni distribuite con probabilità $P = \exp(-\beta H)/Z$ e quindi avere una stima di $\langle \mathcal{O} \rangle$ come $\sum_{i=1}^N \mathcal{O}[\{\sigma\}_i]/N$. Ancora una volta, non abbiamo un modo per produrre delle sequenze di configurazioni scorrelate a partire da una precisa distribuzione di probabilità. Possiamo però fare uso delle nozioni acquisite sulle catene di Markov per generare delle sequenze di configurazioni la cui distribuzione

di probabilità tenda, al crescere delle “estrazioni”, verso la distribuzione di probabilità all’equilibrio. Se partiamo da una configurazione che non è all’equilibrio, le estrazioni della catena di Markov riproducono, in termini stocastici, una dinamica di rilassamento alla Langevin; una volta raggiunto l’equilibrio, avremo una serie di configurazioni la cui distribuzione di probabilità è quella voluta; unico punto debole: tali configurazioni, per costruzione, non sono completamente random ma dipendono dalle configurazioni precedenti.

4.1.1 L’algoritmo ed il generatore di numeri pseudorandom

L’algoritmo che sta alla base della simulazione MC dinamica che abbiamo effettuato può essere schematizzato nel modo seguente:

1. Inizialmente il sistema viene preparato in uno stato iniziale con configurazione $\{\sigma\}_0$.
2. Viene selezionato il sito reticolare al passo k usando il metodo del *checkerboard*: si tratta di percorrere in maniera “alternata” i siti del reticolo; se definiamo la parità di un sito reticolare come $P(i, j, k) = (-1)^{i+j+k}$, si effettua una selezione sequenziale su i siti con parità $+1$ e quindi, sempre sequenzialmente, su quelli con parità -1 .
3. Una volta selezionato il sito reticolare, si effettua una proposta random per il nuovo valore della variabile.
4. La nuova configurazione così generata viene accettata o rigettata secondo l’algoritmo *Metropolis*:

$$P(\{\sigma\} \rightarrow \{\sigma\}') = \min \left\{ 1, e^{-[H(\{\sigma\}') - H(\{\sigma\})]} \right\}, \quad (4.5)$$

dove la dipendenza dai parametri che determinano lo stato termodinamico del sistema è implicitamente contenuta in H .

5. Gli steps 2 – 4 vengo ripetuti un numero di volte pari al volume del reticolo prima di effettuare una misura delle osservabili di interesse. In questo modo si definisce l’unità di tempo MC pari ad un upgrade dell’intero reticolo.

Per quanto riguarda il generatore di numeri pseudorandom, abbiamo implementato *ex novo* in C++ la versione a 64bit del generatore *Mersenne-Twister* [29, 30] MT19937-64 ed abbiamo effettuato dei test per misurarne la bontà.

4.2 Modello ed osservabili dinamiche

Lo studio MC della dinamica di rilassamento di un sistema con parametro d’ordine non conservato (modello A) è stato fatto prendendo come modello microscopico il

modello di *Blume-Capel* (che rientra nella classe d'universalità del modello di Ising). L'hamiltoniana microscopica è:

$$H = -\beta \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + D \sum_i s_i^2, \quad (4.6)$$

dove le variabili s_i assumono valori nell'insieme $\{-1, 0, +1\}$, e l'indice i scorre su un reticolo cubico di lunghezza L con condizioni periodiche al contorno. I parametri β e D sono stati accordati in maniera tale da portare il sistema al punto critico e ridurre gli effetti di *finite size* (per maggiori dettagli si rimanda al paragrafo 2.3.1); dalla letteratura[8, 9, 10] la migliore stime del parametro improved D^* risulta:

$$D^* = 0.641(8); \quad (4.7)$$

abbiamo quindi fissato nel programma di simulazione il valore di D uguale a quello riportato sopra, e ci siamo posti alla temperatura critica corrispondente $\beta_c = 0.3856717$. Su tale modello "improved" abbiamo misurato la *magnetizzazione*

$$M(t) = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i s_i(t) \right\rangle, \quad (4.8)$$

la *suscettività* (a meno del fattore moltiplicativo β)

$$\chi(t) = \frac{1}{V} \left\langle \left(\sum_i s_i(t) \right)^2 \right\rangle, \quad (4.9)$$

dove V è il volume e l'indice i corre sull'intero reticolo; infine abbiamo misurato il *fattore di struttura dinamico* $C(q, t)$, calcolato ad impulso trasferito minimo $|q| = 2\pi/L$

$$C(t) = \frac{1}{3} \langle C_i(t) + C_j(t) + C_k(t) \rangle \quad (4.10)$$

dove

$$C_x(t) = \frac{1}{L^3} \left| \sum_{i,j,k} e^{2\pi i x/L} s_{ijk}(t) \right|^2 \quad \text{con } x = i, j, k. \quad (4.11)$$

Come si evince dalla (4.10), abbiamo mediato sulle tre direzioni spaziali poiché il sistema è invariante sotto permutazione degli assi; ciò permettendo una migliore statistica. A partire dalla (4.9) e dalla (4.10), è possibile determinare la lunghezza di correlazione ξ usando la forma discretizzata

$$\xi(t) = \sqrt{\frac{\chi(t)/C(t) - 1}{4 \sin^2(\pi/L)}}. \quad (4.12)$$

Scaling della suscettività Usando i metodi del \mathcal{RG} dinamico del capitolo precedente, e tenuto conto delle eventuali correzioni ulteriori allo scaling derivanti dalle proprietà statiche della classe di universalità tipo-Ising, ci aspettiamo che $\chi(t)$ nel limite $L \rightarrow \infty$ cresca con il tempo MC t come[16]

$$\chi(t) = \chi_0 t^\rho F_\chi(\mu_1 t^{-v_1}, \mu_2 t^{-v_2}, \dots, \mu_n t^{-v_n}; \mu_{\tau_0} t^{-1}), \quad (4.13)$$

dove[9]

$$\rho = \frac{2 - \eta}{z}, \quad \eta = 0.0364(2). \quad (4.14)$$

La F_χ è una funzione analitica dei propri argomenti; i campi riscalandi μ_i parametrizzano le correzioni successive allo scaling presenti già nella classe d'universalità statica, mentre μ_{τ_0} è un ulteriore campo riscalande legato alla dinamica fuori equilibrio (si veda il paragrafo “Correzioni allo scaling dovute a τ_0^{-1} ” in 3.3.4). In particolare, tenendo solo le prime due correzioni statiche e sviluppando in serie di Taylor si ottiene:

$$\begin{aligned} \chi(t) = & \chi_0 t^\rho \left(1 + C_{11} t^{-v_1} + C_{12} t^{-2v_1} + \dots + C_{21} t^{-v_2} + C_{22} t^{-2v_2} + \dots \right. \\ & \left. + C_1^{(\tau_0)} t^{-1} + C_2^{(\tau_0)} t^{-2} + \dots \right). \end{aligned} \quad (4.15)$$

In accordo con l'analisi perturbativa FT, gli esponenti legati alle correzioni successive allo scaling statiche sono gli stessi di quelli che compaiono nelle funzioni di correlazione all'equilibrio; ci aspettiamo quindi:

$$v_1 = \frac{\omega_1}{z} \simeq 0.42(2), \quad v_2 = \frac{\omega_2}{z} \simeq 0.83(5), \quad (4.16)$$

dove abbiamo usato [4, 31, 32] $\omega_1 = 0.84(4)$, $\omega_2 \approx 2\omega_1 = 1.67(11)$ e $z = 2$.¹ Dal momento che, usando la (4.7), il nostro modello risulta “improved”, le correzioni allo scaling proporzionali a t^{-nv_1} sono trascurabili (questo poiché dipendono dalla differenza $D - D^*$ che risulta tanto più piccola quanto maggiore è la vicinanza al valore “improved” esatto); inoltre, le correzioni successive dovute al parametro τ_0^{-1} sono trascurabili se confrontate con quelle introdotte dall'esponente v_2 . D'ora in avanti, possiamo porre $\mu_{\tau_0} = 0$.

L'equazione (4.15) è valida solo nel limite di volume infinito. Per un sistema di dimensioni finite L ci aspettiamo che la suscettività riscali secondo la forma seguente:

$$\chi(t, L) = \chi_0 t^\rho E_0(tL^{-z}) (1 + C_{21} t^{-v_2} E_1(tL^{-z}) + \dots), \quad (4.17)$$

dove ci siamo messi già nelle condizioni “improved” e trascurato le correzioni dovute a τ_0^{-1} . Le $E_n(x)$ sono funzioni universali che soddisfano le condizioni:

$$\begin{aligned} E_n(0) &= 1, \\ E_0(x) &\sim x^{-\rho}, \quad E_{n \neq 0}(x) \sim x^{nv_2}, \quad \text{per } x \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (4.18)$$

¹Aver usato dei valori approssimativi per gli esponenti legati alle correzioni successive allo scaling e, soprattutto, aver usato per l'esponente z il valore di campo medio, non comporta alcuna perdita di validità dell'analisi dei risultati delle simulazioni.

4.3 Risultati numerici

Abbiamo effettuato simulazioni fuori equilibrio su reticoli tridimensionali di dimensioni lineari $L = 32, 48, 64$ e 96 partendo da una configurazione iniziale ad alta temperatura con magnetizzazione $M(t = 0) = M_0 = 0$ e correlazioni spaziali a corto range. In particolare, la magnetizzazione iniziale è stata preparata scegliendo, per ogni sito reticolare $\{i, j, k\}$, il valore da assegnare alla variabile σ_{ijk} in maniera equiprobabile tra i valori permessi $\{-1, 0, +1\}$. A partire da questo stato, il sistema viene lasciato evolvere secondo le modalità esposte nel paragrafo 4.1.1. Come già detto, l'unità temporale t è definita come un upgrade completo di tutti gli spin del reticolo. Il processo di simulazione è stato portato avanti fino al tempo massimo $t_{MAX} = 400$ per $L = 32, 48, 64$ e $t_{MAX} = 700$ per $L = 96$ (in quest'ultimo caso abbiamo preso misure ogni 2 upgrade del reticolo). L'intera simulazione è stata ripetuta, a partire da configurazioni iniziali differenti, per un numero di volte pari a 10^5 (per $L = 32$ e $L = 96$) e $2 \cdot 10^5$ (per $L = 48, 64$); tutto ciò per avere una buona statistica e poter effettuare una stima degli errori.²

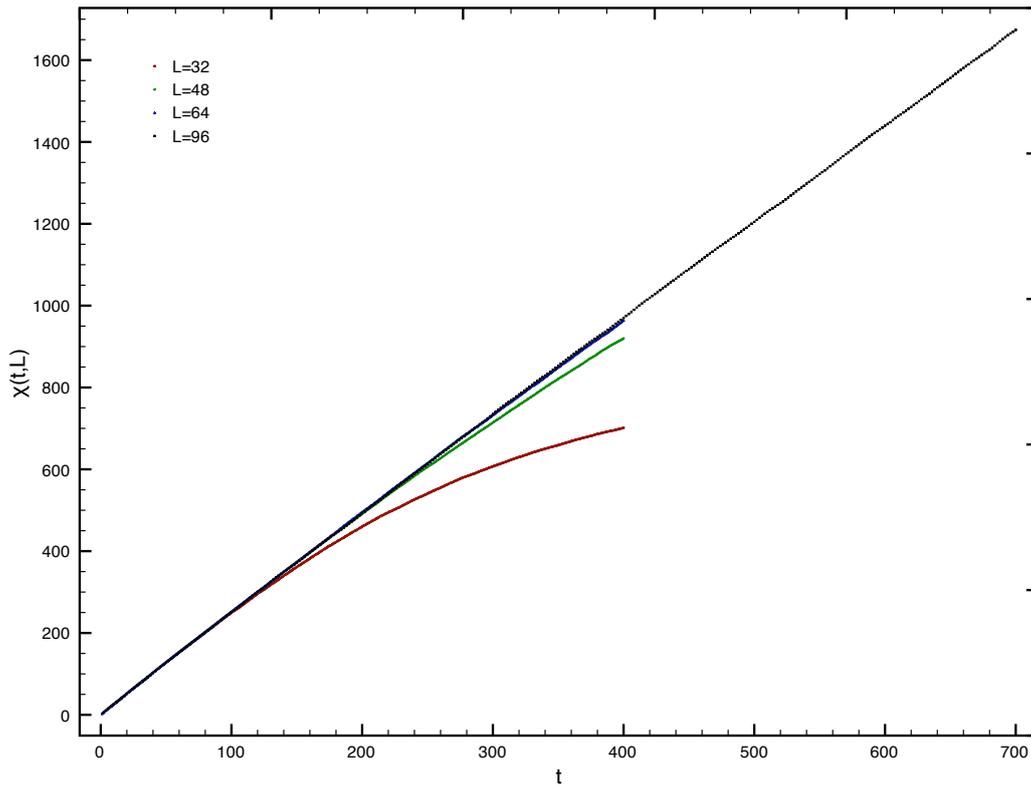


Figura 4.1: Andamento temporale di $\chi(t, L)$.

²Per le tecniche di analisi statistica da noi usate si rimanda all'appendice.

4.3.1 La suscettività: calcolo dell'esponente dinamico

Se ci teniamo nella (4.15) esclusivamente la correzione principale allo scaling per un confronto con i dati raccolti, possiamo scrivere:

$$\chi(t) = \chi_0 t^\rho (1 + C_{21} t^{-v_2}). \quad (4.19)$$

A partire da questa, possiamo definire un *esponente effettivo*

$$\rho_{eff}(t) \equiv \frac{\ln [\chi(2t)/\chi(t)]}{\ln 2}, \quad (4.20)$$

che si comporta per $t \rightarrow \infty$ come

$$\rho_{eff}(t) = \rho + C_\rho t^{-v_2} + \dots, \quad \text{con} \quad C_\rho = \frac{C_{21}(2^{-v_2} - 1)}{\ln 2}. \quad (4.21)$$

In un reticolo finito la relazione precedente va sostituita con

$$\rho_{eff}(t, L) = \rho + e_0(tL^{-z}), \quad (4.22)$$

dove abbiamo trascurato le correzioni allo scaling per grandi t (dal momento che decadono come t^{-v_2}) ed $e_0(x)$ essendo una funzione universale (normalizzazione a parte) che presenta il comportamento asintotico:

$$e_0(0) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} e_0(x) = -\rho. \quad (4.23)$$

In Figura 4.1 riportiamo $\chi(t, L)$ per $L = 32, 48, 64, 96$. Le quattro curve, corrispon-

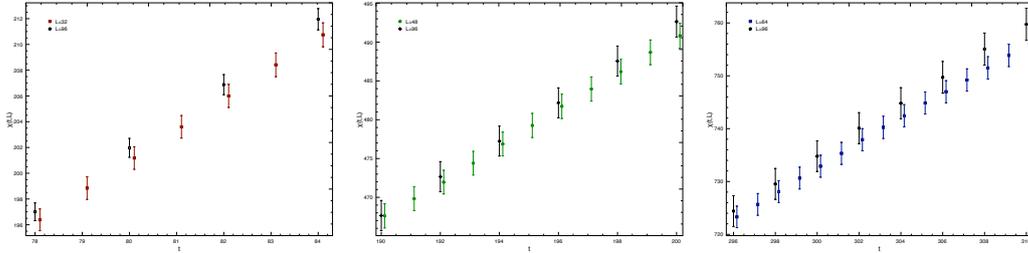


Figura 4.2: Particolare della $\chi(t, L)$ in corrispondenza dell'istante temporale in cui avviene la separazione dal limite termodinamico.

denti alle differenti dimensioni del reticolo, risultano inizialmente sovrapposte, quindi si separano al comparire degli effetti di *finite size* (i particolari sono rappresentati in Figura 4.2). Tali effetti sono trascurabile all'interno di un intervallo temporale che dipende dalle dimensioni del reticolo e, per ciascun valore di L , $\chi(t, L)$ segue la curva corrispondente al limite termodinamico ($L \rightarrow \infty$) fino ad un certo $t_{max}(L)$. Per visualizzare meglio gli effetti dovuti alle correzioni successive allo scaling (molto presenti per tempi $t \rightarrow 0$) e gli effetti di *finite size* (che invece compaiono quando $t \rightarrow \infty$), riportiamo in Figura 4.3 l'esponente effettivo $\rho_{eff}(t, L)$. Anche relativa-

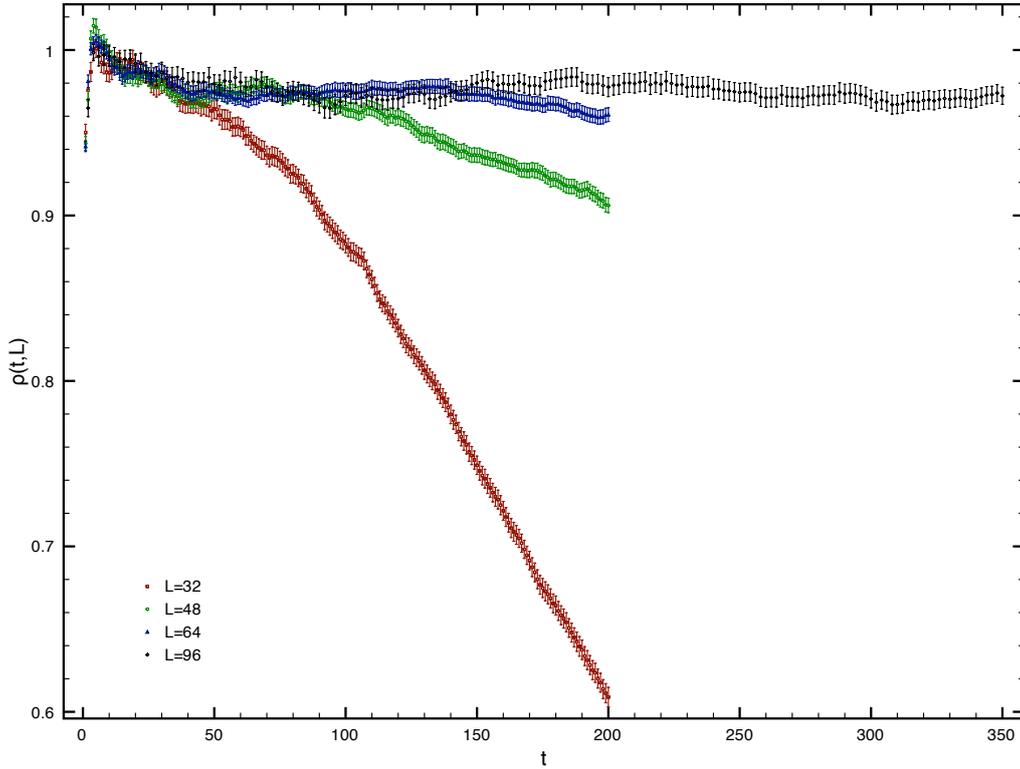


Figura 4.3: Esponente effettivo $\rho(t, L)$ per $L = 32, 48, 64, 96$.

mente all'andamento di $\rho_{eff}(t, L)$ si può dire quanto detto per la suscettività: le curve risultano sovrapposte fino ad un certo tempo massimo che dipende dalle dimensioni lineari del reticolo. In particolare, tenuto conto della (4.20), gli effetti di *finite size* si manifestano in $\rho_{eff}(t, L)$ ad un tempo dimezzato rispetto a quanto accade in $\chi(t, L)$. Dalla Figura 4.3 si vede che:

- La curva $\rho_{eff}(t, 32)$ si separa dall'andamento critico corrispondente al limite di volume infinito per un tempo che ricade nell'intervallo (35, 45) a cui corrisponde un tempo massimo $t_{max}(L = 32) \approx 80$.
- La curva $\rho_{eff}(t, 48)$ comincia ad allontanarsi visibilmente dall'andamento limite in corrispondenza di valori temporali nell'intervallo (80, 100) a cui corrisponde un tempo massimo $t_{max}(L = 48) \approx 180$.
- La curva $\rho_{eff}(t, 64)$ invece comincia ad allontanarsi visibilmente dall'andamento limite in corrispondenza di valori temporali nell'intervallo (140, 160) a cui corrisponde un tempo massimo $t_{max}(L = 64) \approx 300$.
- Per quanto riguarda la curva $\rho_{eff}(t, 96)$, se gli effetti di *finite size* sono consi-

stenti con la (4.22) ci aspettiamo

$$t_{max}(L = 96) = t_{max}(L) \left(\frac{96}{L} \right)^z, \quad (4.24)$$

da cui, usando le stime precedenti e per z l'approssimazione di campo medio si avrebbe:

$$L = 32 \rightarrow t_{max}(96) \approx 720 \quad (4.25)$$

$$L = 48 \rightarrow t_{max}(96) \approx 720 \quad (4.26)$$

$$L = 64 \rightarrow t_{max}(96) \approx 675 \quad (4.27)$$

D'altra parte, se facciamo riferimento alla Figura 4.4 in cui mostriamo i primi stadi dell'evoluzione temporale di $\rho_{eff}(t, L)$, risultano evidenti delle deviazioni da un comportamento costante che sono il sintomo della presenza di correzioni successive allo scaling. Ad esclusione dei primissimi istanti temporali (indicativamente per i primi 5 sweeps del reticolo), in cui è presente ancora una forte dipendenza dagli aspetti microscopici del modello, è necessaria la presenza di un termine correttivo della forma $t^{-\alpha}$ come in (4.21). In prima approssimazione, possiamo dire che tali

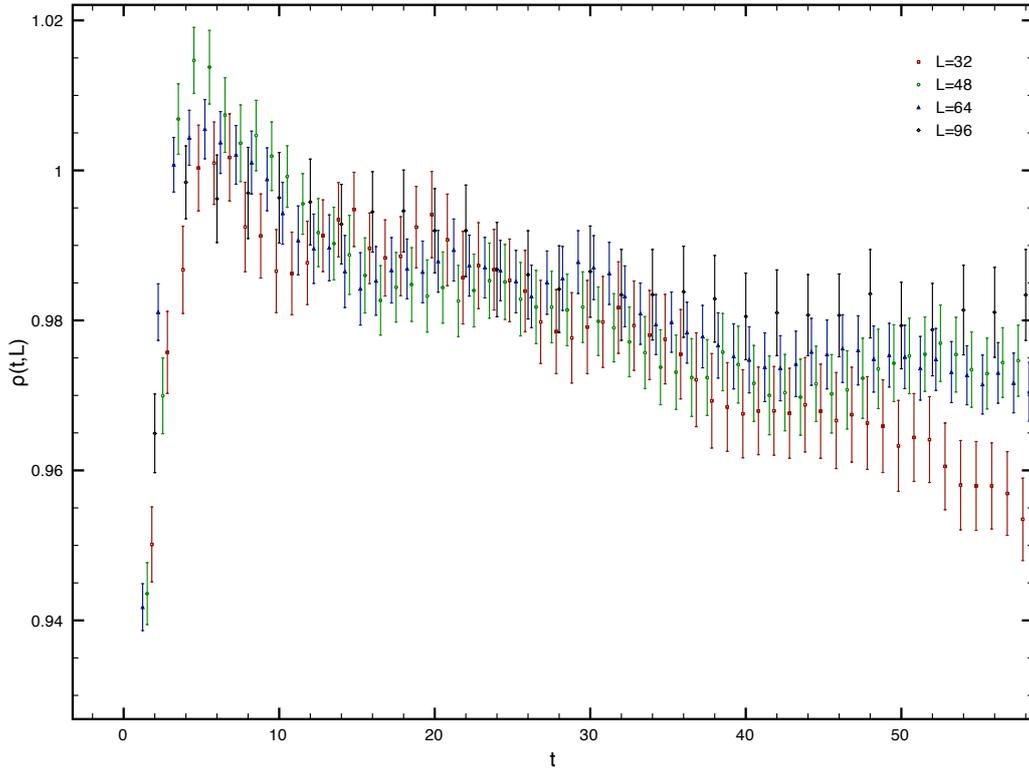


Figura 4.4: Particolare di $\rho_{eff}(t, L)$ in cui sono evidenti le correzioni successive allo scaling. In corrispondenza dello stesso istante temporale t i dati per i tre valori di L sono stati spostati per permettere una maggiore chiarezza.

correzioni risultano trascurabili per $t \gtrsim 40$. In questo senso, un'estrapolazione dell'esponente ρ (e quindi z), che trascuri tali correzioni non è permessa sul reticolo $L = 32$; per tale reticolo infatti, gli effetti di *finite size* si sovrappongono a quelli introdotti dalle correzioni successive allo scaling.

Stima di z con correzioni allo scaling Per determinare l'esponente ρ abbiamo effettuato un'analisi della suscettività che tenesse conto delle correzioni successive allo scaling. Questa analisi è anche servita per individuare con maggiore sicurezza il tempo oltre il quale è possibile dimenticarsi di tali correzioni.

Se prendiamo il logaritmo della (4.19) si ha, nel limite di $t^{-\nu_2} \rightarrow 0$

$$\ln \chi(t) = \ln \chi_0 + \rho \ln t + C_{21} t^{-\nu_2}. \quad (4.28)$$

In scala $\log - \log$ abbiamo effettuato un fit³ dei dati, per $L = 48, 64, 96$ con la funzione:

$$y(x) = a + bx + cx^{-0.83}. \quad (4.29)$$

In particolare, abbiamo definito l'intervallo temporale (t_{min}, t_{max}) sul quale effettuare il fit scegliendo come estremo superiore $t_{max}(L = 48) = 160$ e $t_{max}(L = 64) = 240, 280$ e $t_{max}(L = 96) = 500, 700$; l'estremo inferiore invece si è fatto variare in $(5, t_{max}/2)$. In Figura 4.6 sono riportati i risultati del fit relativamente ai coefficiente ρ e C_{21} . Dall'analisi di tali risultati si vede che per $t_{min} \gtrsim 40$ il coefficiente delle correzioni successive allo scaling è compatibile con zero. D'altra parte, riportiamo in Tabella 4.1 le stime per l'esponente ρ per diversi valori di L e t_{max} che tengono conto delle correzioni successive allo scaling. I dati corrispondenti a valori di L differenti

t_{max}	$L = 48$	$L = 64$	$L = 96$
160	0.970(7)	-	-
240	-	0.971(5)	-
280	-	0.973(5)	-
500	-	-	0.973(6)
700	-	-	0.973(6)

Tabella 4.1: *Esponente ρ della suscettività per differenti dimensioni del reticolo e tempi t_{max} . Stime effettuate tenendo conto delle correzioni allo scaling.*

sono scorrelati poiché sono il risultato di simulazioni distinte. Essendoci limitati ad effettuare i fit in opportuni intervalli temporali in cui non sono presenti gli effetti di *finite size*, non vi sono segni di una dipendenza dalle dimensioni del reticolo: i valori tabulati sono compatibili tra loro. Queste considerazioni ci hanno permesso di dare una stima di ρ per $L = \infty$ effettuando una media tra i valori corrispondenti

³Dal momento che i dati risultano parzialmente correlati, la stima degli errori sui parametri viene fatta utilizzando il metodo del *jackknife*. Per maggiori dettagli si rimanda all'appendice.

t_{max}	$L = 48$	$L = 64$	$L=96$
160	0.975(4)	-	-
240	-	0.977(3)	-
280	-	0.976(3)	-
500	-	-	0.976(3)
700	-	-	0.975(3)

Tabella 4.2: *Esponente ρ della suscettività per differenti dimensioni del reticolo e tempi t_{max} . Stime effettuate per $t > 40$ trascurando le correzioni allo scaling.*

a $L = 64, 96$ (ritenendoli più affidabili); da ciò abbiamo ottenuto:

$$\rho = 0.973(4), \quad (4.30)$$

da cui, usando la relazione (4.14), si ottiene la stima definitiva per *l'esponente dinamico* z :

$$z = 2.018(8). \quad (4.31)$$

Per quanto riguarda il coefficiente C_{21} abbiamo ottenuto il valore seguente:

$$C_{21} = -0.25(15). \quad (4.32)$$

Stima di z senza correzioni allo scaling Alla luce di quanto detto nel paragrafo precedente, per la stima dell'esponente ρ abbiamo usato intervalli temporali per i quali è lecito trascurare le correzioni successive allo scaling introdotte dal termine $t^{-0.83}$. Così facendo abbiamo usato la (4.29) avendo posto nella stessa $c = 0$. Per aver un maggior controllo sui risultati ci siamo preoccupati di variare l'intervallo (t_{min}, t_{max}) , ciò per garantire che la stima ottenuta fosse sufficientemente stabile alle variazioni dello stesso. Riportiamo in Figura 4.5 i risultati del fit.

In Tabella 4.2 riportiamo le stime e gli errori associati all'esponente ρ per i differenti valori di L e t_{max} . Considerazioni analoghe a quelle fatte nel paragrafo precedente ci hanno permesso di dare una stima di ρ per $L = \infty$:

$$\rho = 0.975(2), \quad (4.33)$$

da cui

$$z = 2.014(4). \quad (4.34)$$

Sulla base delle considerazioni fatte, e in virtù della maggiore affidabilità del risultato che tenga conto delle correzioni successive allo scaling, per quanto i risultati di entrambe le analisi (con e senza correzioni allo scaling) risultino perfettamente compatibili, la nostra stima dell'esponente dinamico z è:

$$z = \mathbf{2.018(8)}. \quad (4.35)$$

Proprietà di scaling: check dei risultati Una volta ottenuta la stima (4.35) dell'esponente dinamico z , abbiamo effettuato dei controlli ulteriori per verificare la correttezza delle ipotesi di riscaldamento delle osservabili esaminate. In particolare in Figura 4.7 mostriamo $\rho_{eff}(t, L)$ in funzione di $t' \equiv t(L/96)^{-z}$. Si vede che le curve corrispondenti a valori differenti di L , nel limite $t \rightarrow \infty$, tendono a sovrapporsi mostrando un comportamento universale consistente con la (4.22).

Infine, in Figura 4.8 mostriamo $\rho_{eff}(t, L)$ per $L = 48, 64, 96$ in funzione di $t'' \equiv t^{-v_2}$ con $v_2 = 0.83$. Gli effetti di *finite size* sono trascurabili $t^{-v_2} > t_{max}(L)^{-v_2} \approx 0.015, 0.009, 0.004$ rispettivamente per $L = 48, 64, 96$. I dati che soddisfano tale disuguaglianza chiaramente seguono un'unica curva, che ci aspettiamo abbia la forma predetta dalla (4.21) (ad esclusione sempre dei primissimi istanti temporali in cui sono presenti ancora gli effetti di una dinamica microscopica non universale). In particolare, per tracciare l'andamento corrispondente alle curve riportate in figura, abbiamo usato la costante $C_\rho = 0.16(9)$ ottenuta usando il risultato $C_{21} = -0.25(15)$ preso dal fit mostrato in Figura 4.6; in particolare, l'andamento delle curve tracciate segue la relazione $y(x) = 0.973(4) + 0.16x$.

4.3.2 Fattore di struttura e lunghezza di correlazione

I risultati ottenuti nella sezione precedente possono essere messi a confronto con il comportamento di $\xi(t, L)$ (Figura 4.9). In questo caso, come abbiamo già detto, non abbiamo usato la lunghezza di correlazione per effettuare un'ulteriore stima dell'esponente dinamico a causa della maggiore sensibilità agli effetti di *finite size* che tale osservabile mostra. Ci siamo dunque limitati a mostrarne la compatibilità con i dati già in nostro possesso. In particolare, nel sottografico dell'immagine 4.9, aver riscaldato la lunghezza di correlazione di un fattore L ci permette di visualizzare immediatamente quando ξ raggiunge un valore confrontabile con le dimensioni lineari del reticolo. Dal confronto parallelo di tale osservabile con le curve della suscettività si evince che, per tempi tali da garantire $\xi(t, L)/L \lesssim 0.22$, le curve della suscettività $\chi(t, L)$ coincidono entro gli errori associati. La sottile striscia grigia rappresenta l'intervallo di valori entro il quale cominciano a manifestarsi sulla $\chi(t, L)$ gli effetti di *finite size* (in corrispondenza di tale intervallo i particolari della $\chi(t, L)$ sono mostrati in Figura 4.2). Nel riquadro principale della stessa figura abbiamo riportato la lunghezza di correlazione in scala $\log - \log$; la linea in rosso rappresenta l'andamento temporale predetto dalle stime effettuate nella sezione precedente. Come si vede, le curve risultano parallele alla linea guida fino ad un certo istante temporale, discostandosi quindi dal limite termodinamico al crescere del tempo MC.

Come già detta la sensibilità della lunghezza di correlazione alle dimensioni lineari del reticolo si traduce in una forte deviazione dal limite termodinamico già da istanti temporali più piccoli rispetto a quanto accade alla $\chi(t, L)$. In particolare, la crescita di $\xi(t, L)$ presenta delle caratteristiche peculiari:

- Al crescere di L la curva cresce nel tempo complessivamente più lentamente; ci si aspetta che tenda a sovrapporsi all'andamento limite individuato da $\xi_\infty(t)$.

- Quanto detto è vero fino a che $\xi(t, L) \ll L$. Da un certo istante temporale in poi gli effetti di *finite size* diventano intensi e smorzano fortemente la crescita della suscettività facendola tendere ad un limite asintotico. Quanto detto si vede bene in $\xi(t, 32)$: essa inizialmente cresce più rapidamente delle altre due, quindi, si vede un netto cambiamento di tendenza che porta la curva a intersecare la $\xi(t, 48)$. Verosimilmente, se avessimo collezionato più istanti temporali, avremmo visto l'intersezione di tutte le curve per i differenti valori di L .
- Dal *finite size scaling* sappiamo che ξ/L alla criticità è \mathcal{RG} invariante. Ci aspettiamo quindi che, nel limite di $t \rightarrow \infty$ (quando si raggiunge cioè l'equilibrio critico)

$$\xi(t, L) \rightarrow \xi^* L. \quad (4.36)$$

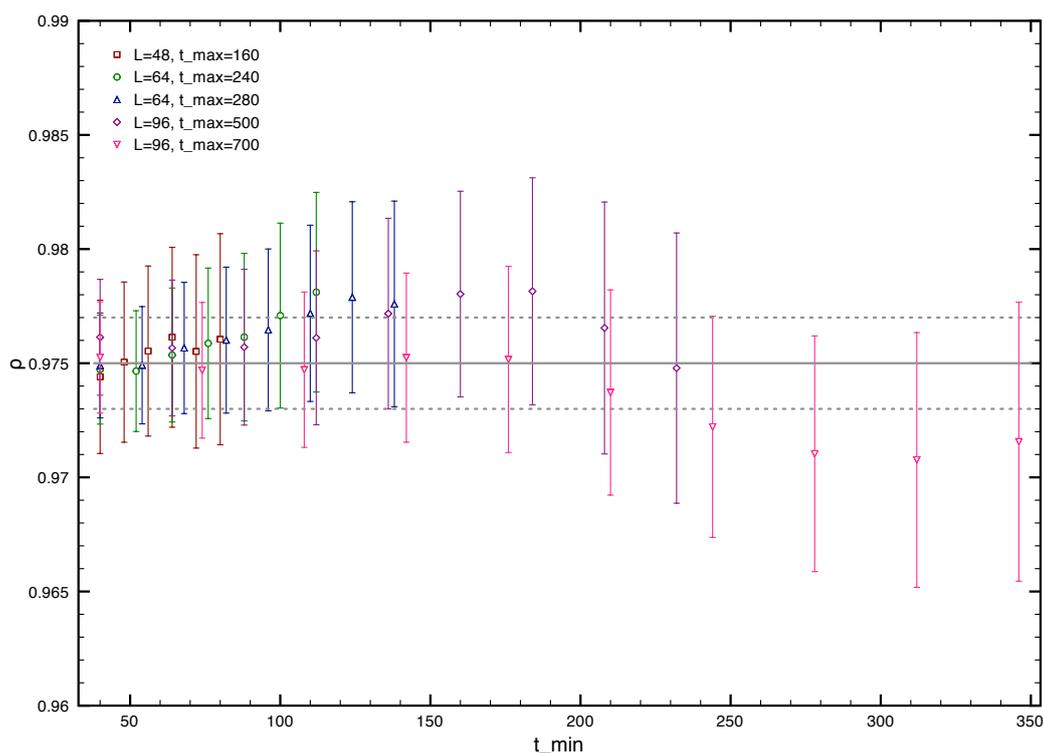


Figura 4.5: Risultati del fit di ρ per $40 < t_{min} \leq t \leq t_{max}$ senza correzioni allo scaling, per $L = 48, 64, 96$. Le linee individuano la stima finale (4.33) per $L = \infty$.

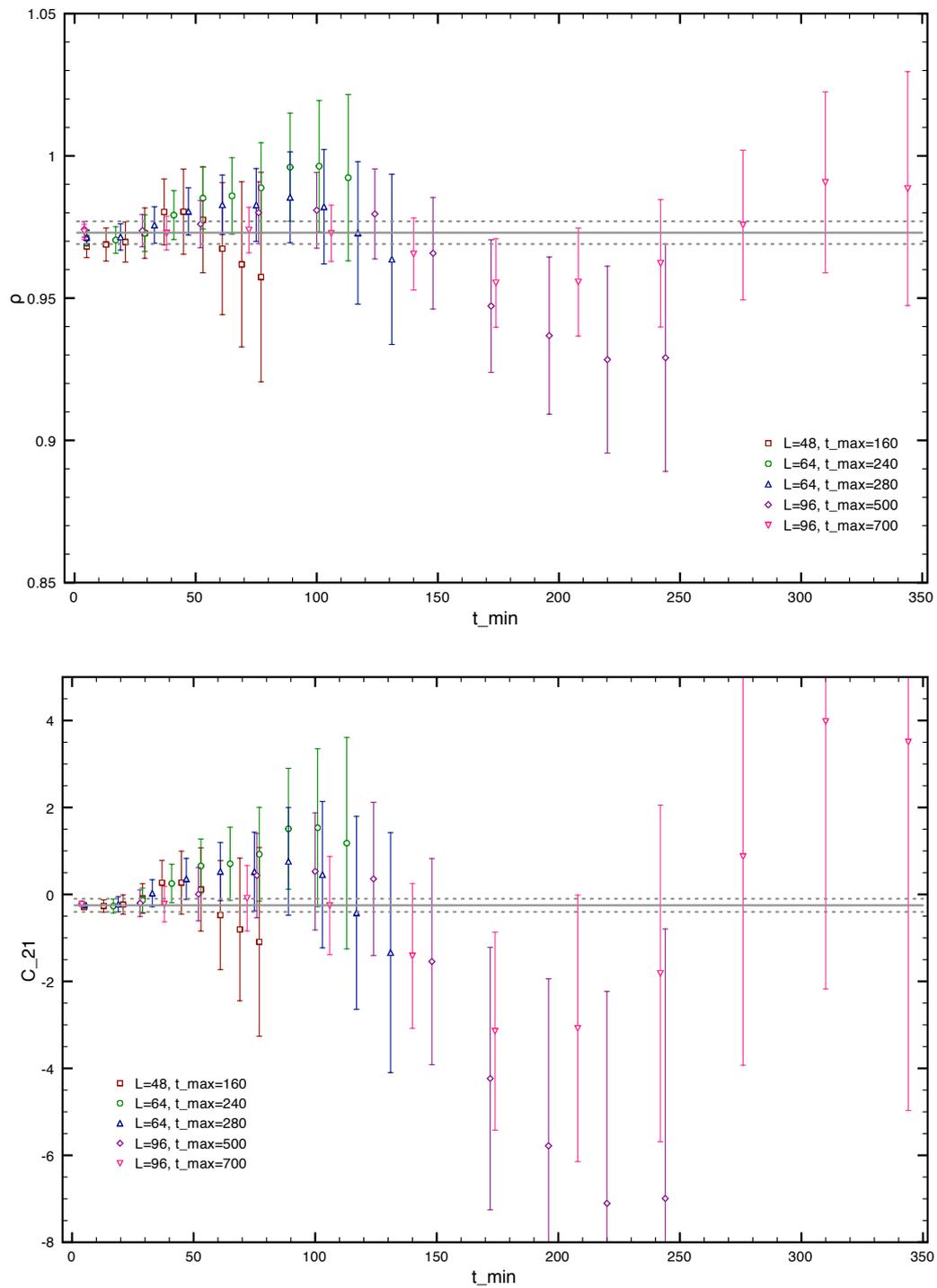


Figura 4.6: Risultati del fit con correzioni allo scaling (4.29) per $t_{\min} \leq t \leq t_{\max}$, per $L = 48, 64, 96$. Le linee individuano le stime finali (4.30) e (4.32) per $L = \infty$.

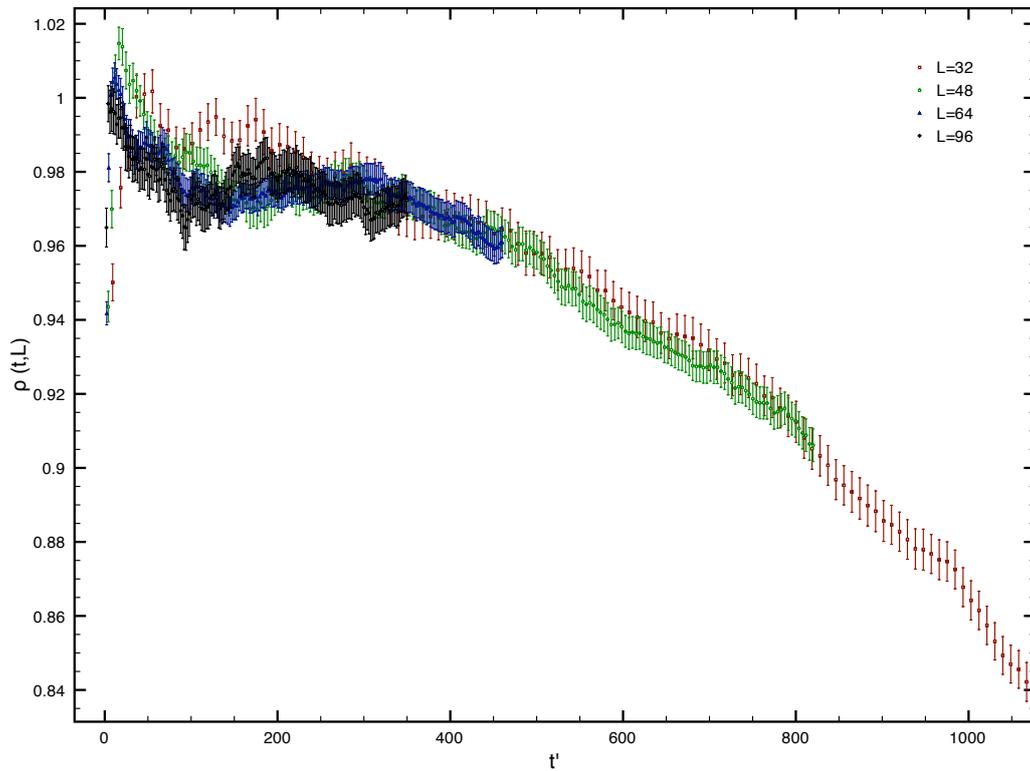


Figura 4.7: L'esponente effettivo $\rho_{eff}(t, L)$ in funzione di $t' \equiv t(L/96)^{-z}$

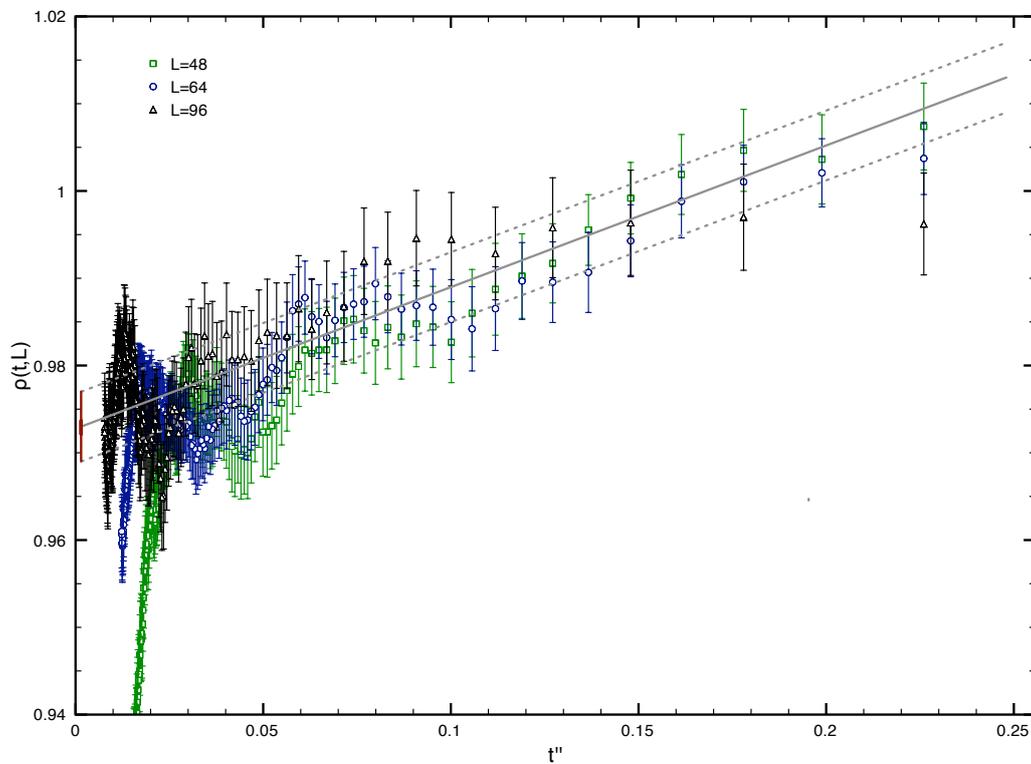


Figura 4.8: L'esponente effettivo $\rho_{eff}(t, L)$ in funzione di $t'' \equiv t^{-v_2}$ con $v_2 = 0.83$. Le linee sono state tracciate per guidare gli occhi e confluiscono per $t' \rightarrow 0$ ($t \rightarrow \infty$) al valore (4.30).

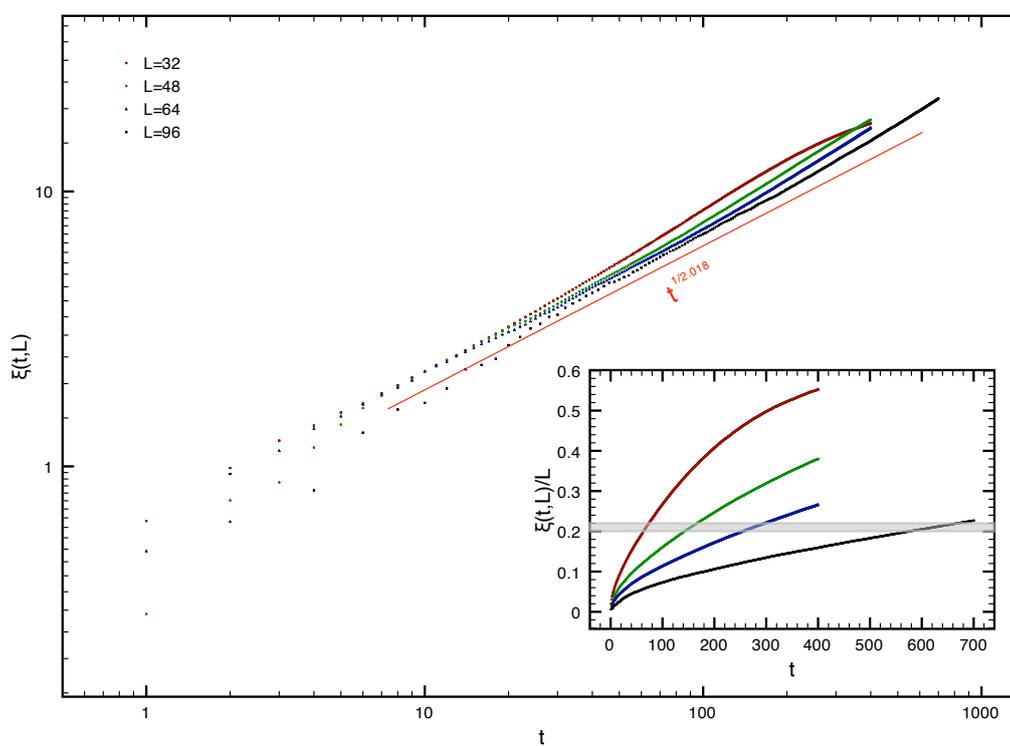


Figura 4.9: Andamento temporale di $\xi(t, L)$ in scala logaritmica e $\xi(t, L)/L$.

Conclusioni

In questo lavoro di tesi abbiamo studiato la pura dinamica di rilassamento (modello A) fuori equilibrio in un sistema di Blume-Capel (4.6) con parametri “improved”. In accordo con gli argomenti del \mathcal{RG} statico e dinamico, il comportamento critico di tale sistema appartiene alla stessa classe di universalità dinamica del modello di Ising. Come conseguenza, l’esponente dinamico z è lo stesso di quello associato a tale classe d’universalità; inoltre, le correzioni principali allo scaling sono controllate dagli stessi operatori del \mathcal{RG} che appaiono nella statica del modello di Ising e, quindi, a caratterizzarle saranno gli esponenti statici $\omega = 0.84(4)$ e $\omega_2 = 1.67(11)$. Ci siamo oltretutto preoccupati di analizzare eventuali nuove correzioni allo scaling specificatamente dinamiche: si è visto in particolare che la dinamica fuori equilibrio presenta un’ulteriore correzione introdotta dal parametro τ_0^{-1} che governa le correlazioni del parametro d’ordine nell’istante iniziale. In particolare, l’esponente associato $\omega_{\tau_0} = z$ risulta più grande di ω_2 e dunque può essere trascurato nell’analisi dei dati. Accordare il parametro D al valore (4.7) minimizza le correzioni principali allo scaling migliorando il comportamento dinamico anche per tempi relativamente piccoli. Insomma, l’utilizzo di modelli improved ci ha permesso di ottenere stime più precise delle quantità dinamiche universali. Infatti, secondo gli studi di *Finite Size Scaling* alla criticità, le correzioni allo scaling decadono come $L^{-1.67}$ (che si riflettono nella dinamica con il termine $t^{-0.83}$) nei sistemi improved; viceversa, in un sistema generico l’avvicinamento al limite termodinamico ($L \rightarrow \infty$) è molto più lento, con correzioni che decadono come $L^{-0.84}$ (a cui corrisponde il termine dinamico $t^{-0.42}$). I risultati principali del nostro studio possono essere riassunti in quanto segue:

- (i) Abbiamo considerato il modello di Blume-Capel alla criticità usando il valore $D^* = 0.641$ secondo le migliori stime riportate in letteratura. Abbiamo investigato la dinamica di rilassamento fuori equilibrio partendo da una configurazione completamente disordinata ($T = \infty$) ed effettuando un raffreddamento istantaneo a $T = T_c$. L’analisi dei dati è stata fatta tagliando fuori le correzioni principali allo scaling proporzionali a $t^{-\omega/z}$ che alla luce delle considerazioni effettuate risultano a priori trascurabili.
- (ii) Ad esclusioni dei primissimi istanti temporali (governati dalle caratteristiche microscopiche del modello), abbiamo osservato la dinamica mesoscopica e determinato l’esponente dinamico z usando i dati della suscettività e tenendo in considerazioni le correzioni successive allo scaling proporzionali a $t^{-\omega_2/z}$.

Considerare le correzioni successive allo scaling ci ha permesso di utilizzare un intervallo dinamico più ampio ed ha anche consentito la determinazione dell'istante temporale oltre il quale sono trascurabili anche tali correzioni.

- (iii) Usando i risultati dell'analisi dati con correzioni allo scaling abbiamo determinato l'intervallo temporale entro il quale $\rho_{eff}(t, L) \approx cost.$ (dati per i quali non sono visibili sia gli effetti di *finite size* sia le correzioni successive allo scaling); facendo uso di questi dati abbiamo ottenuto un'ulteriore stima dell'esponente dinamico z .
- (iv) I risultati ottenuti, sia senza correzioni allo scaling sia con correzioni allo scaling, sono compatibili tra loro. In particolare, ad ulteriore verifica abbiamo osservato le proprietà di riscaldamento dei dati (Figure 4.7 e 4.8). Alla luce di quest'ultime considerazioni, la stima definitiva che diamo per l'esponente dinamico z è

$$z = \mathbf{2.018(8)}. \quad (4.37)$$

Da un confronto con la Tabella 4.3, in cui riportiamo alcune stime dell'esponente dinamico, si osserva un ottimo accordo col valore teorico predetto dalla FT; in parti-

	z
FT <i>d-fixed</i> [20]	2.017
FT <i>ϵ-expansion</i> [19]	2.02
MC <i>equilibrium</i> [21, 22]	2.04(3), 2.10(2)
MC <i>damage spreading</i> [23, 24]	2.034(4), 2.04(1)
MC <i>critical relaxation</i> [25, 26]	2.05(2), 2.04(2)
MC <i>short-time dynamics</i> [27]	2.042(6)

Tabella 4.3: Stime dell'esponente dinamico z per il modello di Ising tridimensionale.

colare, il valore $z = 2.017$, ottenuto effettuando un'espansione a $4-loop$ a dimensione fissa, è sorprendentemente vicino al nostro risultato. Per quanto riguarda le precedenti stime MC, si nota una leggera discrepanza (i valori sono approssimativamente superiori, benchè le stime meno recenti mostrano degli errori che le rendono comunque compatibili al valore teorico) dalle predizioni della FT; d'altra parte, valori come $z = 2.042(6)$, ottenuti proprio osservando la dinamica di rilassamento (modello A) sono significativamente differenti dalla nostra stima. Probabilmente, il motivo di tale discrepanza è da ricercare proprio nella minore attenzione nei confronti delle correzioni successive allo scaling. Il nostro modello infatti, risulta approssimativamente libero da correzioni principali allo scaling ed, inoltre, la stessa analisi dei dati è stata fatta prendendo comunque in considerazione eventuali correzioni successive.

Ringraziamenti

Specialmente grazie a ...

Antonella, *a lei va ogni mia fissazione*; Valentina, *per ogni mio dolore*; Elisa, *senza alcun rimpianto*; Pony, *con lui dalla mia parte*; Michele, *che non smetto mai di sentire*; Me Frati, *che ho finalmente imparato*; Mamma, *perché mi lascia parlare*; Papà, *al quale devo ogni cosa*; Antonio, *più vicino di quanto pensassi*; Batacchi, *per tutti i suoi sorrisi*; Fabio, *sulle mie stesse note*; Totò, *compare per sempre*.

Il mio pc (quello vecchio) ringrazia...

una nota marca di surgelati, *ché altrimenti sarebbe morto per sempre*.

In ordine casuale, grazie a: *S.Slave, S.Cuoco, Claudio, Sergio, Zoul, K.Sibel, Ró, Givà, Gico, Stefania, Fefè, Marina, B.B.Ballerina* un po' di *Pot&Sap* (sia luogo che persone...ché lì ho spesso studiato), *Il Melosi* (che quando l'ho aggiunto avevo appena saputo che s'era spaccato la testa da idiota nel sottopassaggio della stazione di Pisa), *Chiara* (perché altrimenti il mio pc non avrebbe avuto voce in questa pagina), *Palermo* (per tutte le discese...) e *Pisa* (...per le risalite).

Si ringrazia il Dipartimento di Fisica dell'Università di Pisa per aver messo a disposizione i computer dei laboratori sui quali abbiamo effettuato le simulazioni Monte Carlo.

Ringrazio i compagni della stanza 170: sono stato fortunato a ritrovarmi lì con loro, ma soprattutto, hanno reso piacevolmente leggere le mie giornate in dipartimento.

Non ringrazio in questa pagina il mio relatore perché sarebbe superfluo: ogni parola di questo lavoro è dire grazie a lui.

Appendice A

Analisi Statistica nel Metodo Monte Carlo

Discuteremo in maniera sistematica le tecniche di analisi statistica dei dati ottenuti mediante simulazione Monte Carlo. In particolare, dopo aver introdotto le tecniche di analisi all'equilibrio, ci occuperemo di illustrare i metodi per la stima degli errori per le osservabili dinamiche (dipendenti dal tempo).

A.1 Catene di Markov all'Equilibrio

Supponiamo di essere all'equilibrio e di aver collezionato un gran numero di campioni di una data osservabile \mathcal{O} ; il valore di aspettazione $\langle \mathcal{O} \rangle$ può essere stimato effettuando una semplice media aritmetica sulla catena di Markov,

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathcal{O}_j, \quad (\text{A.1})$$

dove abbiamo assunto che la serie temporale contiene un totale di N misure. Concettualmente è importante distinguere tra il valore di aspettazione $\langle \mathcal{O} \rangle$, che è un numero ordinario, e la stima $\bar{\mathcal{O}}$, che è un numero *random* che fluttua attorno al valore teorico. Se uno volesse sondare direttamente tali fluttuazioni sarebbe necessario ripetere più volte l'intera simulazione Monte Carlo¹; in tal caso la varianza da associare alla stima del valore di aspettazione teorico sarebbe:

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2 = \langle [\bar{\mathcal{O}} - \langle \bar{\mathcal{O}} \rangle]^2 \rangle = \langle \bar{\mathcal{O}}^2 \rangle - \langle \bar{\mathcal{O}} \rangle^2, \quad (\text{A.2})$$

dove $\langle \dots \rangle$ rappresenta la media su più catene di Markov indipendenti. D'altra parte, se le N misure \mathcal{O}_j fossero scorrelate, allora il valore della varianza $\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2$ sarebbe semplicemente dato da

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2 = \sigma_{\mathcal{O}_j}^2 / N, \quad (\text{A.3})$$

¹Vedremo che nel caso dinamico ripetere più simulazioni Monte Carlo indipendenti è necessario per ottenere gli errori da associare alle osservabili dipendenti dal tempo.

dove $\sigma_{\mathcal{O}_j}^2 = \langle \mathcal{O}_j^2 \rangle - \langle \mathcal{O}_j \rangle^2$ è la varianza delle singole misure della catena. Ricordiamo che, aver assunto che la simulazione fosse all'equilibrio garantisce l'invarianza per traslazione temporale sulla catena di Markov. L'equazione (A.3) è vera per qualsiasi distribuzione di probabilità $\mathcal{P}(\mathcal{O}_j)$; infatti, qualsiasi forma assuma tale distribuzione (di norma molto vicina ad una distribuzione Gaussiana poiché i dati \mathcal{O}_j normalmente sono già delle medie su reticolo di un gran numero di gradi di libertà), per il teorema del limite centrale la distribuzione dei valori medi è Gaussiana, al più per dati scorrelati e nel limite asintotico $N \rightarrow \infty$. La varianza del valore medio, $\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2$, è l'ampiezza al quadrato di tale distribuzione (dipendente da N) e, normalmente, viene presa come errore quadro ad "un-sigma" da associare a $\bar{\mathcal{O}}$. Sotto tale assunzione circa il 68% di tutte le simulazioni, a parità di condizioni, danno un valore medio che cade nell'intervallo $[\bar{\mathcal{O}} - \sigma_{\bar{\mathcal{O}}}, \bar{\mathcal{O}} + \sigma_{\bar{\mathcal{O}}}]$. Per un intervallo di "due-sigma" la percentuale cresce al 95.4%, e per "tre-sigma" il livello di confidenza raggiunge il 99.7%.

A.1.1 Tempo di Autocorrelazione

Quanto detto è valido nel caso in cui i dati risultano scorrelati; le cose diventano un po' più complicate nel caso in cui sia necessario analizzare misure correlate. Partendo dalla seconda identità nella (A.2) ed inserendo la (A.1) si ottiene

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2 = \langle \bar{\mathcal{O}}^2 \rangle - \langle \bar{\mathcal{O}} \rangle^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \langle \mathcal{O}_i \mathcal{O}_j \rangle - \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \langle \mathcal{O}_i \rangle \langle \mathcal{O}_j \rangle. \quad (\text{A.4})$$

Raggruppando i termini diagonali e quelli fuori diagonale arriviamo a

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (\langle \mathcal{O}_i^2 \rangle - \langle \mathcal{O}_i \rangle^2) + \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} (\langle \mathcal{O}_i \mathcal{O}_j \rangle - \langle \mathcal{O}_i \rangle \langle \mathcal{O}_j \rangle). \quad (\text{A.5})$$

Il primo termine è la varianza delle singole misure moltiplicato $1/N$; nella seconda sommatoria possiamo usare la simmetria $i \leftrightarrow j$ per ridurre la somma a $\sum_{i \neq j}^N = 2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N$. Quindi, riordinando la sommatoria e usando l'invarianza per traslazione temporale si ottiene

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2 = \frac{1}{N} \left[\sigma_{\mathcal{O}_j}^2 + 2 \sum_{k=1}^N (\langle \mathcal{O}_1 \mathcal{O}_{1+k} \rangle - \langle \mathcal{O}_1 \rangle \langle \mathcal{O}_{1+k} \rangle) \left(1 - \frac{k}{N} \right) \right], \quad (\text{A.6})$$

dove, grazie all'ultimo fattore, il termine $k = N$ può essere tenuto nella sommatoria. Se fattorizziamo $\sigma_{\mathcal{O}_j}^2$, possiamo scrivere

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2 = \frac{\sigma_{\mathcal{O}_j}^2}{N} 2\tau_{\mathcal{O},int}. \quad (\text{A.7})$$

Dove abbiamo introdotto il così detto *tempo di autocorrelazione integrato*,

$$\tau_{\mathcal{O},int} = \frac{1}{2} + \sum_{k=1}^N A(k) \left(1 - \frac{k}{N} \right), \quad (\text{A.8})$$

con

$$A(k) = \frac{\langle \mathcal{O}_i \mathcal{O}_{i+k} \rangle - \langle \mathcal{O}_i \rangle \langle \mathcal{O}_i \rangle}{\langle \mathcal{O}_i^2 \rangle - \langle \mathcal{O}_i \rangle \langle \mathcal{O}_i \rangle} \quad (\text{A.9})$$

che denota la funzione di autocorrelazione normalizzata ($A(0) = 1$). L'importanza dell'equazione (A.7) sta nel fatto che, a causa della correlazione temporale delle misure, l'errore statistico $\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}$ associato all'osservabile \mathcal{O} è aumentato di un fattore $\sqrt{2\tau_{\mathcal{O},int}}$. Possiamo dare un'interpretazione a tale modifica se scriviamo l'errore statistico in maniera simile al caso dei dati scorrelati $\sqrt{\sigma_{\mathcal{O}_j}^2/N_{eff}}$, ma con un nuovo parametro

$$N_{eff} = \frac{N}{2\tau_{\mathcal{O},int}} \leq N, \quad (\text{A.10})$$

che descrive una statistica *effettiva*. Ciò mostra chiaramente che solo ogni $2\tau_{\mathcal{O},int}$ iterazioni le misure risultano approssimativamente scorrelate.

A.2 Blocking

Come abbiamo mostrato nel paragrafo precedente, ignorare l'autocorrelazione dei dati può condurre a sottostimare gli errori statistici. D'altra parte, calcolare esattamente la (A.8) spesso risulta troppo macchinoso. Un modo per effettuare una buona stima degli errori statistici è la cosiddetta analisi a blocchi. Raggruppando i dati originali in blocchi possiamo formare una nuova serie più corta di dati che risultano abbastanza scorrelati e che quindi possono essere analizzati attraverso i metodi standard. Anche se i dati risulteranno completamente scorrelati nel tempo, avremo ancora da risolvere il problema della stima degli errori per quelle grandezze che non sono direttamente misurate nella simulazione ma che vengono calcolate come combinazioni non lineari delle osservabili di base. Questo problema può essere risolto usando il metodo del *Jackknife*.

Assumiamo che la catena di Markov contenga N misure correlate \mathcal{O}_i . Possiamo formare N_B blocchi non sovrapposti di lunghezza k tale che $N = N_B k$ e calcolare la media $\mathcal{O}_{B,n}$ del n -imo blocco,

$$\mathcal{O}_{B,n} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathcal{O}_{(n-1)k+i}, \quad n = 1, \dots, N_B. \quad (\text{A.11})$$

Il valore medio su tutte le nuove variabili ovviamente soddisfa $\bar{\mathcal{O}}_B = \bar{\mathcal{O}}$. Se la lunghezza dei blocchi k è sufficientemente grande ($k \gg \tau$), i blocchi sono praticamente scorrelati nel tempo e la loro varianza può essere calcolata utilizzando la definizione canonica per dati scorrelati. Ciò porta alla seguente stima per la varianza del valore medio:

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2 = \sigma_B^2/N_B = \frac{1}{N_B(N_B - 1)} \sum_{n=1}^{N_B} (\mathcal{O}_{B,n} - \bar{\mathcal{O}}_B)^2. \quad (\text{A.12})$$

Confrontando questo risultato con (A.7) si vede che $\sigma_B^2/N_B = 2\tau_{\mathcal{O},int}\sigma_{\mathcal{O}_j}^2/N$; ne consegue che si può usare

$$2\tau_{\mathcal{O},int} = k\sigma_B^2/\sigma_{\mathcal{O}_j}^2 \quad (\text{A.13})$$

per la determinazione di $\tau_{\mathcal{O},int}$. In pratica, per avere un risultato attendibile, si effettua un'analisi ricorsiva: partendo da un certo valore di k si effettua l'analisi statistica per valori di k via via crescenti (chiaramente deve essere sempre $k \ll N$); il tempo di autocorrelazione integrato va crescendo al crescere della lunghezza dei blocchi, fino a stabilizzarsi da un certo valore di k in poi. In quel momento si è raggiunta una stima attendibile dell'errore statistico dell'osservabile in questione. Di fatto la varianza risulta invariante per variazione delle dimensioni dei blocchi, il che è indicatore che i dati hanno perso la loro correlazione.

A.3 Jackknife

Invece di considerare piccoli blocchi di lunghezza k e le loro fluttuazioni come nel metodo del *Blocking*, con la *Jackknife analysis* si formano N_B grandi blocchi $\mathcal{O}_{J,n}$ contenenti tutti i dati meno uno dei blocchi definiti in precedenza,

$$\mathcal{O}_{J,n} = \frac{N\bar{\mathcal{O}} - k\mathcal{O}_{B,n}}{N - k}, \quad n = 1, \dots, N_B. \quad (\text{A.14})$$

Ciascuno dei blocchi Jackknife contiene $N - k$ dati, un numero confrontabile con il numero di dati della serie temporale originale. Quando si stima una combinazione non lineare delle variabili di base, l'errore risulta confrontabile con quello del set complessivo dei dati. Gli N_B blocchi Jackknife sono, chiaramente, banalmente correlati poiché si differenziano l'un l'altro solo per non contenere un piccolo set di lunghezza k di dati originali. Queste correlazioni, causate dall'aver usato i dati originali più e più volte, non hanno nulla a che vedere con le correlazioni di natura temporale. Come conseguenza di ciò la varianza σ_J^2 dei blocchi Jackknife sarà molto più piccola della varianza stimata nel metodo del *Blocking*. A causa della natura banale delle correlazioni questa riduzione può essere corretta moltiplicando σ_J^2 per un fattore $(N_B - 1)^2$, ottenendo

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}}^2 = \frac{N_B - 1}{N_B} \sum_{n=1}^{N_B} (\mathcal{O}_{J,n} - \bar{\mathcal{O}}_J)^2. \quad (\text{A.15})$$

A.4 Analisi fuori equilibrio

Nel caso in cui si voglia studiare la dinamica vera e propria di una catena di Markov, soprattutto nei primi istanti temporali, quando ancora l'osservabile in questione non ha raggiunto il proprio valore all'equilibrio, l'approccio presenta delle differenze da quanto detto nei paragrafi precedenti. Evidentemente, le estrazioni successive di un'osservabile $\mathcal{O}(t)$ non sono più stime stocastiche del valore all'equilibrio $\bar{\mathcal{O}}$: l'indice

t rappresenta il tempo di simulazione MC e noi siamo interessati ad osservare le variazioni che $\mathcal{O}(t)$ manifesta durante l'evoluzione. In questo caso è necessario, per poter associare un errore al valore $\mathcal{O}(t)$, effettuare più simulazioni MC in parallelo. Consideriamo quindi un set N di catene di Markov individuate dall'indice n , ciascuna di esse avente lunghezza T :

$$\begin{array}{rcccccc}
 \text{catena di Markov 1} & \mathcal{O}_1(1), & \mathcal{O}_1(2), & \cdots, & \mathcal{O}_1(t), & \cdots \\
 \text{catena di Markov 2} & \mathcal{O}_2(1), & \mathcal{O}_2(2), & \cdots, & \mathcal{O}_2(t), & \cdots \\
 & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 \text{catena di Markov } n & \mathcal{O}_n(1), & \mathcal{O}_n(2), & \cdots, & \mathcal{O}_n(t), & \cdots \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
 \end{array} \tag{A.16}$$

dove l'indice temporale t individua una specifica estrazione in una data catena. Evidentemente, le righe della (A.16) risultano scorrelate poiché sono il risultato di simulazioni differenti; viceversa, le colonne sono correlate tra loro (si tratta sempre della solita correlazione temporale che dipende dal modo in cui vengono effettuate le estrazioni).

Poiché catene di Markov differenti sono non correlate, per ottenere una stima dell'osservabile in questione possiamo semplicemente effettuare una media sulle N catene:

$$\bar{\mathcal{O}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathcal{O}_n(t); \tag{A.17}$$

la varianza da associare sarà semplicemente quella della media di dati scorrelati:

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}(t)}^2 = \sigma_{\mathcal{O}_n(t)}^2 / N, \tag{A.18}$$

dove

$$\sigma_{\mathcal{O}_n(t)}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (\mathcal{O}_n(t) - \bar{\mathcal{O}}(t))^2. \tag{A.19}$$

Quanto detto è corretto fintanto che abbiamo a che fare con osservabili direttamente misurate nella simulazione. Se dobbiamo analizzare grandezze che sono il risultato di combinazioni non lineari di osservabili di base, oppure, se dobbiamo definire grandezze che dipendono da una stessa osservabile di base calcolata ad istanti di tempo differenti (è il caso di $\rho_{eff}(t)$), bisogna usare anche in questo caso il *Jackknife*. In pratica, allo stesso modo che all'equilibrio, possiamo raggruppare le catene di Markov in (A.16) a blocchi di dimensione k , creando così un insieme di N_B catene tale che $N = kN_B$ (questa volta però si tratta di raggruppare intere catene scorrelate

tra loro):

$$\begin{array}{l}
 \text{blocco 1} \\
 \text{blocco 2} \\
 \vdots \\
 \text{blocco } n \\
 \vdots
 \end{array}
 \left\{
 \begin{array}{l}
 \mathcal{O}_1(1), \mathcal{O}_1(2), \dots, \mathcal{O}_1(t), \dots \\
 \vdots \quad \quad \quad \ddots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
 \mathcal{O}_k(1), \mathcal{O}_k(2), \dots, \mathcal{O}_k(t), \ddots \\
 \\
 \mathcal{O}_{k+1}(1), \mathcal{O}_{k+1}(2), \dots, \mathcal{O}_{k+1}(t), \dots \\
 \vdots \quad \quad \quad \ddots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
 \mathcal{O}_{2k}(1), \mathcal{O}_{2k}(2), \dots, \mathcal{O}_{2k}(t), \ddots \\
 \\
 \mathcal{O}_{(n-1)k+1}(1), \mathcal{O}_{(n-1)k+1}(2), \dots, \mathcal{O}_{(n-1)k+1}(t), \dots \\
 \vdots \quad \quad \quad \ddots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
 \mathcal{O}_{nk}(1), \mathcal{O}_{nk}(2), \dots, \mathcal{O}_{nk}(t), \ddots \\
 \\
 \vdots \quad \quad \quad \ddots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots
 \end{array}
 \right. \quad (\text{A.20})$$

su questi blocchi si definisce il valore medio

$$\mathcal{O}_{B,n}(t) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathcal{O}_{(n-1)k+i}(t), \quad n = 1, \dots, N_B. \quad (\text{A.21})$$

Come fatto per le catene all'equilibrio, si definiscono dei blocchi Jackknife

$$\mathcal{O}_{J,n}(t) = \frac{N\bar{\mathcal{O}}(t) - k\mathcal{O}_{B,n}(t)}{N - k}, \quad n = 1, \dots, N_B, \quad (\text{A.22})$$

e quindi la varianza della media

$$\sigma_{\bar{\mathcal{O}}(t)}^2 = \frac{N_B - 1}{N_B} \sum_{n=1}^{N_B} (\mathcal{O}_{J,n}(t) - \bar{\mathcal{O}}_J(t))^2. \quad (\text{A.23})$$

Bibliografia

- [1] Shang-Keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, W. A. Benjamin Inc., Massachusetts (1976).
- [2] John Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (1996).
- [3] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1989).
- [4] A. Pelissetto and E. Vicari, *Critical Phenomena and Renormalization-Group Theory* Phys. Rep. **38**, 549 (2002).
- [5] H.K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann, Z. Phys. B: Condensed Matter **73**, 539-549 (1989).
- [6] P. Calabrese, and A. Gambassi, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, R133-R193 (2005).
- [7] M. Hasenbusch, K. Pinn, and S. Vinti, Phys. Rev. B **59**, 11471 (1999).
- [8] M. Hasenbusch, Int. J. Mod. Phys. C **12**, 911 (2001).
- [9] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, Phys. Rev. E **60**, 3526 (1999).
- [10] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, Phys. Rev. E **65**, 066127 (2002).

-
- [11] P. Calabrese, V. Martín-Mayor, A. Pelissetto, and E. Vicari, Phys. Rev. E **68**, 016110 (2003).
- [12] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, and E. Vicari, Phys. Rev. B **74**, 144506 (2006).
- [13] G. Schehr, R. Paul, Phys. Rev. E **72**, 016105 (2005).
- [14] A. Pelissetto, *Introduction to the Monte Carlo Method*, Seminario di Fisica Teorica, Parma, 1-12 Settembre 1992.
- [15] W. Janke, *Statistical Analysis of Simulations: Data Correlations and Error Estimation*, invited lecture notes, in: Proceedings of the Euro Winter School *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, edited by J. Grotendorst, D. Marx, and A. Muramatsu, John von Neumann Institute for Computing, Jlich, NIC Series, **10**, 423-445 (2002).
- [16] M. Hasenbusch, A. Pelissetto, and E. Vicari, J. Stat. Mech. **11**, P11009 (2007).
- [17] R. Guida, and J. Zinn-Justin, J. Phys. A **31**, 8103 (1998).
- [18] F. Jasch, and H. Kleinert, J. Math. Phys. **42**, 52 (2001).
- [19] R. Bausch, V. Dohm, H. K. Janssen, and R. P. K. Zia, Phys. Rev. Lett. **47**, 1837 (1981).
- [20] V. V. Prudnikov, A. V. Ivanov, and A. A. Fedorenko, Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. **66**, 793 (1997) [JEPT Lett. **66**, 835 (1997)].
- [21] S. Wansleben, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6006 (1991).
- [22] S. Heuer, J. Phys. A **25**, L567 (1992).
- [23] P. Grassberger, Physica A **214**, 547 (1995); **217**, 227(E) (1995).

-
- [24] U. Gropengiesser, *Physica A* **215**, 308 (1995).
- [25] D. Stauffer, and R. Knecht, *Int. J. Mod. Phys. C* **7**, 893 (1996).
- [26] D. Stauffer, *Physica A* **244**, 344 (1997).
- [27] A. Jaster, J. Mainville, L. Schülke, and B. Zheng, *J. Phys. A* **32**, 1395 (1999).
- [28] M. T. Hutchings, M. P. Schulhof, and H. J. Guggenheim, *Phys. Rev. B* **5**, 154 (1972).
- [29] M. Matsumoto and T. Nishimura, *Mersenne Twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator*, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation* 8, 3 (1998).
- [30] T. Nishimura, *Tables of 64-bit Mersenne Twisters*, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation* 10, 348 (2000).
- [31] M. Hasenbusch, *J. Phys. A* **32**, 4851 (1999).
- [32] K. E. Newman and E. K. Riedel, *Phys. Rev. B* **30**, 6615 (1984).