

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA LA SAPIENZA
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI

CORSO DI LAUREA IN FISICA

TEMPI DI CORRELAZIONE
DI UN MODELLO P -SPIN IN CAMPO MEDIO

Candidato: Luca Giomi
Relatore: Enzo Marinari

ANNO ACCADEMICO 2003–2004

Indice

Introduzione	1
1 I vetri di spin e il modello a p interazioni	3
1.1 I vetri di spin	3
1.2 Proprietà dinamiche della fase di vetro di spin	8
1.3 La teoria dei vetri di spin	10
1.3.1 Spazio delle fasi e parametri d'ordine	10
1.3.2 Il metodo delle repliche	13
1.4 Il modello p -spin in campo medio	16
1.5 Stati metastabili e complessità	24
1.6 Comportamento dinamico	29
2 Le barriere energetiche	35
2.1 Istantoni nella dinamica di Langevin	35
2.2 La teoria di Ioffe e Lopatin	40
2.3 Derivazione delle equazioni dinamiche	45
2.4 Soluzione analitica delle quazioni dinamiche	53
2.5 Probabilità di transizione	57
2.6 Conclusioni	60
3 Esperimenti numerici	62
3.1 Introduzione	62
3.2 Il metodo Monte Carlo	62
3.3 Nuovi algoritmi di simulazione	67
3.4 Il Parallel Tempering	69
3.5 Il <i>Multispin Coding</i>	76
3.6 Errori, correlazione e ricampionamento	78
4 Simulazioni numeriche del modello 3-spin	84
4.1 Introduzione	84
4.2 Dal modello all'algoritmo	85
4.3 Studio della termalizzazione	89
4.4 Fluttuazione dei parametri d'ordine (OPF)	93

4.5	I parametri A , B e G	98
4.6	Comportamento all'equilibrio	100
4.6.1	$\mathcal{E}(T)$ e $C(T)$	100
4.6.2	$P(q)$, χ_{SG} e q	102
4.7	Comportamento Dinamico	109
4.8	$q_c(0, t)$ e la scala di tempo di correlazione τ	113
4.9	Conclusioni	117
	Ringraziamenti	119
	Tesine	120
	Bibliografia	121

Alla mia famiglia

Introduzione

C'era una gran rumore negli universi. Generazioni di stelle nascevano e morivano sotto lo sguardo di telescopi assuefatti, fortune elettromagnetiche venivano dissipate in un attimo, sorgevano imperi d'elio e svanivano civiltà molecolari, gang di gas sovraccittati seminavano il panico, le galassie fuggivano rombandando dal loro luogo d'origine, i buchi neri tracconavano energia e da bolle frattali nascevano universi dissidenti, ognuno con legislazione fisica autonoma.

S. Benni - "Elianto"

Lo studio degli stati della materia condensata ha costituito uno dei temi di ricerca dominanti del secolo scorso. A partire dalla descrizione di Van der Waals della transizione liquido-gas e dalla teoria di campo medio di Weiss del ferromagnetismo, i confini di questa disciplina si sono ampliati nel corso degli anni percorrendo territori sempre più affascinanti e articolati. I vetri di spin rappresentano attualmente la frontiera di tali progressi.

Il tentativo di comprendere i meccanismi di cooperazione messi in evidenza dallo studio di questi materiali, per lo più leghe metalliche ottenute diluendo impurezze magnetiche (es. Mn o Fe) entro una matrice non magnetica (es. Cu o Au), ha portato alla luce una grande varietà di concetti fondamentali ancora sconosciuti e inattesi ed ha contribuito alla nascita di nuove tecniche di indagine sia sul piano teorico sia su quelli sperimentale e computazionale. Tali innovazioni hanno avuto una forte ripercussione in molti campi della ricerca di base inerenti lo studio di sistemi in cui forze di natura competitiva danno luogo a comportamenti complessi. Circostanze di questo tipo sono molto comuni non solo nell'ambito della fisica dello stato solido, ma anche in biologia, nei problemi di ottimizzazione e nello studio delle strutture sociali ed ambientali.

La grande varietà di anomalie che si riscontrano nel comportamento statico e dinamico dei vetri di spin trova la sua ragione cardinale nella presenza di *disordine congelato* e *frustrazione*. Quest'ultima denota in particolare l'impossibilità di minimizzare contemporaneamente tutti i termini dell'hamiltoniana ed ha come conseguenza l'insorgere di un numero straordinariamente elevato di stati d'equilibrio degeneri.

I vari stati d'equilibrio della fase di bassa temperatura non possono in alcun modo essere trasformati gli uni negli altri mediante operazioni di simmetria. Per studiarne l'organizzazione è necessario ricorrere ad una nozione di "diversità", introducendo un

concetto di distanza tra stati, ed una nozione di “somiglianza”, introducendo un parametro di sovrapposizione o *overlap*. La distribuzione di probabilità di quest’ultimo rappresenta l’appropriato parametro d’ordine per la fase di vetro di spin.

Proseguendo sulla linea di ricerca iniziata da Mackenzie e Young nel ’82 e ripresa da Billoire e Marinari più di recente, ci proponiamo con questa tesi di investigare il meccanismo di rottura di ergodicità in un modello di campo medio a p interazioni, mediante lo studio delle scale di tempo che caratterizzano la dinamica del sistema al variare del volume.

Sovente, nella descrizione della fase di bassa temperatura dei vetri di spin, si ricorre a termini quali “valli” o “barriere”. Come abbiamo accennato poc’anzi, e come avremo modo di specificare in diverse occasioni nel corso dei quattro capitoli che seguono, la fase di bassa temperatura dei modelli di campo medio dei vetri di spin è caratterizzata da un numero molto alto di stati stabili e metastabili, che conferiscono allo spazio delle fasi l’*orografia* di un paesaggio montuoso, ricco di valli separate l’una dall’altra da barriere di energia libera. Fin quando il sistema è costituito da un numero finito di elementi, esso ha la facoltà di transitare da una valle all’altra valicando la barriera energetica che le divide, mentre nel limite termodinamico le barriere diventano infinitamente alte e lo spazio delle fasi si frammenta in un insieme di valli sconnesse. Da un punto di vista dinamico, dunque, una valle rappresenta un sottoinsieme di configurazioni in cui il sistema risiede per un tempo medio $\tau \sim \exp(\beta\Delta)$, dove Δ rappresenta l’altezza tipica delle barriere energetiche che popolano lo spazio delle fasi.

Lo studio numerico della quantità τ al variare della taglia del sistema costituisce di conseguenza un argomento d’indagine prezioso allo scopo di sondare il paesaggio delle fasi del sistema all’equilibrio e formulare una legge di scala in grado di palesare il meccanismo di rottura dell’ergodicità nella fase di bassa temperatura.

Il contenuto della tesi è organizzato come segue. Il Capitolo 1 è dedicato ad un’introduzione alla fisica dei vetri di spin: alle evidenze sperimentali ed alla formulazione teorica dei problemi statici e dinamici inerenti i modelli di campo medio e il modello p -spin nello specifico. Nel Capitolo 2 verrà discusso il problema delle barriere energetiche con riferimento all’approccio formale elaborato da Sherrington, Ioffe ed Lopatin, ed alla sua applicazione al caso del modello a p interazioni. Nel Capitolo 3 verranno presentati gli strumenti numerici qui adottati per le simulazioni del modello p -spin con particolare attenzione alle tecniche del *Parallel Tempering*, grazie alla quale è possibile simulare con successo la fase di bassa temperatura dei vetri di spin laddove il Monte Carlo tradizionale fallisce, e del *Multispin Coding*, per mezzo delle quale è possibile ridurre il tempo di lavoro del calcolatore di un fattore significativo. I risultati del lavoro numerico costituiscono, per finire, l’argomento del Capitolo 4.

Capitolo 1

I vetri di spin e il modello a p interazioni

1.1 I vetri di spin

Il termine *vetri di spin* fu coniato negli anni '50 per descrivere una classe di sistemi magnetici dotati di uno stato fondamentale in cui gli spin appaiono congelati in orientazioni prive di un ordinamento periodico. In laboratorio essi vengono preparati diluendo impurezze magnetiche (ad es. Mn o Fe) entro una matrice metallica non magnetica (ad es. Cu o Au), con una concentrazione relativa dell'ordine di qualche per cento. In questa situazione le interazioni di scambio fra lo spin degli elettroni localizzati sulle impurezze e quello degli elettroni di conduzione danno luogo ad un'interazione spin-spin a lunga portata (detta RKKY) la cui ampiezza oscilla rapidamente, cambiando segno su distanze dell'ordine del passo del reticolo.

Sperimentalmente si osserva che, a basse temperature, i campioni raffreddati in assenza di campo non presentano una magnetizzazione misurabile, tuttavia, per campi molto piccoli, la suscettività magnetica presenta una cuspidè ad una temperatura T_{SC} dell'ordine della decina di Kelvin. Una semplice interpretazione del fenomeno (dovuta a Fischer [1]) può essere costruita in questo modo; come è noto la suscettività locale $\chi_{ij} = \partial_{h_i} \langle S_i \rangle$ di uno spin situato nel sito i rispetto ad un campo applicato in j è proporzionale alla funzione di correlazione connessa degli spin:

$$\chi_{ij} = \beta \langle S_i S_j \rangle - \beta \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$$

Per un dato campione, in assenza di campo magnetico, la suscettività globale potrà essere ricavata attraverso una media sul campione della quantità χ_{ij} . Vista la natura aleatoria del sistema, ci si può aspettare che entrambe le grandezze $\langle S_i \rangle$ e $\langle S_i S_j \rangle$ siano variabili casuali, indipendenti per siti diversi e distribuite simmetricamente su tutto il campione:

$$\sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle = \sum_{ij}^{1,N} \langle S_i S_j \rangle = 0$$

Se l'ipotesi è vera la suscettività del campione sarà determinata solamente da contributi locali:

$$\begin{aligned}\chi &= \frac{1}{N} \sum_{ij} \chi_{ij} = \frac{\beta}{N} \sum_{ij} \{ \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \} \sim \\ &\sim \frac{\beta}{N} \sum_i \{ \langle S_i^2 \rangle - \langle S_i \rangle^2 \} = \beta - \frac{\beta}{N} \sum_i \langle S_i \rangle^2\end{aligned}$$

avendo considerato che S_i^2 è sempre uguale ad uno. Se inoltre supponiamo che il sistema si trovi in uno stato d'equilibrio ben preciso, in cui $\langle S_i \rangle = m_i$, potremo riscrivere quest'espressione nella forma:

$$\chi \sim \beta \left(1 - N^{-1} \sum_i m_i^2 \right) \quad (1.1)$$

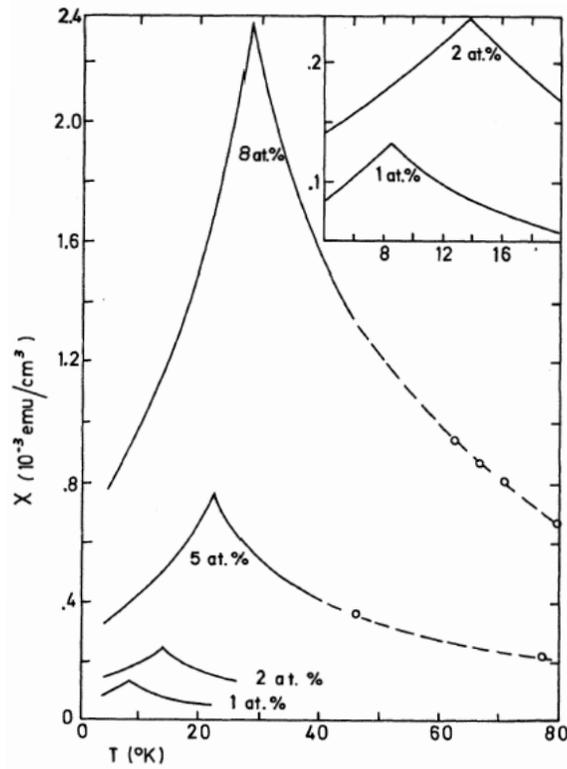


Figura 1.1: Suscettività magnetica per diverse leghe di FeAu con concentrazioni dal 1 al 8% Fe. Tratto da [2].

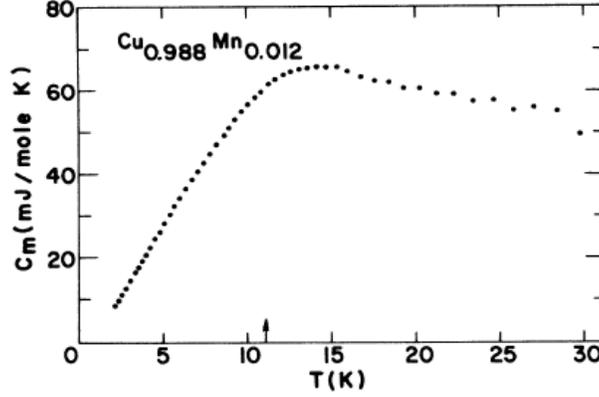


Figura 1.2: Calore specifico al variare della temperatura in un campione di CuMn. La freccia indica la temperatura T_{SG} che si osserva nell'andamento della suscettività a.c. nello stesso materiale. Tratto da [3].

Il calore specifico $c(T)$ non manifesta divergenze al punto critico, ma solo un ampio massimo ad una temperatura più alta di T_{SG} (Figura 1.2). Del resto, diversamente da quanto avviene nei sistemi dotati di una fase ordinata, nel caso dei vetri di spin tanto la fase paramagnetica quanto quella di bassa temperatura sono caratterizzate da un arrangiamento disordinato dei momenti magnetici. Il congelamento di questi ultimi ha inizio prima ancora della temperatura critica e si conclude a $T = 0$, così che l'entropia s per unità di volume non subisce un cambiamento drastico a T_{SG} , ma decresce rapidamente al diminuire della temperatura, conferendo al calore specifico un andamento continuo e regolare. A basse temperature $c(T)$ esibisce una dipendenza lineare dalla temperatura come avviene in sistemi quali i solidi amorfi o i vetri strutturali. Seguendo Anderson ed altri [4] è possibile spiegare tale comportamento supponendo che a bassa temperatura il sistema possa essere modellizzato come un ensemble di sistemi a due livelli separati da una barriera energetica di altezza Δ . La funzione di partizione del sistema a temperatura T sarà data allora da:

$$Z = 1 + e^{-\beta\Delta}$$

Facendo ricorso alla relazione di fluttuazione e dissipazione si ottiene:

$$c(\Delta, T) = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = \beta^2 \left[\frac{\Delta^2 e^{-\beta\Delta}}{(1 + e^{-\beta\Delta})^2} \right]$$

Se la distanza energetica Δ fra i due livelli è distribuita su tutto l'ensemble con densità $\rho(\Delta)$, mediando rispetto alla variabile $x = \beta\Delta$ si ottiene:

$$c(T) = T \int_0^\infty dx \rho(Tx) c(\Delta, T) \sim T\rho(0) \quad T \rightarrow 0$$

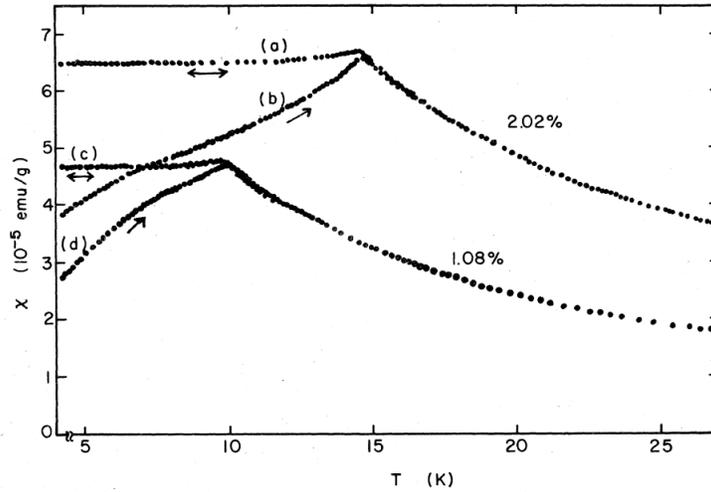


Figura 1.3: Suscettività magnetica al variare della temperatura per due campioni di CuMn con concentrazioni 1.08 e 2.02 % Mn. I dati delle curve (b) e (d) sono stati misurati riscaldando i campioni in presenza di un campo magnetico $H = 5.90$ G dopo il raffreddamento iniziale in campo nullo. Le Suscettività (a) e (c) sono state misurate raffreddando i campioni a partire dalla fase paramagnetica in presenza di un campo $H = 5.90$ G. Tratto da [5].

che giustifica la dipendenza lineare del calore specifico dalla temperatura, a condizione che la probabilità associata ad una barriera di altezza nulla sia diversa da zero $\rho(0) > 0$.

Questi semplici argomenti possono dar ragione di alcune proprietà fondamentali dei vetri di spin, ma di certo non bastano a giustificare tutta una serie di comportamenti anomali ed assolutamente estranei ai tradizionali sistemi di magnetici. Certamente la presenza di una cuspidè nella suscettività indica la presenza di una temperatura critica T_{SG} al disotto della quale il comportamento del sistema cambia radicalmente, ma quale sia la natura di questa fase di bassa temperatura o semplicemente se si possa effettivamente parlare di una nuova fase della materia, sono argomenti tutt'oggi dibattuti.

La complessità della fase di vetro di spin si manifesta, sperimentalmente, in numerose occasioni. Misure di suscettibilità o di magnetizzazione residua dipendono fortemente dalle procedure sperimentali utilizzate, indicando in tal modo una spiccata dipendenza dello stato del sistema dal cammino effettuato per arrivarvi. In Figura 1.3 sono rappresentati gli andamenti della suscettività magnetica in funzione della temperatura, registrati attraverso le procedure sperimentali *Zero Field Cooled* (ZFC), in cui il campione viene inizialmente raffreddato e successivamente esposto ad un piccolo campo magnetico, e *Field Cooled* (FC), in cui il raffreddamento avviene in presenza del campo. Si vede chiaramente come le due curve coincidano solamente ad alta temperatura. Misure della suscettività in funzione della frequenza del campo magnetico applicato rivelano una forte dipendenza anche per frequenze molto minori di quelle

caratteristiche del sistema, a testimoniare un ampio spettro di tempi di rilassamento come quello dovuto, in una fase di tipo vetroso, alla presenza di molti stati metastabili, proprietà, quest'ultima, suggerita anche da misure di magnetizzazione residua (TRM), in buon accordo con una legge di decadimento del tipo:

$$M_{\text{TRM}}(t) \sim \exp[-(t/\tau)^\beta] \quad \text{con} \quad \beta \sim \frac{1}{3}$$

Questi ed altri risultati lasciano supporre, in altre parole, la presenza di un paesaggio delle fasi estremamente irregolare, ricco di minimi locali e barriere di energia libera entro le quali il sistema può rimanere intrappolato per tempi più o meno lunghi a seconda del processo dinamico indotto dall'esterno. In questo senso i risultati di Figura 1.3 possono essere interpretati immaginando che: (a) quando si effettua un raffreddamento ZFC il sistema è forzato a rimanere all'interno di una stessa valle durante tutta la fase di bassa temperatura; (b) quando si raffredda il campione in presenza di un piccolo campo magnetico, il sistema ha la capacità di scegliere, per ogni passo di raffreddamento, lo stato più adatto ai particolari valori di H e T applicati; (c) ad alte temperature il sistema è comunque in grado esplorare lo spazio delle fasi e le due procedure producono gli stessi risultati.

Da un punto di vista strutturale, questa grande varietà di comportamenti atipici trova senza dubbio ragione nel fenomeno della *frustrazione*. Questa è legata all'esistenza di una relazione conflittuale fra le interazioni che governano il comportamento del sistema e può essere visualizzata adottando il semplice esempio di un modello con interazioni di coppia descritto dall'Hamiltoniana:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

in cui gli indici i e j individuano la posizione dei momenti magnetici \mathbf{S} , mentre l'elemento di matrice J_{ij} quantifica l'interazione di scambio fra la generica coppia di spin (ij). Nella pratica sperimentale le posizioni \mathbf{R}_i sono distribuite in modo casuale e il termine di accoppiamento J_{ij} oscilla rapidamente al variare della distanza $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. La frustrazione insorge nel momento in cui gli spin ricevono da parte dei legami a cui sono collegati istruzioni contraddittorie a fini dell'ordinamento.

Nell'approccio teorico è pratica comune concentrarsi sui meccanismi fondamentali del problema, lasciando sullo sfondo i dettagli del sistema reale. Questo lo spirito alla base del modello di Edwards-Anderson [6]:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1.2)$$

in cui $S_i = \pm 1$ e i legami J_{ij} sono variabili casuali indipendenti distribuite secondo la legge:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J^2} \exp\left(-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}\right)$$

o analogamente:

$$P(J_{ijk}) = \frac{1}{2}\delta(J_{ijk} - J) + \frac{1}{2}\delta(J_{ijk} + J)$$

equivalenti in approssimazione di campo medio. In questo contesto l'effetto della frustrazione può essere facilmente apprezzato considerando un reticolo bidimensionale costituito da plaquette come quella mostrata in Figura 1.4. Evidentemente non esiste

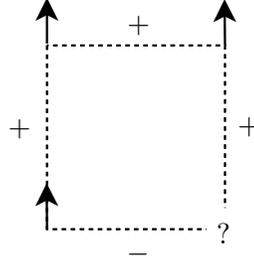


Figura 1.4: Esempio di plaquette frustrata in un reticolo quadrato bidimensionale.

nessuna disposizione degli spin ai vertici del quadrato in grado di soddisfare tutti e quattro i legami, cioè tale che tutti i legami diano il minor contributo possibile all'energia. Il fenomeno della frustrazione si riscontra ogni qual volta che il prodotto delle costanti di accoppiamento J_{ij} relative ad una plaquette è negativo:

$$\prod_{\langle ij \rangle \in \partial P} J_{ij} < 0$$

ed è responsabile di una forte degenerazione dello stato fondamentale, in quanto è evidente come molte delle configurazioni che si ottengono dalla semplice permutazione dei legami rotti siano, da un punto di vista energetico, pressoché equivalenti.

1.2 Proprietà dinamiche della fase di vetro di spin

Le proprietà dinamiche della fase di vetro di spin riflettono, in prima analisi, le caratteristiche tipiche dei sistemi fuori dall'equilibrio: la risposta del sistema alle variazioni di campo magnetico è logicamente lenta e dipende dal tempo trascorso a basse temperature attraverso il meccanismo dell'invecchiamento (*aging*); quest'ultimo può essere completamente reinizializzato se si riscalda il campione ad temperatura maggiore della temperatura di vetro di spin T_{SG} .

Il comportamento critico del sistema in prossimità della temperatura T_{SG} è stato descritto, come per i sistemi ferromagnetici tradizionali, in termini di divergenza della lunghezza di correlazione spin-spin. Da un punto di vista macroscopico, infatti, il fenomeno dell'invecchiamento può essere interpretato come una sorta di "irrigidimento" progressivo del sistema, nel senso che la risposta ad una stimolazione esterna diventa sempre meno immediata man mano che il sistema invecchia. In termini di energia libera una risposta più lenta implica un innalzamento delle barriere nel paesaggio delle fasi e,

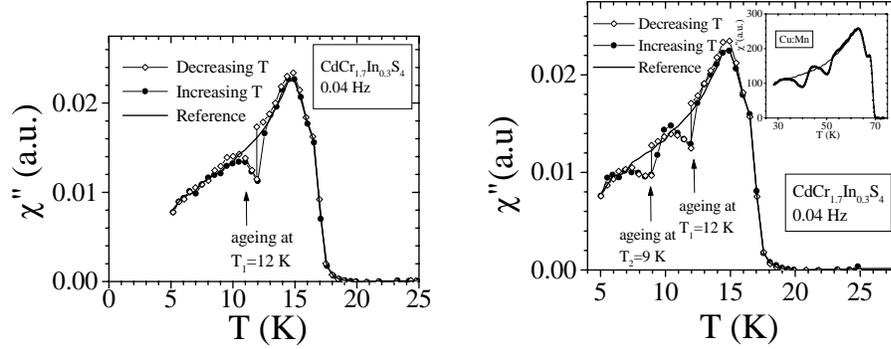


Figura 1.5: Suscettività χ'' di un campione di $\text{CdCr}_{1.7}\text{In}_{0.3}\text{S}_4$. Le misure ottenute durante la fase di riscaldamento del sistema (punti neri) con frequenza costante esibiscono lo stesso andamento delle misure ricavate in fase di raffreddamento inclusa la deviazione prodotta dall'aging in seguito ad una pausa di 7h alla temperatura di 12 K.

in corrispondenza, un aumento del numero di spin correlati che in presenza di un campo vengono invertiti contemporaneamente. In questo senso l'interpretazione dell'aging come accrescimento nel tempo dei domini di spin correlati rappresenta senza dubbio una scelta naturale. Negli ultimi cinque anni, tuttavia, alcuni lavori sperimentali hanno messo in luce tutta una classe di fenomeni, riscontrabili quando il sistema è sottoposto a variazioni cicliche di temperatura, davanti alla quale questo tipo di approccio risulta palesemente inadeguato. I fenomeni in questione, osservati per la prima volta da Joanson ed altri nel 1998 [7], si manifestano quando un campione, in presenza di un campo magnetico a bassa frequenza, viene sottoposto ad aging durante una procedura ciclica di raffreddamento e riscaldamento in prossimità della temperatura critica T_{SG} . Due sono gli effetti notevoli che emergono dall'analisi della suscettività come funzione della temperatura:

1. *Caos in temperatura.* Il rilassamento della suscettività durante la fase di aging viene completamente ripristinato non appena l'operazione di raffreddamento riprende.
2. *Memoria.* In fase di riscaldamento il sistema ripercorre al contrario la curva di suscettività transitando, per la seconda volta, in corrispondenza del minimo locale dovuto all'invecchiamento.

La procedura sperimentale seguita nell'esperimento di Jonason è la seguente: partendo da una temperatura $T < T_{SG} \sim 17\text{K}$ (es. 4 K) si riscalda il campione fino a 25 K, con una velocità di raffreddamento di 0.1 K/min, in modo da determinare una *curva di riferimento* sperimentale per la grandezza $\chi''(T)$. Il campione è immerso in un campo magnetico oscillante di frequenza $\nu = 0.04\text{ Hz}$ e ampiezza $h_0 = 0.3\text{ Oe}$, tale da non perturbare eccessivamente le proprietà del sistema. Successivamente il campione viene raffreddato con stessa velocità della fase preliminare, ma, arrivati a

temperatura $T = 12$ K, il raffreddamento viene interrotto per un tempo pari a $t_w = 12$ h, allo scopo di innescare il meccanismo di aging. Quando si riprende a raffreddare il sistema la suscettività riprende a variare secondo l'andamento registrato nella curva di riferimento annullando provvisoriamente lo stato di rilassamento prodotto dall'aging. Infine, quando si riscalda il campione, la suscettività ripercorre al contrario il profilo della curva di raffreddamento sprofondando nuovamente nell'avvallamento a 12 K procurato mediante la precedente interruzione.

Lo stesso scenario si presenta nel caso l'esperimento sia realizzato mediante due interruzioni. Ogni qual volta l'operazione di raffreddamento riprende la suscettività ritorna ai valori di riferimento, per poi ripercorrere i minimi d'invecchiamento in fase di riscaldamento.

Dall'analisi di questi risultati si può dedurre innanzitutto che le caratteristiche del sistema in prossimità di T_{SG} dipendano sensibilmente da ogni minima variazione di temperatura (*caos*). Del resto in un paesaggio della fasi così ondulato e ricco di avvallamenti anche una lieve deformazione, come quella prodotta da una piccola variazione di temperatura, può causare lo slittamento del sistema da un minimo locale all'altro. Questo spiegherebbe perchè lo stato di rilassamento raggiunto in fase di aging viene meno non appena la temperatura del sistema subisce una nuova variazione.

D'altra parte il fatto che lo stato di minimo di χ'' possa essere ripristinato in fase di riscaldamento indica che l'eventuale presenza di domini di spin correlati caratterizza la fase di vetro di spin in maniera sostanzialmente diversa rispetto al caso dei sistemi ferromagnetici. In un sistema ordinato, infatti, la fase ferromagnetica è determinata semplicemente dalla maggior quantità di domini orientati in un verso piuttosto che nel verso opposto. In questo caso lo stato in cui il sistema permane durante il processo di aging persiste in qualche modo anche quando la temperatura riprende a variare come se i domini che caratterizzano le proprietà dello stato di equilibrio del sistema a T_1 si fossero costituiti attorno a particolari centri di coesione collocati in punti specifici del campione e che qui abbiano conservato la propria struttura in modo pressochè inalterato anche per $T \neq T_1$.

1.3 La teoria dei vetri di spin

1.3.1 Spazio delle fasi e parametri d'ordine

Per descrivere meglio la transizione dei vetri di spin è necessario soffermarsi sullo spazio delle fasi: come abbiamo detto l'energia libera ha un'andamento fortemente irregolare, paragonabile ad un paesaggio costituito da profonde vallate separate da barriere più o meno elevate. Nel limite termodinamico tali barriere diventano infinitamente alte, causando la rottura dell'ergodicità del sistema e lo spazio delle fasi si frammenta in un insieme di valli sconnesse. Il fondo di queste valli infinitamente profonde è a sua volta costellato di minimi locali, separati l'un l'altro da barriere di altezza finita fra le quali il sistema può rimanere intrappolato a lungo prima precipitare nel minimo assoluto della valle. Le valli rappresentano gli stati *puri* del sistema, vale a dire gli stati in

corrispondenza dei quali il sistema continua ad essere ergodico e la media statistica coincide con quella temporale. Possiamo indicare il peso statistico del generico stato puro a con energia libera f_a nella forma:

$$w_a = \frac{e^{-\beta f_a}}{\sum_b e^{-\beta f_b}} \quad (1.3)$$

in cui la somma a denominatore è estesa a tutti i possibili stati puri in cui si decompone la misura di Boltzmann-Gibbs. Quando si trova in uno stato puro, il sistema è ancora in grado di esplorare il fondo della valle superando le barriere di altezza finita. Per quanto valicabili, queste ultime possono essere comunque molto alte, da cui si intuisce che, quando il sistema si trova in un minimo particolarmente profondo, sarà necessario attendere a lungo prima che esso raggiunga lo stato di equilibrio vero e proprio. Questi minimi profondi, ma finiti, rappresentano evidentemente gli stati *metastabili*.

La media sull'ensemble può essere espressa attraverso i singoli stati puri nella forma:

$$\langle O_J \rangle = \sum_a w_a \langle O_J \rangle_a$$

In questa circostanza vale la pena sottolineare che, mentre per gli stati puri vale la proprietà di clustering (le funzioni di correlazione connesse di due spin calcolate in uno stato puro si annullano a grandi distanze), per lo stato di Gibbs miscela di stati puri questa proprietà cessa di esistere.

Nel caso del modello di Ising ferromagnetico, ad esempio, esistono solamente due stati puri, caratterizzati dall'aver l'uno $\langle S_i \rangle = m$ e l'altro $\langle S_i \rangle = -m$, mentre per lo stato di Gibbs, ottenuto dalla miscela dei due stati puri con probabilità $1/2$, si ha $\langle S_i \rangle = 0$. I due stati puri sono legati da una semplice trasformazione di inversione e per selezionarne uno è sufficiente sottoporre il sistema ad un campo magnetico anche debolissimo. Nel caso dei vetri di spin, al contrario, la situazione è molto più complicata: nella fase vetrosa esistono moltissimi stati puri e nessuna trasformazione semplice che li colleghi; nè è possibile selezionare le configurazioni relative ad un particolare stato puro a esponendo il sistema ad un opportuno campo magnetico h_i^a proporzionale alla magnetizzazione m_i^a , perchè a priori tale stato è assolutamente sconosciuto.

In generale il sistema, quando si trova in uno stato puro, esibirà le proprietà tipiche di quello stato. Queste proprietà saranno sostanzialmente diverse da quelle dello stato di Gibbs, frutto della media pesata di *tutti* gli stati puri. Può accadere ad esempio che il sistema si trovi in qualche modo bloccato in uno stato con magnetizzazione positiva laddove $\langle S_i \rangle = 0$ nello stato di Gibbs; il che è alla base degli effetti di magnetizzazione residua osservabili in tutti i vetri di spin. Per calcolare le proprietà del sistema in un singolo stato sarà necessario quindi restringere la media alle configurazioni relative al minimo appropriato. Ovviamente le quantità d'interesse generale sono quelle indipendenti dalla particolare scelta delle costanti di accoppiamento J , quindi sarà indispensabile effettuare delle medie sulle diverse realizzazioni del disordine congelato. Per cominciare si consideri la quantità:

$$q_{\text{EA}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \overline{\langle S_i(t_0) S_i(t_0 + t) \rangle}^{t_0} \quad (1.4)$$

dove l'operatore $\overline{\quad}^{t_0}$ indica la media su tutte le possibili scelte dell'istante t_0 . Nella fase ergodica la (1.4) è un somma di addendi che con la stessa probabilità possono assumere valori ± 1 ; di conseguenza $q_{\text{EA}} = 0$. Nella fase rotta, al contrario, ogni singolo termine della somma (1.4) misura la magnetizzazione quadratica media del sistema nella valle entro la quale esso si trova intrappolato all'istante t_0 in cui ha inizio l'osservazione.

$$\langle S_i(t_0)S_i(t+t_0) \rangle = (m_i^a)^2$$

Prendere in analisi tutti i possibili istanti iniziali t_0 equivale evidentemente a considerare tutte le valli in cui il sistema può trovarsi racchiuso, ognuna con il suo peso statistico w_a . In media si avrà allora:

$$q_{\text{EA}} = \sum_a w_a (m_i^a)^2 \quad (1.5)$$

Si consideri ora la quantità:

$$q_J = \frac{1}{N} \sum_i m_i^2 = \frac{1}{N} \sum_i \left[\sum_a w_a^{(J)} m_i^a \right]^2 = \sum_a \sum_b w_a^{(J)} w_b^{(J)} q_{ab}$$

dove:

$$q_{ab} = \frac{1}{N} \sum_i m_i^a m_i^b \quad (1.6)$$

misura l'*overlap* fra lo stato a e lo stato b nella fase rotta; esso è legato alla distanza euclidea fra i due stati:

$$d^2(a, b) = \frac{1}{N} \sum_i [m_i^a - m_i^b]^2 = 2(q_{\text{EA}} - q_{ab}) \quad (1.7)$$

Mediando infine la quantità q_J su tutte le realizzazioni del disordine congelato si ottiene il parametro d'ordine di equilibrio:

$$q = \lim_{N \rightarrow \infty} \overline{q_J} \quad (1.8)$$

che tiene conto dei contributi misti dovuti ad un'eventuale evoluzione dinamica del sistema attraverso le valli. Quando il sistema è intrappolato in una valle, per la (1.1) e la (1.5), avremo che:

$$\chi_{\text{loc}} = \beta(1 - q_{\text{EA}})$$

se contrariamente il sistema è in grado di attraversare valli diverse si ha:

$$\chi_{\text{loc}} = \beta(1 - q) = \beta(1 - \overline{q_J})$$

che sancisce una volta per tutte l'esistenza delle due curve di suscettività di Figura 1.3. Infine si può considerare la distribuzione di probabilità delle variabili q_{ab} , definita come:

$$P_J(q) = \sum_{ab} w_a^{(J)} w_b^{(J)} \delta(q - q_{ab}) \quad P(q) = \overline{P_J(q)} \quad (1.9)$$

Evidentemente i parametri q_J e q costituiscono rispettivamente il momento di ordine uno delle distribuzioni di probabilità $P_J(q)$ e $P(q)$, laddove:

$$q_J^{(k)} = \int_{-1}^{+1} dq q^k P_J(q) = \sum_{ab} w_a w_b q_{ab}^k \quad (1.10a)$$

$$q^{(k)} = \int_{-1}^{+1} dq q^k P(q) = \overline{\sum_{ab} w_a w_b q_{ab}^k} \quad (1.10b)$$

La forza di questa relazione risiede nella possibilità di caratterizzare la fase rotta senza mai passare per l'analisi delle singole componenti ergodiche.

1.3.2 Il metodo delle repliche

La maggiore difficoltà matematica nel calcolo delle proprietà di un sistema con disordine congelato nasce dall'esigenza di valutare la media sulle variabili *quenched* del logaritmo della funzione di partizione. Il metodo delle repliche si basa sull'osservazione che:

$$\log Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}$$

dove n è un numero reale. D'altra parte, se n fosse un numero intero, la Z^n potrebbe essere ottenuta come funzione di partizione di n repliche identiche del sistema caratterizzate dalla stessa realizzazione del disordine J . Se fosse lecito valutare prima la media sulle J e poi prendere il limite $n \rightarrow 0$ potremmo ottenere il risultato cercato come segue:

$$\overline{\log Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z^n} - 1}{n} \quad (1.11)$$

In linea di principio dovrebbe essere possibile valutare $\overline{Z^n}$ almeno in modelli di campo medio per ogni valore intero di n . Il problema è poi estendere analiticamente il risultato a valori reali di n in modo da poter prendere il limite per $n \rightarrow 0$. Introducendo l'indice di replica $\alpha = 1, 2 \dots n$, Z^n può essere espressa nella forma:

$$Z^n = \text{Tr}_n \exp\left(-\beta \sum_{\alpha=1}^n H[S^\alpha]\right)$$

in cui $H[S^\alpha]$ rappresenta l'Hamiltoniana della replica contrassegnata dall'indice α e Tr_n rappresenta la somma sulle variabili di spin di tutte le repliche. La media sul disordine può essere effettuata esplicitando i momenti della distribuzione di probabilità delle variabili congelate. Per un modello di Ising con legami aleatori, si ottiene ad esempio:

$$\overline{Z^n} = \text{Tr}_n \exp(-\beta H_{eff}) \quad (1.12)$$

$$\beta H_{eff} = - \sum_{ij} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\overline{J^p}}{2p!} \left(\beta \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha \right)^p \quad (1.13)$$

dove $\overline{J^p}$ rappresenta il generico momento di ordine p della distribuzione dei legami J . Nel limite termodinamico sono i primi due momenti a definire il comportamento del modello, mentre la forma specifica della distribuzione non influisce. L'introduzione delle repliche, in altre parole, consente di convertire il problema originale di un sistema di spin con interazioni di coppia casuali in un problema di interazione a molti corpi non disordinato. I parametri d'ordine introdotti in precedenza potranno essere riscritti nella forma:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^\alpha \rangle_{eff} \quad q = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^\alpha S_i^\beta \rangle_{eff} \quad (1.14)$$

dove il simbolo $\langle \cdot \rangle_{eff}$ denota la media sull'ensemble definito dall'Hamiltoniana efficace (1.13) nel limite in cui $n \rightarrow 0$.

Ora, per come è stata introdotta, la (1.13) è evidentemente simmetrica rispetto agli indici di replica α e β , tuttavia, come ipotizzato da Parisi [8, 9, 10, 11] in relazione al modello di Sherrington-Kirkpatrick, è possibile che tale simmetria venga rotta nella fase di bassa temperatura. In altre parole la fase di vetro di spin può essere descritta come un fenomeno di *rottura di simmetria delle repliche* (RSB), in virtù del quale soluzioni m e q che violano la simmetria dell'Hamiltoniana H_{eff} rispetto al gruppo di permutazione delle repliche risultino di fatto ammissibili. In questa circostanza la seconda delle (1.10) coinciderà con la:

$$q^{(k)} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^k \quad q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i m_i^\alpha m_i^\beta \quad (1.15)$$

corrispondente alla distribuzione di probabilità:

$$P(q) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{(\alpha\beta)} \delta(q - q_{\alpha\beta}) \quad (1.16)$$

È chiaro a questo punto che l'analisi della distribuzione (1.9) può essere ricondotta allo studio della (1.16), nel senso che alla rottura dell'ergodicità nello spazio delle fasi del sistema reale corrisponderà la rottura della simmetria delle repliche e viceversa. Per chiarire quest'ultimo concetto possiamo formulare un semplice esempio in sintonia con le metodologie adoperate in questo lavoro di tesi: si supponga di costruire n copie indipendenti di un certo sistema e di far evolvere (magari per mezzo di altrettante simulazioni numeriche) ciascuna copia partendo da condizioni iniziali differenti. In generale, trascorso un certo tempo, tutte le copie avranno esplorato completamente l'ipersuperficie ad energia costante. Al contrario se le copie si trovano confinate in regioni diverse, slegate da qualsiasi regola di simmetria, è segno che lo spazio delle fasi ha subito una rottura di ergodicità. In altre parole la rottura della simmetria delle repliche è la manifestazione formale del fenomeno fisico di rottura dell'ergodicità.

Lo studio della distribuzione (1.16) consente dunque di identificare in qualche modo lo stato del sistema all'equilibrio. Ciò risulta abbastanza evidente nel caso di un semplice ferromagnete, dove la transizione di fase comporta una biforcazione della $P(q)$

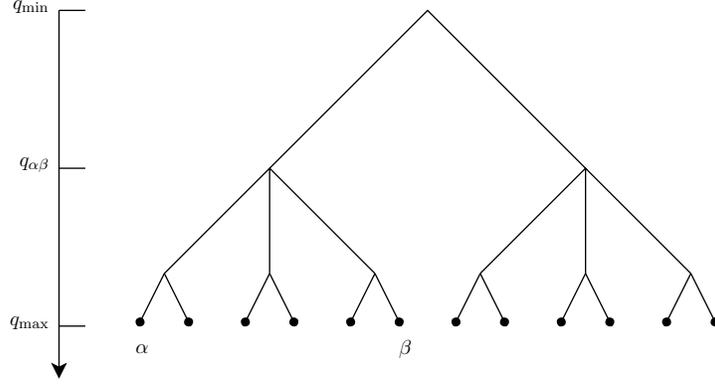


Figura 1.6: Rappresentazione “ad albero” dell’overlap ultrametrico. L’overlap associato ad una coppia di stati corrisponde all’ordinata del vertice da cui comincia la ramificazione che divide la coppia.

in corrispondenza dei valori simmetrici m^2 e $-m^2$; nel caso dei vetri di spin la $P(q)$ è una funzione non banale di q , limitata superiormente dalla quantità q_{EA} . Quest’ultima proprietà è dovuta alla prerogativa del parametro q di misurare la correlazione del sistema in valli diverse, alla prerogativa del parametro q_{EA} di misurare la correlazione del sistema all’interno di una stessa valle e all’argomentazione intuitiva in base alla quale le configurazioni relative allo stesso stato puro sono in generale più correlate di configurazioni appartenenti a stati diversi.

Come avremo modo di vedere in dettaglio nel §1.4 in relazione al modello p -spin, il criterio con cui si ricava la parametrizzazione della matrice degli overlap $q_{\alpha\beta}$ per mezzo dell’*ansatz* di Parisi è basato su uno schema di rottura gerarchica di simmetrie. Tale struttura si ripercuote inevitabilmente sull’organizzazione degli stati nello spazio delle fasi determinandone una topologia ultrametrica. Se si considerano ad esempio tre stati puri α , β e γ , la probabilità congiunta che essi abbiano rispettivamente overlap q_1 , q_2 e q_3 , si dimostra essere uguale a:

$$P(q_1, q_2, q_3) = \frac{1}{2}x(q_1)P(q_1)\delta(q_1 - q_2)\delta(q_2 - q_3) + \frac{1}{2}[P(q_1)P(q_2)\theta(q_1 - q_2)\delta(q_2 - q_3) + \text{permutazioni}]$$

diversa da zero solamente nel caso in cui due overlap siano uguali ed il terzo sia minore o uguale ai primi due. Come si è detto, il parametro d’ordine di overlap è legato alla distanza euclidea fra due stati puri dalla relazione (1.7). Il fatto che lo spazio delle fasi sia corredato da una distanza ultrametrica dispone quindi che, presi comunque tre punti α , β e γ nello spazio degli stati, il triangolo che ha questi punti come vertici sia necessariamente equilatero o isoscele. Se si affianca quest’ultima proprietà alle caratteristiche della procedura di parametrizzazione della matrice $q_{\alpha\beta}$, ciò che ne consegue è una ripartizione degli stati secondo la tipica struttura ad albero mostrata in Figura 1.3.2

1.4 Il modello p -spin in campo medio

Il modello p -spin rappresenta una generalizzazione del modello di Sherrington-Kirkpatrick che a sua volta costituisce una rivisitazione del modello di Edwards-Anderson (1.2) esattamente risolubile nell'ambito della teoria RSB. Esso è definito a partire dall'Hamiltoniana:

$$H = - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 i_2 \dots i_p} S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_p} - h \sum_{i=1}^N S_i \quad (1.17)$$

in cui le $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ sono variabili casuali con valore aspettato nullo e varianza $\overline{J_{i_1 i_2 \dots i_p}^2} = p! / 2N^{p-1}$. Le variabili S_i possono essere spin di Ising o anche variabili continue, nel qual caso si può introdurre il vincolo sferico $\sum_i S_i = N$. In questo contesto ci occuperemo di descrivere solamente il primo caso rimandando a [12, 13, 14, 15] per il modello sferico.

Come è stato osservato da Derrida [16, 17], nel limite di $p \rightarrow \infty$ la correlazione fra i livelli energetici associati alla (1.17) diventa trascurabile ed il modello può essere risolto esattamente senza bisogno di introdurre le repliche. In questo caso il sistema esibisce una temperatura critica al disotto della quale esso congela completamente nello stato fondamentale. Questo stesso risultato può essere ricavato attraverso il metodo delle repliche [18] ricorrendo al primo passo di rottura della simmetria previsto dallo schema di Parisi (d'ora in avanti 1RSB). Il parametro d'ordine $q(x)$ è costituito semplicemente da una funzione a gradino che nel punto $x_0 = T/T_c$, con $T_c = 1/2\sqrt{\log 2}$, passa da zero ad uno. Sebbene vi sia un salto nel parametro d'ordine, nessuna quantità termodinamica presenta discontinuità al punto critico, in quanto l'energia libera dipende unicamente dall'integrale in x della funzione $q(x)$, proporzionale ad $1 - x_0$ in $T < T_c$ e nullo nella fase calda. Il salto nel parametro d'ordine a T_c è in netto contrasto con il caso in cui $p = 2$, dove la $q(x)$ varia con continuità al variare di x nell'intervallo $[0, 1]$.

Per un valore generico di p [19] il modello manifesta un comportamento a bassa temperatura decisamente più articolato. Analogamente al caso in cui $p \rightarrow \infty$, la soluzione replico-simmetrica fornisce un'entropia negativa per $T < T_0 = 1/2\sqrt{\log 2}$ e non vi sono soluzioni stabili che prevedano una variazione continua del parametro $q(x)$ per $p > 2$. Tuttavia si dimostra che già a $T_c > T_0$ (con T_c dipendente da p), il modello prevede una transizione di fase con rottura di simmetria delle repliche 1RSB simile a quella che si incontra nel limite di p grande. A differenza di quest'ultimo caso il massimo valore di q risulta essere minore di uno in quanto il sistema congela solo parzialmente. Riprendendo l'argomento di Derrida ci si aspetta che per un valore di p grande ma finito, i livelli energetici siano correlati solo in minima parte ed i singoli stati d'equilibrio siano costituiti da poche configurazioni, così che l'overlap fra di esse sia prossimo ad uno. Per valori di p sempre minori la correlazione dei livelli energetici aumenta e l'overlap fra due configurazioni dello stesso stato diminuisce in prossimità del punto critico. Per un valore finito di p , inoltre, la soluzione 1RSB diventa instabile al di sotto di una seconda temperatura critica ed il sistema passa ad una fase con

rottura completa della simmetria delle repliche (FRSB), simile alla quella che si ottiene nel caso di Sherrington-Kirkpatrick in presenza di un campo magnetico.

I risultati elencati sino ad ora posso essere ricavati formalmente a partire dall'espressione (1.11). Assumendo che le costanti di accoppiamento $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ della (1.17) siano distribuite con legge Gaussiana:

$$P(J_{i_1 i_2 \dots i_p}) = \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p!}} \exp\left(-\frac{N^{p-1}}{p!} J_{i_1 i_2 \dots i_p}^2\right)$$

e procedendo come d'abitudine si ricava:

$$\overline{Z^n} = \text{Tr}_n \exp\left\{\frac{\beta^2 N}{4} \left[n + \sum_{(\alpha\beta)} \left(\frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right)^p\right] + \beta h \sum_\alpha \sum_i S_i^\alpha\right\} \quad (1.18)$$

in cui la traccia Tr_n indica una somma su tutte le variabili di spin associate alle n repliche del sistema. Per calcolare tale traccia è possibile imporre inizialmente il vincolo $\frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta = q_{\alpha\beta}$, attraverso un opportuno moltiplicatore di Lagrange $\lambda_{\alpha\beta}$, e quindi integrare su $q_{\alpha\beta}$. Moltiplicando la (1.18) per una delta di Dirac:

$$\delta\left(\frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta - q_{\alpha\beta}\right) = \frac{N}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} d\lambda_{\alpha\beta} e^{\lambda_{\alpha\beta} (\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta - N q_{\alpha\beta})}$$

ed integrando su tutti i possibili valori di $q_{\alpha\beta}$ si ricava subito:

$$\overline{Z^n} = \frac{N}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \prod_{\alpha < \beta} dq_{\alpha\beta} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \prod_{\alpha < \beta} d\lambda_{\alpha\beta} \exp\left\{-nN \left[\frac{1}{n} G(\lambda_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta}) - \frac{1}{4} \beta^2\right]\right\} \quad (1.19)$$

avendo posto:

$$G(\lambda_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta}) = -\frac{1}{4} \beta^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^p + \frac{1}{2} \sum_{(\alpha\beta)} \lambda_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} + \\ - \log \text{Tr} \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{(\alpha\beta)} \lambda_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta h \sum_\alpha S^\alpha\right]$$

In questo caso la traccia Tr denota la somma sulle variabili $S^\alpha = \pm 1$ con $\alpha = 1, 2, \dots, n$, indipendenti dalla posizione reticolare dei singoli spin. Applicando alla (1.19) il metodo del punto di sella nel limite di $N \rightarrow \infty$ si ottiene dunque:

$$\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{1}{n} G - \frac{1}{4} \beta^2\right) \quad (1.20)$$

Affinchè si possa ottenere una soluzione stabile è necessario a questo punto ricercare i massimi della soluzione (1.20) dell'equazione di punto di sella. D'altra parte, poichè le matrici delle fluttuazioni di $\lambda_{\alpha\beta}$ e $q_{\alpha\beta}$ includono $\frac{1}{2}n(n-1)$ parametri indipendenti,

per $n < 1$ esse appartengono ad uno spazio di dimensioni negative. La condizione che gli autovalori della matrice Hessiana $H_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} = \partial^2 f / \partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\gamma\delta}$ siano non negativi comporta in questo caso una ricerca del massimo della funzione G [10].

Nella fase di alta temperatura la soluzione potrà avvalersi dell'ipotesi replico-simmetrica che si ottiene imponendo $q_{\alpha\beta} = q$ e $\lambda_{\alpha\beta} = \lambda \forall \alpha\beta$ nella (1.20):

$$\beta f = \frac{1}{4}\beta^2(n-1)q^p + \frac{1}{2}\lambda[(n-1)q+1] - \frac{1}{4}\beta - \frac{1}{n}\log \int Dx [2 \cosh(\sqrt{\lambda}x + \beta h)]^n \quad (1.21)$$

avendo posto $Dx = dx e^{-x^2} / \sqrt{2\pi}$. L'ultimo termine della (1.21) si può semplificare osservando che:

$$\frac{1}{n} \int Dx [2 \cosh(\sqrt{\lambda}x + \beta h)]^n \xrightarrow{n \rightarrow 0} \int Dx \log[2 \cosh(\sqrt{\lambda}x + \beta h)]$$

Da cui, in definitiva:

$$\beta f = \frac{1}{4}\beta^2 q^p + \frac{1}{2}\lambda(1-q) - \frac{1}{4}\beta^2 - \int Dx \log[2 \cosh(\sqrt{\lambda}x + \beta h)] \quad (1.22)$$

Imponendo sulla (1.22) la condizione di stazionarietà si ricava dunque:

$$\lambda = \frac{1}{2}\beta^2 p q^{p-1} \quad q = \int Dx \tanh^2(\sqrt{\lambda}x + \beta h) \quad (1.23)$$

Per $p \rightarrow \infty$, quando il sistema può essere descritto per mezzo del modello REM [16, 17], esiste un'unica soluzione stabile della forma:

$$\lambda = 0 \quad q = \tanh^2(\beta h)$$

Tale soluzione è ancora stabile per un valore di p generico. Studiando gli autovalori del Hessiano, si ricava infatti [20]:

$$\frac{1}{p-1} \frac{q}{\lambda} - \int Dx \operatorname{sech}^4(\sqrt{\lambda}x) > 0 \quad (1.24)$$

Sostituendo la soluzione $\lambda \sim q^{p-1}$, il primo termine della (1.24) tende all'infinito in $q = 0$ per ogni $p > 2$; la soluzione è quindi stabile a tutte le temperature, proprietà questa in netto contrasto con il caso $p = 2$ in cui la soluzione replico-simmetrica risulta stabile unicamente per $T > 1$. Per p finito le equazioni di campo medio forniscono anche altre soluzioni esprimibili in forma esplicita nei casi limite in cui $p \gg 1$ o $p = 2 + \varepsilon$, ma nessuna di esse è stabile nel senso indicato dalla (1.24). L'unica soluzione stabile in assenza di campo magnetico è dunque la soluzione paramagnetica $q = 0$. Tuttavia, derivando la (1.22) si ricava:

$$s = \frac{1}{4}\beta^2 q^p - \frac{1}{2}\lambda - \frac{1}{4}\beta^2 + \int Dx \log[2 \cosh(\sqrt{\lambda}x)]$$

che per $q = \lambda = 0$ implica:

$$s = \log 2 - \frac{1}{4}\beta^2$$

positiva solo nel caso in cui $\beta = \beta_0 < 2\sqrt{\log 2}$. In altre parole deve esistere una transizione di fase ad una temperatura T_c maggiore di $T_0 = 1/\beta_0$ che implichi la rottura della simmetria delle repliche. Poichè la soluzione di alta temperatura, di fatto, non diventa mai instabile, la nuova soluzione non potrà essere simile alla prima, ma dovrà distaccarsene non appena $T < T_c$ provocando un salto nel parametro d'ordine.

Tale soluzione può essere ricercata adottando lo schema di rottura della simmetria delle repliche proposto da Parisi [8, 9, 10, 11] ed anticipato nel §1.3.2. Nella forma più generale esso consiste nel parametrizzare la matrice degli overlap $q_{\alpha\beta}$ richiedendo che:

$$q_{\alpha\beta} = q_i \quad \begin{cases} \text{se} & I\left(\frac{\alpha}{m_i}\right) \neq I\left(\frac{\beta}{m_i}\right) \\ \text{e} & I\left(\frac{\alpha}{m_{i+1}}\right) = I\left(\frac{\beta}{m_{i+1}}\right) \end{cases} \quad i = 0, K \quad (1.25)$$

in cui $I(x)$ è una funzione che assume un valore pari al primo intero maggiore o uguale ad x , mentre gli m_i sono numeri interi tali che il rapporto m_{i+1}/m_i assume un valore intero per $i = 1, K$ laddove $m_0 = 1$ ed $m_{K+1} = n$. La matrice $q_{\alpha\beta}$ dipende in tal modo da $K+1$ parametri q_i e K parametri m_i strutturati in modo tale che, se si chiama M_K il sottoinsieme delle matrici definite come nella (1.25), si abbia $M_K \subset M_{K+1}$. All'atto pratico la (1.25) implica l'applicazione della seguente procedura iterativa:

1. Si divide la matrice $n \times n$ in $n/m_1 \times n/m_1$ blocchi di taglia m_1 e si assegna il valore q_0 agli elementi dei blocchi non diagonali.
2. Ciascun blocco diagonale viene quindi suddiviso in $m_1/m_2 \times m_1/m_2$ sottoblocchi di taglia $m_2 < m_1$ assegnando il valore $q_1 \geq q_0$ a tutti gli elementi del blocco non diagonali.

La procedura si ripete continuando a suddividere i blocchi diagonali in sottoblocchi di dimensione decrescente:

$$n \geq m_1 \geq m_2 \geq \dots \geq m_{i-1} \geq m_i \geq 1$$

organizzati in modo tale che tutti i sottoblocchi di una certa dimensione siano costituiti da elementi identici $q_i \geq q_{i-1} \geq \dots \geq q_0$ ad eccezione dei blocchi diagonali e che gli elementi della diagonale principale siano tutti identicamente nulli (Figura 1.7). Per descrivere l'insieme dei parametri q_i nel limite di $n \rightarrow 0$ si può costruire una funzione costante a tratti che assume i valori degli elementi q_i della matrice:

$$q(x) = q_i \quad m_i \leq x < m_{i+1}$$

nel limite di $n \rightarrow 0$ e $K \rightarrow \infty$ la $q(x)$ apparirà dunque come una funzione continua nell'intervallo $[0, 1]$.

Quanto detto in precedenza in merito al modello p -spin suggerisce che la procedura di rottura possa essere interrotta, in questo caso, al primo passo, dopo aver suddiviso

0	q_2	q_1	q_0	
q_2	0			
q_1	0	q_2		
	q_2	0		
q_0		0	q_2	q_1
		q_2	0	
		q_1	0	q_2
			q_2	0

Figura 1.7: Esempio “pittresco” della matrice di Parisi nel caso $n = 16$, $m_1 = 8$ e $m_2 = 4$

la matrice $n \times n$ in n/m blocchi da m elementi. Complessivamente vi saranno $n(m-1)$ elementi di valore q_1 e $n(n-m)$ di valore $q_0 \leq q_1$. Separando nelle sommatorie della (1.22) gli addendi per i quali $q_{\alpha\beta} = q_0$ da quelli in cui $q_{\alpha\beta} = q_1$ si ottiene infine:

$$\begin{aligned} \frac{1}{n}G &= \frac{1}{4}\beta^2[mq_0^p + (1-m)q_1^p] - \frac{1}{2}[\lambda_0q_0m + \lambda_1q_1(1-m)] + \frac{1}{2}\lambda_1^2 + \\ &\quad - \frac{1}{m} \int Dx_0 \log \int Dx_1 [2 \cosh(x_0\sqrt{\lambda_0} + x_1\sqrt{\lambda_1 - \lambda_0} + \beta h)]^m \end{aligned} \quad (1.26)$$

Nel limite di $p \rightarrow \infty$ l'equazioni di campo medio derivanti dalla (1.27) producono le soluzioni:

$$q_0 = \tanh^2(\beta hm) \quad q_1 = 1 \quad (1.27)$$

con $m = T/T_0$ [18]. Lo studio della stabilità della soluzione assicura che non vi siano altre soluzioni in cui l'ordine di rottura della simmetria delle repliche è maggiore di uno [18].

A differenza del modello SK, in cui lo schema di rottura della simmetria delle repliche deve essere iterato fino all'ordine infinito, in questo caso un unico passo di rottura è sufficiente a produrre una soluzione stabile. Lo spazio delle fasi è suddiviso in due famiglie di stati organizzati in modo tale che gli stati appartenenti alla stessa famiglia abbiano overlap q_1 , mentre gli stati appartenenti a famiglie differenti abbiano overlap $q_0 = 0$ in assenza di un campo magnetico esterno (Figura 1.8). I parametri

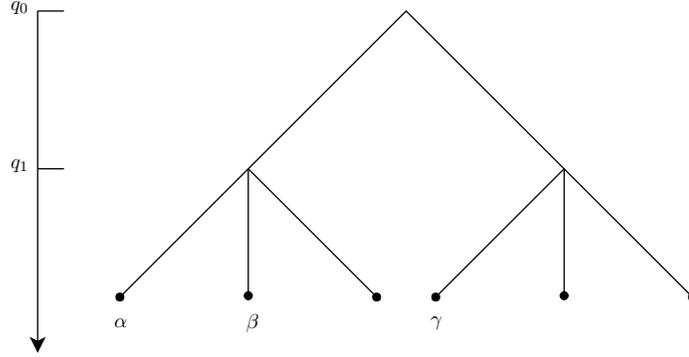


Figura 1.8: Struttura ad albero dell'overlap 1RSB. Gli stati sono suddivisi in due famiglie e solo gli stati appartenenti alla stessa famiglia hanno overlap $q_{\alpha\beta} \neq 0$.

d'ordine $q(x)$ e $P(q)$ sono dati rispettivamente da (Figura 1.9):

$$q(x) = q_0 \theta\left(\frac{T}{T_c} - x\right) + q_1 \theta\left(x - \frac{T}{T_c}\right) \quad (1.28a)$$

$$P(q) = m \delta(q - q_0) + (1 - m) \delta(q - q_1) \quad (1.28b)$$

Il significato della condizione $q_1 = 1$ espressa nella (1.27) coincide con la circostanza in cui la magnetizzazione locale in ogni singola valle è pari al suo valore più alto $m_i = \pm 1$. Nella fase di bassa temperatura il sistema è dunque “congelato” in una specifica configurazione e non vi sono fluttuazioni nella magnetizzazione. Allo stesso modo con la condizione $q_0 = \tanh^2(\beta hm)$ si esprime che la sovrapposizione fra due valli differenti è pari al quadrato della magnetizzazione media del sistema, ad indicare che la distanza fra due valli distinte nel paesaggio delle fasi è la massima possibile.

Per un valore generico di p la (1.26) non fornisce una terna di soluzioni in forma esplicita come la (1.27). Differenziando rispetto a q_0 , q_1 ed m nel caso in cui $h = 0$ si

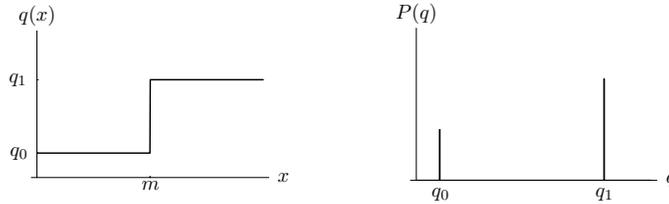


Figura 1.9

ottiene:

$$\lambda_0 = q_0 = 0 \quad (1.29a)$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}p\beta^2 q_1^{p-1} \quad (1.29b)$$

$$q_1 = \frac{\int Dx \cosh^m(\sqrt{\lambda_1}x) \tanh^2(\sqrt{\lambda_1}x)}{\int Dx \cosh^m(\sqrt{\lambda_1}x)} \quad (1.29c)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}\lambda_1 q_1 - \frac{1}{4}\beta^2 q_1^p\right)m^2 + \log \int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1}) &= \\ &= m \frac{\int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1}) \log[\cosh(x\sqrt{\lambda_1})]}{\int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1})} \end{aligned} \quad (1.29d)$$

che risolte numericamente (si veda il §4.6.1 per una descrizione più dettagliata della procedura numerica utilizzata) forniscono i risultati rappresentati in Figura 1.10. La densità di energia libera associata alla soluzione 1RSB sarà data dalla:

$$f = -\frac{1}{4}\beta[1 + (p-1)(1-m)q_1^p - pq_1^{p-1}] - \frac{\log 2}{\beta} - \frac{1}{\beta m} \log \int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1}) \quad (1.30)$$

da cui si ricava:

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{2}\beta[1 + (1-m)q_1^p] \quad (1.31)$$

La temperatura critica può essere determinata sempre dalle (1.29) imponendo la condizione $m(T_c) = 1$. Nel caso in cui $p = 3$ si ottiene in particolare $T_c = 0.6514\dots$, maggiore della temperatura $T_0 = 1/2\sqrt{\log 2} \simeq 0.6$ in corrispondenza della quale si osserva il cambiamento di segno dell'entropia replico-simmetrica.

Riassumendo per $p \rightarrow \infty$ il paesaggio energetico è suddiviso in valli costituite da una singola configurazione di spin. Le energie corrispondenti all'insieme delle configurazioni vanno a formare in questo caso un sistema di variabili casuali indipendenti gaussianamente distribuite ed il sistema congela completamente nello stato fondamentale non appena $T < T_c$. Per un valore di p grande ma finito cominciano ad insorgere delle piccole correlazione fra i livelli energetici ed il congelamento nella fase di bassa temperatura avviene in modo incompleto. Finchè il numero di configurazioni microscopiche relative ad una stessa valle è piccolo, l'overlap mantiene un valore prossimo ad uno. Quando p diminuisce, l'ampiezza delle valli in prossimità di T_c aumenta fino a quando la transizione diventa continua per $q \rightarrow 2$. Se confrontato con il modello di Sherrington-Kirkpatrick, il comportamento delle valli di energia libera potrebbe essere paragonato a quello di un sistema sottoposto ad un campo magnetico esterno che aumenta proporzionalmente a p e svanisce per $p \rightarrow 2$. Lo studio della stabilità della soluzione 1RSB conduce in questo caso alla condizione:

$$\frac{1}{p-1} \frac{q_1}{\lambda_1} - \frac{\int Dx \cosh^{m-4}(x\sqrt{\lambda_1})}{\int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1})} > 0$$

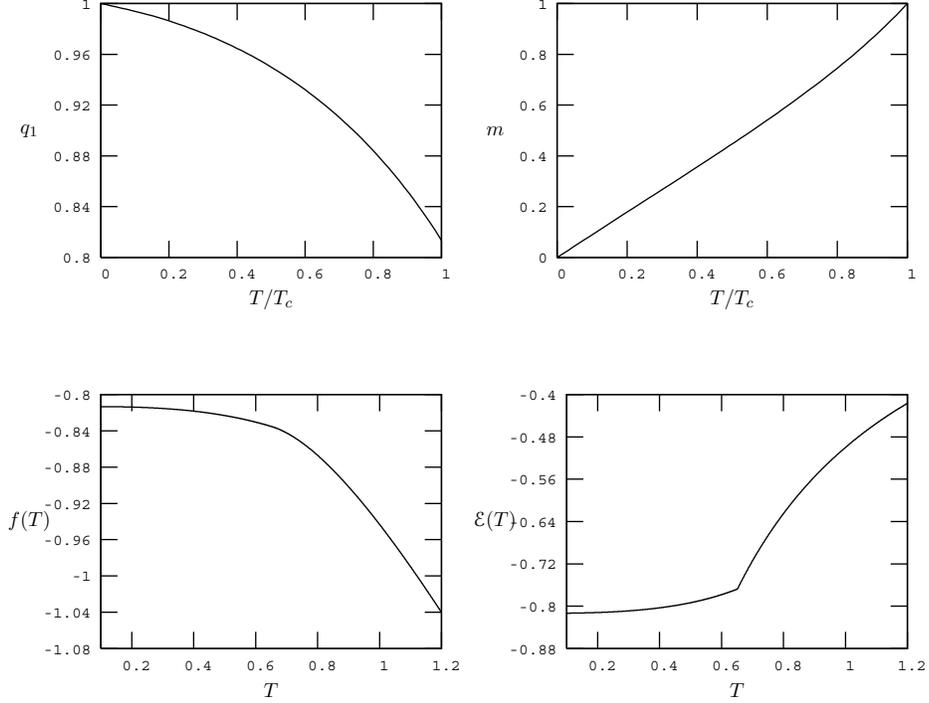


Figura 1.10: In alto i parametri d'ordine q_1 (a sinistra) ed m (a destra) ricavati dalla soluzione numerica del sistema (1.29) nel caso in cui $p = 3$. In basso la densità di energia libera (a sinistra) e densità di energia (a destra).

la quale evidenzia l'esistenza di una seconda transizione di fase in corrispondenza della temperatura:

$$T_G = \begin{cases} \frac{2}{3} \frac{p^{3/2}}{\sqrt{\pi}} 2^{-p} & \text{per } p \gg 1 \\ \sqrt{\frac{1}{2}p} \varepsilon^{-\varepsilon/4} (1 - \sqrt{6\varepsilon}) & \text{per } p = 2 + \varepsilon \end{cases} \quad (1.32)$$

Le temperature di transizione così ricavate hanno la stessa forma che nel caso di un modello SK in presenza di un campo magnetico h_{eff} [20], dove:

$$h_{eff} = \begin{cases} \sqrt{2p} \log 2 + o(\log p) & \text{per } p \gg 1 \\ 6^{1/4} (p-2)^{3/4} [1 + o(\sqrt{p-2})] & \text{per } p = 2 + \varepsilon \end{cases} \quad (1.33)$$

Per $T < T_G$ il sistema è caratterizzato da una completa rottura della simmetria delle repliche [19].

Il modello di campo medio di un sistema a p -spin interazioni possiede, in conclusione, tre fasi differenti. Per $T > T_c$ il parametro d'ordine $q(x)$ è identicamente nullo ed il sistema esibisce un comportamento di tipo paramagnetico. Sebbene questa fase

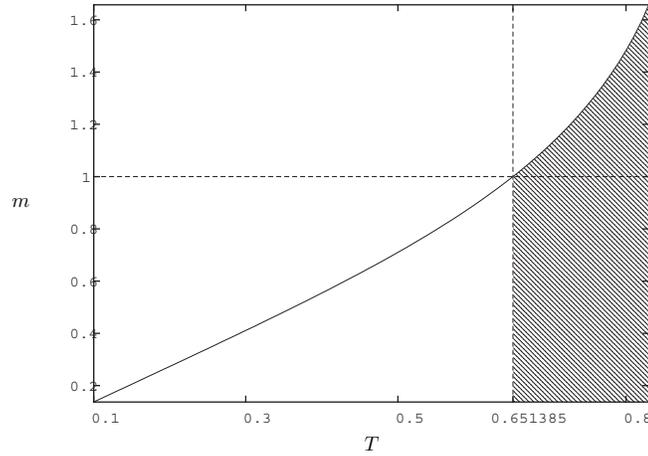


Figura 1.11: Parametro d'ordine m in funzione della temperatura per $p = 3$. In corrispondenza della regione tratteggiata $m > 1$ la soluzione 1RSB diventa instabile.

sia stabile rispetto alle piccole fluttuazioni dei parametri d'ordine, l'entropia ad essa associata diventa negativa in corrispondenza della temperatura $T_0 = 1/2\sqrt{\log 2}$. Alla temperatura $T_c > T_0$ il sistema transita in una nuova fase di tipo 1RSB. Nonostante la transizione si manifesti in modo discontinuo per quanto concerne il parametro d'ordine $q(x)$, essa non è accompagnata dallo scambio di calore latente e le funzioni termodinamiche non presentano discontinuità al punto critico. Nella fase 1RSB il sistema si stabilizza all'interno di valli di energia libera la cui ampiezza diminuisce all'aumentare di p . A temperatura $T = T_G$ il sistema passa ad una fase FRSB qualitativamente simile a quella che si osserva in un modello di Sherrington-Kirkpatrick in presenza di un campo magnetico esterno.

1.5 Stati metastabili e complessità

Entrambe le fasi di bassa temperatura descritte nel §1.4 sono caratterizzate da un numero estremamente elevato di stati stabili e metastabili che conferiscono allo spazio delle fasi l'orografia di un paesaggio montuoso ricco di valli e rilievi. Da un punto di vista del comportamento del sistema all'equilibrio una valle è una regione dello spazio delle configurazioni separata dalle altre regioni da barriere di energia libera la cui altezza diverge nel limite termodinamico [21]. Per fuoriuscire dalla valle in cui si trova il sistema deve attraversare una regione in cui l'energia libera è più alta di quella della valle stessa di un fattore che tende all'infinito con il numero di elementi N . Da un punto di vista dinamico, del resto, una valle rappresenta un sottoinsieme di configurazioni in cui il sistema risiede per un tempo medio che diverge con N . Queste due definizioni sono accomunate dall'idea che durante un generico processo dinamico il sistema si sposti da

una valle all'altra sostando in ognuna di esse per un tempo $\tau \sim \exp(\beta\Delta)$, in cui Δ è l'altezza tipica delle barriere energetiche che popolano lo spazio delle fasi.

Supponendo di etichettare ogni valle con un certo indice α e di associare ad ognuna di esse un'energia libera F_α ed una densità $f_\alpha = F_\alpha/N$, si può esprimere l'energia libera del sistema in una fase di bassa temperatura attraverso la somma dei contributi associati ad ogni singola valle:

$$Z = e^{-\beta N\phi} = \sum_{\alpha} e^{-\beta N f_{\alpha}}$$

avendo indicato con ϕ la densità di energia libera propriamente detta. In uno scenario in cui il numero di minimi locali è estremamente alto si potrà approssimare l'indice α ad una variabile reale:

$$Z = \int df e^{-\beta N f} \mathcal{N}(\beta, f)$$

in cui $\mathcal{N}(\beta, f)$ rappresenta il numero di stati disponibili nell'intervallo di energia libera $[f, f + df]$. Adottando una notazione esponenziale si può scrivere:

$$\mathcal{N}(\beta, f) \propto e^{N\Sigma(\beta, f)} \quad (1.34)$$

La funzione $\Sigma(\beta, f)$ è detta *complessità* o *entropia configurazionale* e costituisce uno strumento cruciale per la comprensione delle proprietà statiche e dinamiche dei vetri di spin e dei sistemi complessi in generale [22, 23, 24, 25, 26].

Formalmente la Σ è una funzione strettamente positiva della variabile f , definita in un intervallo $[f_{\min}, f_{\max}]$ tale che:

$$\Sigma(f_{\min}) = 0 \quad \Sigma(f_{\max}) = \Sigma_{\max}$$

Al limite di $N \rightarrow \infty$ si potrà scrivere:

$$Z = e^{-\beta N\phi} = \int_{f_{\min}}^{f_{\max}} df e^{-N(\beta f - \Sigma)} \sim e^{-N \min_f [\beta f - \Sigma]} \quad (1.35)$$

avendo usato un'approssimazione di punto di sella. Dalla (1.35) si ricava in definitiva:

$$\beta\phi = \beta f^* - \Sigma(\beta, f^*)$$

in cui f^* è il valore di f che minimizza l'esponente della (1.35). Se f^* si trova nell'intervallo $[f_{\min}, f_{\max}]$ si ha che:

$$\left. \frac{d\Sigma}{df} \right|_{f=f^*} = \beta$$

Nel caso in cui f^* coincida con l'estremo inferiore dell'intervallo si ha in particolare:

$$\Sigma(f^*) = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi = f_{\min}$$

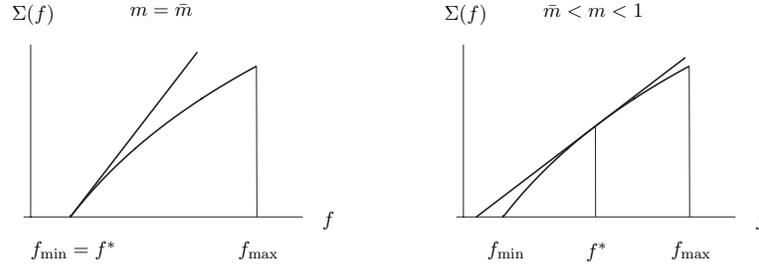


Figura 1.12

In questo caso la funzione di partizione è dominata dalle soluzioni ad energia minore, corrispondenti agli stati d'equilibrio del sistema.

Nell'ambito dei vetri di spin il calcolo della complessità ha costituito un importante argomento d'indagine a partire dallo storico lavoro di Bray e Moore circa gli stati metastabili associati alle soluzioni delle equazioni di campo medio di Thouless, Anderson e Palmer [27] (tradizionalmente indicate con l'acronimo TAP) per il modello di Sherrington-Kirkpatrick. Recentemente questo approccio è stato riconsiderato alla luce di alcune importanti proprietà di natura supersimmetrica. In particolare si è notato che l'azione effettiva utilizzata per calcolare il numero di stati TAP con densità di energia libera f gode di una particolare forma di supersimmetria che si ottiene dalla generalizzazione della simmetria di Becchi-Rouet-Stora-Tyutin (BRST) [22, 23]. Tale proprietà può essere utilizzata per generare una serie di identità di Ward che riducono notevolmente la molteplicità delle soluzioni dell'equazione di punto di sella semplificando in modo considerevole il calcolo della Σ .

Una tecnica alternativa, indipendente dall'approccio TAP, è stata formulata per la prima volta da Monasson [28] con l'intenzione di estendere questo stesso tipo di analisi a sistemi in cui l'energia libera TAP non può essere definita o ricavata esplicitamente. Secondo questa formulazione la complessità può essere definita come la trasformata di Legendre dell'energia libera statica di una collezione di m sistemi vincolati in uno stesso stato d'equilibrio. Un argomento chiave, relativamente ai modelli in cui entrambi i metodi descritti risultano accessibili, consiste naturalmente nel confrontare i risultati ottenuti con le due procedure.

Senza la pretesa di essere esaustivi in questo paragrafo verrà delineata una breve panoramica dei principali risultati inerenti la complessità del modello p -spin in campo medio, con particolare attenzione ai riferimenti [29, 25, 26], ai quali si rimanda per una discussione più approfondita.

Si supponga di disporre di m copie identiche dello stesso sistema, accoppiate debolmente da un potenziale attrattivo eventualmente tendente a zero. Nella fase vetrosa il

potenziale attrattivo forzerà le repliche nello stesso stato:

$$Z_m = \sum_{\alpha} e^{-\beta m N f_{\alpha}} \sim \int_{f_{\min}}^{f_{\max}} df e^{-N[m\beta f - \Sigma]}$$

Quest'ultima espressione è dominata dalla corretta soluzione di punto di sella quando $m \rightarrow 1$. Per $m \neq 1$:

$$Z_m \sim e^{-N[m\beta f^* - \Sigma(f^*)]} \quad \left. \frac{d\Sigma}{df} \right|_{f=f^*} = m\beta$$

Quando il sistema è nella fase rotta ($T < T_c$) si può supporre esista un m sufficientemente piccolo da fare in modo che $f^* > f_{\min}$. Aumentando m si arriverà ad un valore \bar{m} tale che $f(\bar{m}) = f_{\min}$; per $m > \bar{m}$ si ha sempre $f(m) = f_{\min}$. In altre parole l'assenza di una degenerazione nel termine di complessità (garantita dall'aver imposto che le repliche si trovino tutte nello stesso stato) unita al prolungamento analitico $m \in \mathbb{N} \rightarrow m < \bar{m} < 1$, permette di percorrere, al variare del parametro m , l'intero spettro di energia libera degli stati metastabili. Ponendo $\phi(\beta, m) = (\beta m N)^{-1} \log Z_m$ si ricava in definitiva:

$$f^*(m) = \frac{\partial m \phi(\beta, m)}{\partial m} \quad (1.36a)$$

$$\Sigma(f^*) = \beta m^2 \frac{\partial \phi(\beta, m)}{\partial m} \quad (1.36b)$$

Nel caso del modello p -spin l'energia libera del sistema replicato $\phi(\beta, m)$ coincide formalmente con la (1.30) se si esclude la condizione di stazionarietà $\partial \phi / \partial m = 0$ che contraddistingue il sistema all'equilibrio. La complessità sarà data pertanto da:

$$\Sigma(m) = \frac{1}{4}(\beta m)^2 (p-1) q_1^p + \log \int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1}) - \frac{\int Dx \log[\cosh(x\sqrt{\lambda_1})]}{\int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1})} \quad (1.37)$$

Un altro metodo per il calcolo della complessità, ispirato all'interpretazione microscopica dell'entropia, consiste nel calcolare direttamente il logaritmo del numero degli stati metastabili corrispondenti alle soluzioni delle equazioni TAP per le magnetizzazioni locali. Per il modello p -spin, queste ultime sono state ricavate da Rieger [29] nella forma:

$$G_i = \tanh^{-1}(m_i) - \frac{\beta}{(p-1)!} \sum_{i_2 < \dots < i_p} J_{ii_2 \dots i_p} m_{i_2} \dots m_{i_p} + \\ - \beta h + m_i \frac{(\beta J)^2}{2} p(p-1)(1-q)q^{p-2} = 0 \quad (1.38)$$

dove $q = N^{-1} \sum_i m_i^2$. La derivazione della (1.38) discende dalle seguenti osservazioni: il secondo ed il terzo termine del secondo membro descrivono la classica relazione di

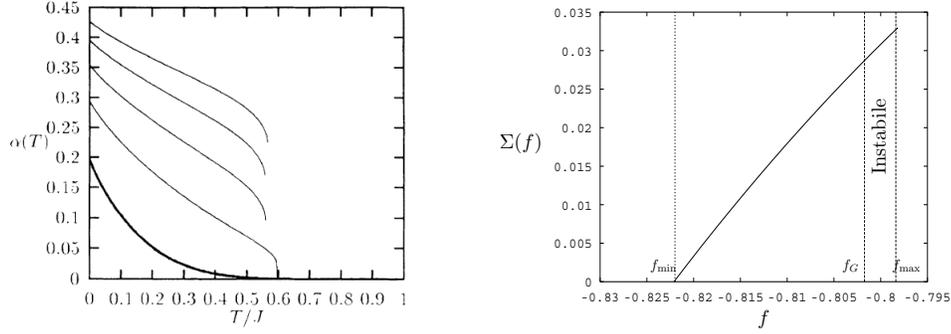


Figura 1.13: A sinistra la funzione $\alpha(T) = \log N_s(T)/N$ calcolata da Rieger [29] per diversi valori di $p \geq 2$. A destra la complessità in funzione della densità di energia libera per un modello p -spin con $p = 3$ a temperatura $T = 0.5$, tratto da [25].

campo medio che si ottiene nel caso dei modelli ferromagnetici, mentre l'ultimo termine, detto di *Osanger*, esprime il contributo al campo locale prodotto dallo stesso spin S_i . La magnetizzazione m_i nel sito i induce infatti uno stato di magnetizzazione del sito j che a sua volta influenza il campo locale in corrispondenza di i . La (1.38) può essere ottenuta alternativamente derivando rispetto alla variabile m_i l'energia libera:

$$\beta f = \frac{1}{2N} \sum_i \left[(1 + m_i) \log \frac{1 + m_i}{2} + (1 - m_i) \log \frac{1 - m_i}{2} \right] +$$

$$- \frac{\beta}{N} \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 i_2 \dots i_p} m_{i_1} m_{i_2} \dots m_{i_p} - \frac{(\beta J)^2}{4} [(p-1)q^p - pq^{p-1} + 1] \quad (1.39)$$

Seguendo [30] il numero di soluzioni $N_s(f)$ associate al valore f della densità di energia libera, è dato da:

$$N_s(f) = N^2 \int_0^1 dq \int_{-1}^1 \prod_i dm_i \delta\left(Nq - \sum_i m_i\right) \delta\left(Nf - \sum_i f(m_i)\right) \prod_i \delta(G_i) |\det \mathbf{A}| \quad (1.40)$$

dove $|\det \mathbf{A}|$ è il determinante Jacobiano che normalizza la $\delta(G_i)$. Formalmente il compito da assolvere nei confronti della (1.40) consiste nell'individuare una rappresentazione integrale delle funzioni delta e valutare successivamente la media sul disordine congelato mediante il metodo del punto di sella per grandi valori di N . In previsione del fatto che $N_s \propto \exp(N\Sigma(f))$, quest'ultima dovrà essere effettuata sulla quantità estensiva $\log N_s(f)$ introducendo in tal modo le medesime difficoltà formali che, come spiegato nel §1.4, conducevano all'utilizzo del metodo delle repliche. Tuttavia, come è osservato in [30], nella regione in cui le soluzioni sono scorrelate, le due tipologie di media producono effettivamente lo stesso risultato, il che rende legittima la valutazione della media diretta della quantità $N_s(f)$ senza bisogno di ricorrere alle repliche.

Nel lavoro di Rieger del '92 gli strumenti formali a disposizione non permettevano ancora un'appropriata valutazione della $\delta(Nf - \sum_i f(m_i))$ che figura nella (1.40)

a causa della mancanza di una formulazione dell'energia libera TAP come somma di N termini locali $f(m_i)$. Rimuovendo tale vincolo dalla (1.40) è possibile, nondimeno, calcolare la quantità globale N_s che si ottiene dalla media non pesata delle varie $N_s(f)$. Procedendo in questo modo si dimostra [29] che il numero totale delle soluzioni TAP diventa esponenzialmente grande nella fase di bassa temperatura $N_s(T) \propto \exp[\alpha(T)N]$. Per ogni $p > 2$, in particolare, la funzione $\alpha(T)$ varia con discontinuità in corrispondenza della temperatura critica in accordo con quanto si osserva attraverso il metodo delle repliche nel parametro d'ordine di Edwards-Anderson. All'aumentare di p , la temperatura critica si avvicina molto rapidamente al valore esatto $T_c = 1/2\sqrt{\log 2}$ previsto per il REM e la $\alpha(T)$ assume le caratteristiche di una funzione a gradino.

Più di recente gli autori di [26] hanno completato l'analisi non appena descritta valutando, grazie alle nuove tecniche di calcolo fondate sull'utilizzo della supersimmetria BRST menzionate in precedenza, l'espressione della densità energia libera locale $f(m_i)$:

$$\beta f(m_i) = \frac{1}{2} \log(1 - m_i^2) - \log 2 + \frac{p-1}{p} m \tanh^{-1}(m) - \frac{1}{4} \beta^2 [1 + (p-2) - (p-1)q^p] \quad (1.41)$$

Utilizzando quest'ultima espressione assieme al metodo del punto di sella è possibile individuare due differenti soluzioni, di cui una prima supersimmetrica, equivalente alla (1.37), ed una seconda non-BRST. Ricorrendo ad argomenti di stabilità si può dimostrare che tali soluzioni descrivono gli stati metastabili in due regioni distinte dello spettro di f , separate l'una dall'altra dal valore di confine f_G , che a sua volta è legato alla transizione del sistema dalla fase 1RSB alla fase FRSB. Un resoconto più dettagliato di quest'ultima notevole proprietà (un approfondimento della quale ci porterebbe tuttavia troppo lontano dagli obiettivi di questa tesi) può essere ricavato dalla lettura dei riferimenti [26, 25, 31].

1.6 Comportamento dinamico

La presenza di una fase non ergodica in cui il paesaggio delle fasi è caratterizzato da una complessa struttura di minimi, valli e barriere suggerisce l'esistenza di una grande varietà di proprietà dinamiche anomale, la conoscenza delle quali costituisce fuor di dubbio un indispensabile completamento dello scenario finora descritto.

In generale, in presenza di un meccanismo di rottura dell'ergodicità, è necessario operare una distinzione fra le diverse scale di tempo che caratterizzano i fenomeni dinamici. Nei sistemi di volume infinito, in primo luogo, qualsiasi processo di evoluzione temporale è confinato in uno degli stati puri a disposizione, da cui il sistema non è in grado di fuggire in un tempo finito. Il problema della dinamica di rilassamento in uno stato puro è stato analizzato inizialmente da Sompolinsky e Zippelius [32] sulla base dell'approccio formale di De Dominicis ed altri [33, 34], mettendo alla luce uno scenario piuttosto innovativo caratterizzato dall'insorgere di un limite diverso da zero per le funzioni di correlazione e di risposta.

D'altra parte l'esistenza di barriere energetiche divergenti nel limite di $N \rightarrow \infty$ sembra esortare allo studio dei processi dinamici su scale di tempo infinite (divergenti nel limite termodinamico), in cui il sistema ha la facoltà di transitare da una valle ad un'altra valicando la barriera energetica che le separa. A questo argomento si sono dedicati sul piano teorico Sompolinsky, Sherrington, Ioffe e Lopatin (la teoria sviluppata dagli ultimi tre sarà ampiamente dibattuta nel prossimo capitolo) e su quello computazionale Mackenzie, Young, Billoire, Marinari e l'autore di questa tesi relativamente al modello p -spin con $p = 3$ [35].

In questo paragrafo descriveremo brevemente i risultati che sono stati prodotti applicando il primo dei due approcci indicati al modello p -spin, con particolare riferimento ai lavori di Kirkpatrick e Thirumalai [36, 37] sulla dinamica ergodica del modello di campo medio.

Dal momento che un'Hamiltoniana con spin di Ising non definisce una dinamica in modo univoco, è necessario introdurre quest'ultima separatamente, mediante equazioni di moto che imitano l'effetto dell'accoppiamento degli spin con il bagno termico. Una delle tecniche più comuni a questo scopo si avvale dal modello cinetico di Glauber (1963) in cui la dinamica è riprodotta mediante un processo stocastico basato sull'inversione di un singolo spin alla volta.

Un secondo metodo, di cui discuteremo da qui in avanti, è fondato sull'introduzione di un modello *soft-spin* nel quale gli spin di Ising $S_i = \pm 1$ vengono sostituiti da variabili continue σ_i sottoposte ad un potenziale simmetrico a doppia buca che favorisce fortemente le configurazioni $\sigma_i = \pm 1$, in modo che il modello di Ising possa essere ritrovato sotto un limite opportuno. Seguendo questa formulazione, l'Hamiltoniana del modello p -spin a temperatura $T = 1/\beta$ può essere espressa nella forma:

$$\beta H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} r_0 \sigma_i^2 + u \sigma_i^4 \right) - \beta \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p} - \beta \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i \quad (1.42)$$

in cui le variabili soft-spin σ_i possono variare con continuità nell'intervallo $[-\infty, +\infty[$, ed il vincolo $\sigma_i^2 = 1$ può essere ripristinato successivamente imponendo $u \rightarrow \infty$, $r_0 \rightarrow -\infty$ con $u/r_0 = \text{cost}$. La necessità di accoppiare gli spin del reticolo con un bagno termico può essere affrontata facendo ricorso all'equazione di Langevin:

$$\Gamma_0^{-1} \partial_t \sigma_i(t) = -\beta \frac{\delta H}{\delta \sigma_i(t)} + \xi_i(t) \quad (1.43)$$

Il prodotto $r_0 \Gamma_0$ rappresenta, in questo contesto, l'inverso del tempo di rilassamento del sistema, mentre l'interazione con il bagno termico è espressa attraverso il campo aleatorio $\xi_i(t)$. Quest'ultimo consiste in un rumore gaussiano con media nulla e varianza:

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2\Gamma_0^{-1} \delta_{ij} \delta(t - t') \quad (1.44)$$

Il significato fisico di questa formulazione può essere compreso pensando alla variabile σ_i come alla coordinata di un punto materiale sottoposto alla duplice azione di un

potenziale attrattivo βH e di una “frizione” Γ_0^{-1} . Il fatto che il termine viscoso Γ_0^{-1} compaia, oltre che nell’equazione di moto, anche nella varianza del campo $\xi_i(t)$, è detto relazione di Einstein ed è necessario affinché il sistema possa mettersi in equilibrio con il bagno termico a temperatura T .

A differenza di un tradizionale modello ferromagnetico, dove l’interazione dinamica con un bagno termico espresso dalla (1.43) porta esclusivamente ad un processo di rilassamento, nei vetri di spin con anisotropia sufficientemente bassa si possono manifestare processi dinamici intrinseci come ad esempio la precessione di ogni singolo spin attorno ad un campo locale agente su di esso. Se il bagno termico è sufficientemente intenso, tuttavia, anche in questi sistemi si osserva il tipico rilassamento all’equilibrio ed in questo caso l’equazione (1.43) può essere utilizzata.

In questa trattazione le quantità di maggiore interesse sono rappresentate dalla funzione di correlazione a due tempi:

$$C_{ij}(t, t') = \overline{\langle \sigma_i(t) \sigma_j(t') \rangle} \quad \text{con } t > t' \quad (1.45)$$

e dalla funzione di risposta lineare:

$$G_{ij}(t, t') = \frac{\partial \overline{\langle \sigma_i(t) \rangle}}{\partial h_j(t')} = T \chi_{ij}(t, t') \quad (1.46)$$

in cui le parentesi angolari $\langle \cdot \rangle$ rappresentano, in questa circostanza, la media sul rumore gaussiano ξ . La trasformata di Fourier della (1.46):

$$G_{ij}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} G_{ij}(t) \quad (1.47)$$

costituisce una funzione analitica nel semipiano $\text{Im } \omega > 0$ del piano complesso, mentre le parti reale ed immaginaria sono legate dalle relazioni di Kramers-Kronig:

$$\text{Re } G_{ij}(\omega) = -P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } G_{ij}(\omega')}{\omega - \omega'}$$

$$\text{Im } G_{ij}(\omega) = -P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Re } G_{ij}(\omega')}{\omega - \omega'}$$

Nel presente contesto, la relazione di fluttuazione e dissipazione (FDT) $G(t, t') = -\theta(t-t') \partial_t C(t, t')$ può essere scritta nella forma:

$$C_{ij}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} C_{ij}(t) = \frac{2}{\omega} \text{Im } G_{ij}(\omega) \quad (1.48)$$

laddove:

$$C_{ij}(\omega = 0) = G_{ij}(\omega = 0)$$

Utilizzando la formulazione funzionale introdotta da Martin, Siggia e Rose [38] è possibile costruire un funzionale generatore delle funzioni di correlazione e di risposta nella forma:

$$Z_J[l, \hat{l}] = \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} \exp \left\{ \int dt [l_i(t) \sigma_i(t) + i \hat{l}_i(t) \hat{\sigma}_i(t) + L(\sigma, \hat{\sigma})] \right\} \quad (1.49)$$

dove:

$$L(\sigma, \hat{\sigma}) = \sum_{i=1}^N i \hat{\sigma}_i(t) \left[-\Gamma_0^{-1} \partial_t \sigma_i(t) - \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i(t)} + i \Gamma_0^{-1} \hat{\sigma}_i(t) \right] - \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial(\beta H)}{\partial \sigma_i^2(t)} \quad (1.50)$$

in cui $\hat{\sigma}_i(t)$ rappresenta un campo ausiliare introdotto allo scopo di implementare il vincolo sulle $\sigma_i(t)$ imposto dalla (1.43) ed agisce sulla funzione di correlazione come un operatore di risposta $\partial/\partial h_i(t)$, così che:

$$\langle i \hat{\sigma}_j(t') \sigma_i(t) \rangle = \frac{\partial \langle \sigma_i(t) \rangle}{\partial h_j(t')}$$

Gli elementi $l_i(t)$ e $\hat{l}_i(t)$ rappresentano dei campi locali che, accoppiandosi linearmente con le variabili $\sigma_i(t)$ e $\hat{\sigma}_i(t)$, consentono di generare le funzioni di correlazione della teoria mediante la derivazione della quantità $\log Z$.

Come notato da De Dominicis [33], fin quando vale la condizione di normalizzazione $Z[0,0] = 1$, la media sul disordine può essere effettuata direttamente sul funzionale Z_J (anzichè sul logaritmo), la qual cosa mette al riparo dall'uso delle repliche.

Ricorrendo ad argomenti tradizionali [37] è possibile manipolare la (1.49) in modo da ricavare una Lagrangiana efficace di singolo sito corrispondente ad un'equazione di moto della forma:

$$\partial_t \sigma_i(t) = \mu(p-1) \int_{-\infty}^t dt' G(t-t') C^{p-2}(t-t') \sigma_i(t') - r_0 \sigma_i(t) - 4u \sigma_i^3(t) + \beta h(t) + f(t) \quad (1.51)$$

in cui si è assunta l'invarianza per traslazioni sull'asse dei tempi (TTI) delle funzioni C e G . Il termine $f(t)$ nella (1.51) rappresenta un rumore gaussiano effettivo con media nulla e varianza:

$$\langle f_i(t) f_j(t') \rangle = 2\Gamma_0^{-1} \delta_{ij} \delta(t-t') + \mu C^{p-1}(t-t')$$

mentre $\mu = p\beta^2 J^2/2$. La (1.51) può essere adoperata a questo punto per ricavare le equazioni dinamiche delle funzioni $C(t-t')$ e $G(t-t')$ nella fase ergodica. L'unico inconveniente da questo punto di vista è rappresentato dalla presenza del termine non lineare $u\sigma_i^3$. Seguendo [37] è possibile affrontare il problema in modo perturbativo per piccoli valori di u . La principale conseguenza di questa limitazione risiede nel fatto che i risultati inerenti la transizione alla fase di vetro di spin sono validi solo nel caso in cui $p = 2 + \epsilon$ (prolungato analiticamente nell'insieme dei numeri reali). A queste condizioni si ottiene nella fase ergodica (in cui TTI e FDT sono entrambi validi) che:

$$\nu_0^{-1} \dot{\phi}(t) + \phi(t) + \lambda \int_0^t d\tau \phi^{p-1}(t-\tau) \dot{\phi}(\tau) = 0 \quad (1.52)$$

in cui $\phi(t) = C(t)/C(0)$, $\nu_0 = \bar{r}_0 \Gamma_0$ e $\lambda = \mu \bar{r}_0^{2-p}$. Il valore di $C(0)$ in tempi uguali è espresso dalla relazione:

$$C^{-1}(0) = \bar{r}_0 = r_0 - \mu C^{p-1}(0) + 12u C(0) \quad (1.53)$$

Per $p = 3$ quest'equazione è formalmente identica all'equazione generale della teoria *Mode Coupling* per la correlazione di densità di un liquido sottoraffreddato sopra la temperatura di transizione dinamica, che è stata introdotta da Leutheusser, Götze ed altri come modello per la transizione vetrosa ideale. Aldilà dei dettagli si può assumere, seguendo [36, 37], che l'equazione dinamica (1.52) manifesti simili proprietà per ogni valore di $p > 2$. Se si assume, come avviene per i vetri strutturali, che $C(0)$ sia continua al punto critico, ne risulta che le equazioni (1.52) e (1.53) prevedono una transizione dinamica in corrispondenza del valore critico:

$$\mu_c = (\bar{r}_0^c)^p \frac{(p-1)^{p-1}}{(p-2)^{p-2}}$$

Per $T = T_d$ il comportamento asintotico della funzione di correlazione può essere descritto dall'espressione:

$$C(t) \sim q_{\text{EA}} + At^{\alpha-1} \quad t \rightarrow \infty \quad (1.54)$$

in cui A è una costante moltiplicativa, α un numero compreso fra zero ed uno e q_{EA} il parametro di Edwards-Anderson definito nella forma:

$$q_{\text{EA}} = \lim_{t \rightarrow \infty} C(t) = \frac{p-2}{\bar{r}_0^c(p-1)}$$

L'esponente α nella (1.54) non dipende dal particolare valore di p (per $p > 2$) usato ed è pari all'incirca a 0.39 [36]. Come osservato in tutti gli altri ambiti formali (vedi §1.4 e §1.5) la transizione alla fase vetrosa avviene con un salto nel valore di q_{EA} . L'entità della discontinuità ha un andamento $O(\epsilon)$, così che per piccoli valori di ϵ l'equazione (1.53) specificata per $\mu = \mu_c$ permette di ricavare il valore di \bar{r}_0^c appropriato e da esso la temperatura critica $T_d \sim \mu_c^{-1/2}$. Tuttavia bisogna tener presente che l'equazione per \bar{r}_0^c ammette una soluzione fisica solo per valori di ϵ sufficientemente piccoli, mentre nel caso $\epsilon \sim 1$ sarà necessario considerare potenze di u di ordine superiore.

Al di sopra della temperatura critica, dunque, la funzione $\phi(t)$ ha un andamento per tempi lunghi nitidamente esponenziale. La costante di tempo che caratterizza il decadimento aumenta progressivamente man mano che ci si avvicina alla temperatura critica da sopra. Quando $T = T_c$, dopo un transiente iniziale, la $\phi(t)$ si stabilizza in corrispondenza del valore q_{EA} predetto, rimanendo costante per un tempo indefinito.

Ora, il punto fondamentale che distingue il comportamento dinamico del sistema da quello che si riscontra in altre circostanze (quali ad esempio il modello SK) risiede nel fatto che, analizzando lo stesso modello (1.42) con $p = 2 + \epsilon$ attraverso il metodo delle repliche, si ricava una diversa coppia di parametri critici μ_c e \bar{r}_0^c relativi alla transizione statica RS/1RSB, in virtù dei quali si ha che $T_c < T_d$. In altre parole le teorie dinamiche per questa classe di modelli prevedono una temperatura di transizione maggiore di quella predetta dalla descrizione del sistema all'equilibrio. Rispetto alla formulazione statica la temperatura T_d individua una soluzione di punto di sella in cui l'energia libera è massima rispetto a q_1 , ma non ad m , in tutto l'intervallo $T_c < T < T_d$.

Per concludere vale la pena sottolineare come l'analogia fra le equazioni *Mode Coupling* per i vetri strutturali e quelle che si ottengono dallo studio della dinamica di alcuni modelli di vetri di spin in campo medio, rappresenti una proprietà davvero notevole se messa in relazione alle importanti differenze che esistono fra queste due classi di sistemi. Innanzitutto i vetri di spin sono caratterizzati dalla presenza del disordine congelato che è invece assente nei vetri strutturali. Inoltre la transizione vetrosa costituisce un effetto completamente dinamico, mentre nei vetri di spin esiste una transizione di fase al second'ordine al disotto della temperatura critica T_c . Infine nei vetri strutturali si osserva l'esistenza di una fase cristallina che può essere raggiunta in linea di principio attraverso una lenta procedura di *Annealing*, fenomeno quest'ultimo che non trova nessun tipo di corrispondenza nei vetri di spin.

Capitolo 2

Le barriere energetiche

2.1 Istantoni nella dinamica di Langevin

È ormai comunemente noto come tutti i modelli di vetri di spin siano caratterizzati da un paesaggio delle fasi estremamente complesso e irregolare, costituito da valli e barriere energetiche di taglia diversa. Il calcolo dell'altezza delle barriere nei sistemi finiti e, più in generale, lo studio dei processi di transizione fra stati metastabili ha da sempre costituito un compito estremamente arduo anche per i modelli di campo medio, in quanto molte delle tecniche sviluppate sin'ora sono destinate principalmente ad indagini di altra natura. Il consueto metodo delle repliche, ad esempio, non permette un'analisi del sistema fuori dall'equilibrio termico. L'approccio dinamico tradizionale (vedi §1.6) fornisce le proprietà dei diversi stati metastabili, la dipendenza di questi dalla storia termica del sistema e, in principio, anche un'informazione circa la probabilità di transizione fra uno stato metastabile e l'altro. Tuttavia, poichè nei sistemi a lungo raggio d'interazione, la probabilità di transizione diminuisce esponenzialmente con il numero di spin, tali processi risultano esclusi a priori dalla derivazione al limite termodinamico delle equazioni di moto su cui tale metodo è fondato.

Nel 1997 Cavagna, Giardina e Parisi [39] hanno proposto un metodo con il quale analizzare, nel contesto del modello p -spin sferico, le barriere di energia libera fra due stati con un determinato overlap. Tale metodo, basato sull'introduzione di un potenziale a tre repliche, consente di determinare la distanza energetica fra uno stato di equilibrio e lo stato metastabile più vicino ad esso. Il principale svantaggio di questa formulazione consiste nella mancanza di un'indicazione palese circa l'effettiva accessibilità dinamica dello stato metastabile contemplato nella teoria. Difficoltà esacerbata dal fatto che, nell'ambito del metodo delle repliche, tutti gli stati sono pesati dal corrispondente fattore di Boltzmann, così che i processi meno frequenti, come il superamento di una barriera energetica, risultano esclusi in favore dei processi più probabili.

Un metodo alternativo, introdotto da Ioffe e Sherrington nel 1998 [40] in relazione al modello di Sherrington-Kirkpatrick, è basato su una variazione dell'approccio dinamico per modelli a lungo raggio costituiti da un numero grande, ma finito, di spin. Seguen-

do tale approccio è possibile derivare un sistema di equazioni integro-differenziali per i parametri d'ordine dinamici che ammettono una soluzione “istantonica”. In meccanica quantistica gli *istantoni* rappresentano le soluzioni classiche localizzate ed ad azione finita delle equazioni di campo di una teoria resa euclidea, ottenute per mezzo di un'approssimazione di *punto a sella*. In questo contesto indicheremo con lo stesso termine le soluzioni ricavabili a partire dal funzionale generatore delle funzioni dinamiche, con l'approssimazioni di punto di sella e corrispondenti, come vedremo, ai processi di transizione oltre le barriere energetiche.

Per introdurre la teoria, che in seguito useremo diffusamente in relazione al modello p -spin, possiamo prendere in considerazione un modello di Sherrington-Kirkpatrick costituito da N spin soffici la cui dinamica è descritta da un'equazione di Langevin (1.43) in relazione all'Hamiltoniana:

$$H = - \sum_{i < j}^{1, N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i + \sum_{i=1}^N V(\sigma_i)$$

nella quale il potenziale $V(\sigma_i)$ ha il compito di forzare le variabili soft-spin ad osservare il vincolo $\langle \sigma_i^2 \rangle = 1$ e può essere assunto, ad esempio, essere della forma $V(\sigma_i) = r_0(\sigma_i^2 - 1)^2$, con $r_0 \gg T$. La fase di bassa temperatura del modello è, notoriamente, ben descritta mediante le funzioni a due tempi $C(t, t')$ e $G(t, t')$. In particolare è noto come entrambe le funzioni esibiscano una parte non riconducibile alla tipica dinamica di rilassamento esponenziale, ad indicare che una perturbazione applicata al sistema nell'istante t' continua ad affliggerlo anche dopo un tempo $t \gg t'$. Oltretutto, campioni raffreddati fino ad una stessa temperatura, ma con protocolli di raffreddamento diversi, presentano differenti parametri d'ordine $C(t, t')$ e $G(t, t')$; questo sottolinea come variazioni nella storia termica di un campione influiscono drammaticamente nel cammino di questo fra le valli metastabili del paesaggio energetico.

Nel seguito prenderemo in considerazione un sistema sottoposto ad un lento processo di raffreddamento, in cui il tasso di variazione della temperatura è piccolo se confrontato con la tipica frequenza di inversione degli spin Γ_0 . In questo regime è particolarmente utile separare le funzioni di Green in una parte “veloce” (qui contrassegnata con l'etichetta f) ed un'altra lentamente variabile:

$$\begin{cases} C(t_1, t_2) = C_f(t_1, t_2) + q(t_1, t_2) \\ G(t_1, t_2) = G_f(t_1, t_2) + \Delta(t_1, t_2) \end{cases}$$

Se il programma di raffreddamento è sufficientemente lento, e la temperatura finale T_2 è sufficientemente vicina al punto critico (dal basso), si dimostra [41] che i parametri che caratterizzano il sistema alla fine del raffreddamento sono pari a:

$$\begin{cases} q(t_1, t_2) = \min(\tau_1, \tau_2) + O(\tau^2) \\ \Delta(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) 2\tau_2 \left. \frac{dq}{dt} \right|_{t_2} \\ \delta q(t) = \tau_t - q(t, t) = -\tau_t^2 \end{cases}$$

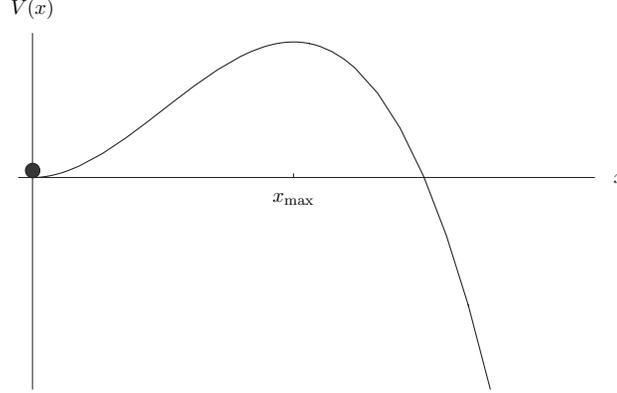


Figura 2.1

avendo indicato con $\tau_t = (T_c - T_t)/T_c$ la temperatura ridotta al tempo t . La forma di $\Delta(t_1, t_2)$, in particolare, mostra che ogni perturbazione applicata al sistema in fase di raffreddamento comporta un effetto permanente durante tutto il seguito della dinamica. Tale peculiarità può essere compresa pensando che, nel corso del processo di raffreddamento, ogni stato si suddivida in due o più sottostati e che dopo ogni nuovo passo nello spazio delle fasi, non vi sia la possibilità di tornare indietro nella misura in cui $N \rightarrow \infty$ e $\partial_t \tau < 0 \forall t$.

Per un valore finito di N ci si aspetta che le transizioni fra una valle e l'altra siano permesse ed il sistema abbia la facoltà di cancellare la memoria di una perturbazione avvenuta in un istante passato. Oltretutto è ragionevole supporre che le barriere che dividono gli stati dotati di maggiore overlap siano tipicamente più basse delle barriere fra gli stati con minor overlap e le transizioni più probabili avvengano fra gli stati della prima tipologia. Gli stati con maggior overlap si formano nelle ultime fasi della sequenza di raffreddamento in quanto frutto della suddivisione degli stati "progenitori". In tal modo ci si aspetta che le barriere più piccole corrispondano a transizioni che colpiscono prevalentemente la memoria di un passato recente.

Quanto detto fin'ora suggerisce che una teoria in termini di q e Δ sia di per sè incompleta allo scopo di descrivere le transizioni associate al superamento delle barriere energetiche e che sia necessario introdurre nuovi parametri d'ordine *ad hoc*. Mostriamo gli aspetti basilari della teoria considerando il semplice esempio di una particella immersa in un potenziale $V(x) = vx^2(1-x)$, da principio nello stato metastabile attorno al punto $x = 0$ a temperatura $T \ll v$, in grado di fuggire in $x = \infty$ con probabilità $\exp(-\beta V_{\max})$. Tutte le funzioni di correlazioni possono essere ricavate, in questo esempio, dalle equazioni dinamiche:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -\frac{dV}{dx} + \xi(t) \\ \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2T\delta(t-t') \end{cases}$$

associate al funzionale generatore:

$$Z = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}\hat{x} J\{x\} \exp A[x, \hat{x}] \quad (2.1)$$

con:

$$J\{x\} = \det\left(\partial_t + \frac{d^2\beta V}{dx^2}\right)$$

$$A[x, \hat{x}] = \int dt \left[hx - i\hat{x} \left(\partial_t x + \frac{\delta V}{\delta x} - iT\hat{x} \right) \right]$$

Lo Jacobiano $J\{\sigma\}$ può essere ignorato se l'accuratezza richiesta si limita al contributo esponenziale. A basse temperature l'integrale di cammino (2.1) è dominato dalla traiettoria di punto di sella:

$$Z \simeq \exp\left(\max_{x, \hat{x}} A[x, \hat{x}]\right)$$

Variando l'azione rispetto ad x e \hat{x} si ricava:

$$\frac{\delta A}{\delta x(t)} = i\dot{\hat{x}}(t) - i\hat{x}(t) \frac{\delta^2 V}{\delta x^2(t)}$$

$$\frac{\delta A}{\delta \hat{x}(t)} = -i \left[\dot{x}(t) + \frac{\delta V}{\delta x(t)} \right] - 2Tx(t)$$

che, uguagliate a zero, conducono a:

$$\begin{cases} \dot{\hat{x}}(t) = \hat{x}(t) \frac{\delta^2 V}{\delta x^2(t)} \\ \dot{x}(t) + \frac{\delta V}{\delta x(t)} = 2Tx(t) \end{cases} \quad (2.2)$$

Ora, il sistema di equazioni differenziali (2.2) ammette due soluzioni drammaticamente differenti l'una dall'altra. La prima:

$$\begin{cases} \hat{x}(t) = 0 \\ \dot{x}(t) = -\frac{\delta V}{\delta x} \end{cases} \quad A[x, \hat{x}] = 0 \quad (2.3)$$

corrisponde al caso in cui la particella scivoli lungo la buca di potenziale praticamente insensibile al rumore termico. La seconda soluzione si ottiene invertendo l'asse dei tempi nella prima ($dt \rightarrow -dt$):

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \frac{\delta V}{\delta x} \\ \dot{\hat{x}}(t) = iT\hat{x}(t) \end{cases} \quad (2.4)$$

La (2.4) descrive il moto della particella nell'atto di risalire la buca di potenziale anzichè discenderla. La traiettoria associata al meccanismo di fuga da uno stato metastabile

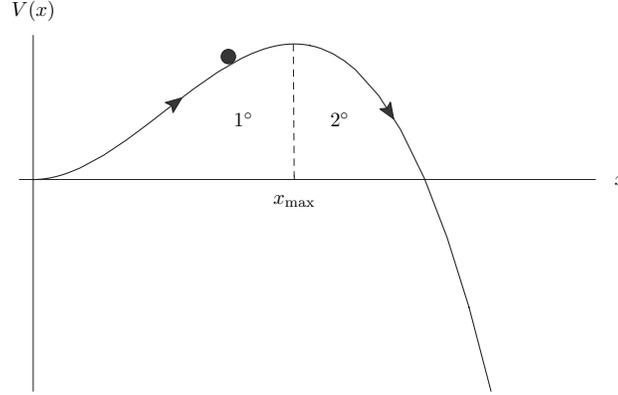


Figura 2.2: Rappresentazione schematica del processo di transizione oltre la barriera energetica in x_{\max} . Durante la fase di “salita” (1°) il processo è descritto dalle (2.4) che si ottengono attraverso un’inversione dell’asse dei tempi. Nella fase di “discesa” (2°) la dinamica corrisponde ad un più comune processo di rilassamento (2.3).

corrisponde evidentemente alla (2.4) per $x < x_{\max}$ e alla (2.3) per $x > x_{\max}$. Lo scenario ivi descritto descrive, come desiderato, ad un processo dinamico in cui il sistema transita inizialmente da una valle metastabile ad una configurazione instabile, per poi rilassare nuovamente in uno stato d’equilibrio. In corrispondenza si ha:

$$\begin{aligned} \max_{x, \hat{x}} A[x, \hat{x}] \Big|_{h=0} &= - \int dt \left[i \frac{\delta V}{iT} (\delta V + \delta V) + T \left(\frac{\delta V}{iT} \right)^2 \right] = \\ &= -\beta \int dt (\delta V)^2 = -\beta \int dt \frac{dx}{dt} \frac{\delta V}{\delta x} = -\beta \delta V \end{aligned} \quad (2.5)$$

La probabilità che caratterizza tale processo è data dunque da $\exp(-\beta \delta V)$, che riproduce l’espressione di Boltzmann. Possiamo notare come la condizione $\langle \hat{x} \hat{x} \rangle = 0$, relativa al campo ausiliare \hat{x} , non impedisca l’esistenza della soluzione istantonica (2.4) in cui $\hat{x}(t)$ non è identicamente nulla per ogni valore di t . L’esistenza di tali soluzioni è, per altro, compatibile con la condizione di normalizzazione $Z|_{h=0} = 1$, poichè, in assenza di sorgenti, i termini derivanti dallo Jacobiano vanno a semplificare l’azione (2.5). Analogamente si può dimostrare che, in presenza di sorgenti di campo, i termini dello Jacobiano non affliggono il contributo esponenziale dominante; di conseguenza si può concludere che l’esclusione dei termini dello Jacobiano, in generale, non comprometta la ricerca delle giuste funzioni di correlazione della teoria.

Per similitudine con questo semplice esempio, si può supporre che analoghe soluzioni di punto di sella siano in grado di descrivere processi dinamici come quello rappresentato schematicamente in Figura 2.3, in cui un generico sistema, inizialmente nello stato s' , rilassa nello stato d’equilibrio s dopo aver superato la barriera energetica associata al punto instabile u ; a patto che ai campi coniugati alle variabili $C(t, t')$ e $G(t, t')$ sia data la facoltà di assumere valori non identicamente nulli. Il procedimento attraverso il

quale ricavare queste soluzioni rispecchia, negli aspetti fondamentali, quello canonico, ad eccezione del fatto che le variabili coniugate a $C(t, t')$ e $G(t, t')$ non sono assunte a priori uguali a zero.

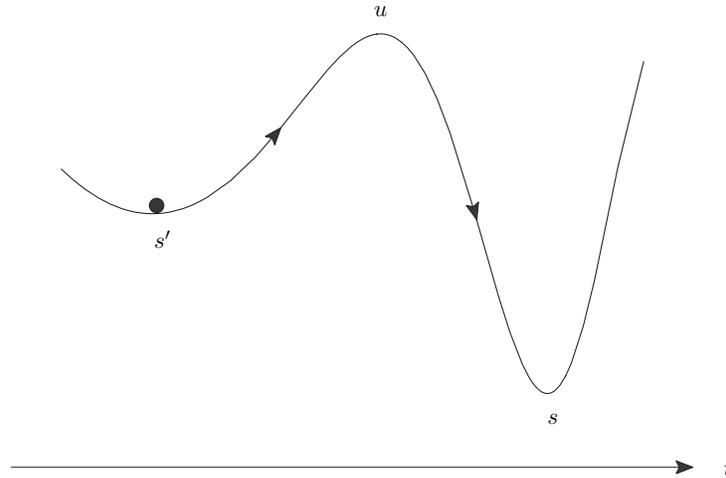


Figura 2.3: Rappresentazione schematica di un processo istantaneo. Il sistema, inizialmente nello stato metastabile s' , transita nello stato d'equilibrio s dopo aver superato la barriera energetica corrispondente al punto instabile u .

2.2 La teoria di Ioffe e Lopatin

La principale limitazione della teoria esposta nel paragrafo precedente risiede evidentemente nel fatto che, per trovare la traiettoria associata al processo istantaneo, bisogna forzare il sistema ad attraversare il punto u (vedi Figura 2.3). In altre parole è necessario applicare condizioni al bordo nel futuro, distruggendo in tal modo la causalità della teoria; particolare, quest'ultimo, che contribuisce a complicare¹ (senza tuttavia rendere inavvicinabili [40]) le equazioni di moto rispetto al caso tradizionale (es. $u \rightarrow s$).

Questo tipo di difficoltà è stata affrontata in passato da Ioffe e Lopatin [42]. Il metodo consiste nell'osservare che il moto istantaneo può essere mappato nel medesimo processo invertito nel tempo. Nella fattispecie il moto di trasferimento “in salita” $s' \rightarrow u$ può essere mappato nel corrispondente processo di rilassamento $u \rightarrow s'$, così da rimuovere le difficoltà supplementari introdotte dalla non causalità del processo istantaneo. Formalmente quest'operazione implica un'inversione dell'asse dei tempi nella Lagrangiana. Questo metodo non consente di ricavare direttamente l'altezza della barriera energetica che separa un determinato stato da un altro, tuttavia permette di analizzare processi che sono, in qualche modo, legati all'altezza tipica delle barriere del paesaggio energetico nella fase di bassa temperatura.

¹La funzione di correlazione $G = \langle \hat{\sigma} \sigma \rangle$ non è causale e la $C^\dagger = \langle \hat{s} \hat{s} \rangle$ è diversa da zero.

Nel caso in cui l'energia libera del sistema possa essere espressa esplicitamente, il metodo proposto conferma che la probabilità di transizione che si ricava dall'azione associata alla soluzione istantonica sia pari a $\exp(-\beta\Delta F)$, dove ΔF è la differenza fra l'energia libera alla fine della traiettoria dell'istantone (punto u) e l'energia libera dello stato stazionario iniziale (punto s). Chiaramente l'energia libera del punto d'equilibrio instabile non può essere definita a livello termodinamico, ciò nondimeno essa può essere calcolata attraverso la differenza $E - TS$, in cui E è l'energia dello stato e S è l'entropia statistica, definita come il logaritmo dello spazio delle configurazioni ristretto alla direzione ortogonale alla traiettoria.

Si consideri, dunque, un sistema descritto dall'Hamiltoniana H che si trovi all'istante t' in uno stato metastabile caratterizzato da una densità di energia $\mathcal{E}' = E'/N$. Si vuole determinare la probabilità che al tempo t esso si trovi nello stato di energia \mathcal{E} dopo essere transitato al tempo t_0 attraverso lo stato di energia $\mathcal{E}_0 > \mathcal{E}'$. Le funzioni di correlazione del processo dinamico sono definite, come sempre, nella forma:

$$\mathbf{G}(t, t') = \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} |\sigma(t')\rangle \langle \sigma(t)| e^{\int_{t'}^t dt'' L[\sigma, \hat{\sigma}]} \quad (2.6)$$

avendo indicato, nella notazione di Dirac, il prodotto esterno dei vettori:

$$|\sigma(t')\rangle = \begin{bmatrix} i\hat{\sigma}(t') \\ \sigma(t') \end{bmatrix} \quad \langle \sigma(t)| = [i\hat{\sigma}(t) \quad \sigma(t)]$$

e con $L[\sigma, \hat{\sigma}]$ la Lagrangiana:

$$L[\sigma, \hat{\sigma}] = \sum_i i\hat{\sigma}_i \left[-\partial_t \sigma_i - \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i} + i\hat{\sigma} \right] - \frac{1}{2} \sum_i \frac{\delta^2(\beta H)}{\delta \sigma_i^2}$$

Tecnicamente la scelta della soluzione istantonica può essere messa in atto inserendo nell'integrale di cammino (2.6) una delta di Dirac che selezioni fra tutte le possibili traiettorie $\sigma(t)$ e $\hat{\sigma}(t)$, quella corrispondente alla soluzione di punto di sella $s' \rightarrow u \rightarrow s$:

$$\mathbf{G}(t, t') = \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} \delta(H(t_0) - E_0) |\sigma(t')\rangle \langle \sigma(t)| e^{\int_{t'}^t dt'' L[\sigma, \hat{\sigma}]} \quad (2.7)$$

Senza perdere di generalità poniamo $t_0 = 0$ e $t' < 0$, in modo da decomporre, nella (2.7), il moto istantonico da t' a 0, dal successivo processo di rilassamento da 0 a t' .

$$\int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} \delta(H(t_0) - E_0) e^{\int_{t'}^0 dt'' L[\sigma, \hat{\sigma}]} |\sigma(t')\rangle \langle \sigma(t)| e^{\int_0^t dt'' L[\sigma, \hat{\sigma}]}$$

Scriviamo dunque:

$$\mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} = \prod_{i, t''}' d\sigma_i(t'') d\hat{\sigma}_i(t'') = \prod_i \prod_{t'' < 0}' d\sigma_i(t'') d\hat{\sigma}_i(t'') \prod_{t'' > 0}' d\sigma_i(t'') d\hat{\sigma}_i(t'')$$

dove si è indicato con l'apice la produttoria sull'indice temporale discretizzato $t'' \in \mathcal{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Contrassegnando ora con l'etichetta 1 i campi σ e $\hat{\sigma}$ localizzati nell'intervallo temporale negativo e con l'etichetta 2 quelli dell'intervallo positivo (vedi Figura 2.4):

$$\sigma_1(t'') = \{\sigma(t''), \hat{\sigma}(t'') : t'' < 0\} \quad \sigma_2(t'') = \{\sigma(t''), \hat{\sigma}(t'') : t'' > 0\}$$

e allo stesso modo:

$$\begin{cases} \mathcal{D}\sigma_1 = \prod_i \prod_{t'' < 0} d\sigma_i(t'') d\hat{\sigma}_i(t'') \\ \mathcal{D}\sigma_2 = \prod_i \prod_{t'' > 0} d\sigma_i(t'') d\hat{\sigma}_i(t'') \end{cases}$$

si può riscrivere l'integrale nella forma:

$$\int \mathcal{D}\sigma_1 \mathcal{D}\sigma_2 \delta(H(0) - N\mathcal{E}_0) e^{\int_{t'}^0 dt'' L[\sigma_1] | \sigma_1(t') \rangle \langle \sigma_2(t) | e^{\int_0^t dt'' L[\sigma_2]}$$

In questa notazione la dinamica istantonica e quella di rilassamento sono ben separate all'interno dell'integrale. Seguendo Ioffe e Lopatin possiamo ora applicare, alla prima parte del moto, l'inversione dell'asse temporale in modo da ridurre il processo di transizione $s' \rightarrow u$ ad un comune problema di dinamica causale. Tecnicamente tale operazione si realizza attraverso il seguente cambiamento di coordinate lagrangiane:

$$\begin{bmatrix} i\hat{\sigma}(t) \\ \sigma(t) \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} \partial_t \sigma(t) + i\hat{\sigma}(t) \\ \sigma(t) \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

È immediato osservare come, sostituendo le nuove coordinate all'interno della Lagrangiana, la trasformazione (2.8) sortisca l'effetto desiderato:

$$\begin{aligned} L_i[\sigma, \hat{\sigma}] &\rightarrow (\partial_t \sigma_i + i\hat{\sigma}_i)^2 - (\partial_t \sigma_i + i\hat{\sigma}_i) \left[\partial_t \sigma_i + \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i} \right] - \frac{1}{2} \frac{\delta^2(\beta H)}{\delta \sigma_i^2} \\ &= i\hat{\sigma}_i \left[\partial_t \sigma_i - \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i} + i\hat{\sigma}_i \right] - \frac{1}{2} \frac{\delta^2(\beta H)}{\delta \sigma_i^2} - \partial_t(\beta H) \end{aligned} \quad (2.9)$$

La nuova Lagrangiana differisce dalla vecchia solo per il segno del tempo: essa descrive formalmente un processo di rilassamento visto al contrario. L'azione del processo istantonico si trasforma nel modo seguente:

$$\begin{aligned} \int_{t'}^0 dt'' L[\sigma, \hat{\sigma}, \partial_{t''} \sigma] &\rightarrow \int_{t'}^0 dt'' \{ L[\sigma, \hat{\sigma}, \partial_{-t''} \sigma] - \partial_{t''}(\beta H) \} = \\ &= -\beta[H(0) - H(t')] + \int_0^{-t'} dt'' L[\sigma, \hat{\sigma}, \partial_{t''} \sigma] \end{aligned}$$

avendo esplicitato la dipendenza della Lagrangiana dalla derivata temporale di σ allo scopo di distinguere la consueta dinamica "in avanti nel tempo" dal processo a ritroso descritto dalla (2.9). Raccogliendo i risultati così ottenuti possiamo scrivere, in

definitiva:

$$\mathbf{G}(t, t') = e^{-\beta\Delta E} \int \mathcal{D}\sigma_1 \mathcal{D}\sigma_2 \delta(H(0) - N\mathcal{E}_0) e^{\int_0^{-t'} dt'' L[\sigma_1]} |\sigma_1(-t')\rangle \langle \sigma_2(t) | e^{\int_0^t dt'' L[\sigma_2]} \quad (2.10)$$

Formalmente il processo di transizione $s' \rightarrow u \rightarrow s$ può essere visto come un problema di dinamica causale di una coppia di repliche identiche dello stesso sistema. In questa veste ogni replica riproduce l'evoluzione del sistema in occasione della prima ($s' \rightarrow u$) e della seconda ($u \rightarrow s$) transizione come schematizzato, con l'intento della semplicità come unica regola, in Figura 2.4.

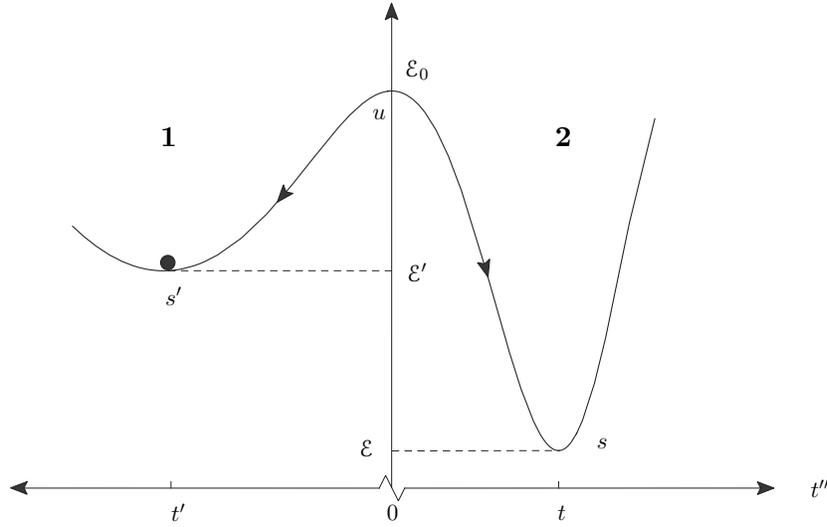


Figura 2.4: Rappresentazione schematica di un processo istantónico. L'intero processo dinamico può essere assimilato all'evoluzione di due repliche identiche ed indipendenti dello stesso sistema per le quali sia fissata la densità di energia \mathcal{E}_0 all'istante $t = 0$.

Generalizzando, la può (2.10) essere interpretata a tutti gli effetti come l'istanza specifica di un problema più generico di dinamica a due repliche. Le funzioni di correlazione e di risposta coinciderebbero, in quest'ottica, con matrici nello spazio delle repliche delle forma:

$$\mathbf{G}_{\alpha\beta}(t, t') = e^{-\beta\Delta E} \int \mathcal{D}\sigma_\alpha \mathcal{D}\sigma_\beta \delta(H(0) - N\mathcal{E}_0) e^{S_\alpha[\sigma, \hat{\sigma}]} |\sigma_\alpha(t')\rangle \langle \sigma_\beta(t) | e^{S_\beta[\sigma, \hat{\sigma}]} \quad (2.11)$$

in cui gli indici di replica α e β sono specificati dagli intervalli nei quali è suddiviso l'asse temporale (dunque $\alpha, \beta = 1, 2$ in accordo con la nomenclatura adottata precedentemente). Naturalmente tutti i processi descritti dalle funzioni di correlazioni replico-simmetriche $C_{11} = C_{22}$, corrispondono ad ordinari episodi di dinamica causale, storicamente collocati nel primo o secondo semiasse temporale. Al contrario, lo scenario descritto dalle funzioni asimmetriche $C_{12} = C_{21}$, identifica propriamente il processo

risultante dall'unione di questi ultimi, cioè, come scritto nella (2.10) e schematizzato in Figura 2.4, la transizione dinamica $s \rightarrow s'$ associata al superamento della barriera energetica u . Infine, l'indipendenza delle due fasi del moto (o "repliche") fa sì che:

$$G_{12}(t, t') = G_{21}(t, t') = 0 \quad (2.12)$$

Nella derivazione delle equazioni di moto, prenderemo in considerazione le seguenti quantità:

$$C_{11}(t, t') = C_{22}(t, t') = C(t, t') \quad (2.13a)$$

$$G_{11}(t, t') = G_{22}(t, t') = G(t, t') \quad (2.13b)$$

corrispondenti all'evoluzione causale del sistema con energia iniziale fissata $E_0 = N\mathcal{E}_0$, la cui dinamica è limitata ad uno dei due semiassi temporali, e la funzione a due repliche:

$$C_{12}(t, t') = C_{21}(t, t') = \hat{C}(t, t') \quad (2.14)$$

relativa al processo in due stadi, corrispondente al valico della barriera u , che si ottiene formalmente dall'unione delle due fasi del moto descritte nelle (2.13).

Prima di concludere questa discussione vale la pena spendere qualche considerazione circa il legame fra l'azione del processo istantónico e lo spazio delle configurazioni del sistema negli stati iniziale e finale. In riferimento al processo descritto in Figura 2.4, supponiamo di voler determinare la probabilità che il sistema passi dal punto s' al punto di equilibrio instabile u , che rappresenta lo stadio finale del moto istantónico. Nella precedente discussione abbiamo sottointeso che le condizioni al bordo delle variabili σ_i e $\hat{\sigma}_i$ fossero fissate. Fisicamente possiamo identificare tali condizioni con delle regioni $\Gamma_{s'}$ e Γ_u dello spazio delle configurazioni. La differenza concettuale che passa fra le due formulazioni è estremamente importante e merita qualche riga di commento: una cosa infatti è fissare le condizioni al bordo assegnando un valore alle variabili σ_i (es. $\sigma_i(t')$ e $\sigma_i(0)$), altra cosa è affermare che il sistema occupi all'istante iniziale una qualche regione Γ dello spazio delle configurazioni. Questo secondo modo di ragionare è evidentemente quello fisicamente consistente. Chiamiamo $w_{s'u}$ e $w_{us'}$ le probabilità di transizione da una configurazione di s' ad una di u e viceversa; ricordando che:

$$S_{s' \rightarrow u} = -\beta(E_u - E_{s'}) + S_{s' \leftarrow u}$$

dove S è l'azione del processo dinamico, abbiamo che:

$$w_{s'u} = e^{-\beta(E_u - E_{s'})} w_{us'}$$

La probabilità di fuga da una qualsiasi configurazione dello stato s' sarà data allora da:

$$W_{s'u} = \Gamma_u w_{su}$$

D'altra parte, essendo $\Delta E = E_u - E_{s'} > 0$, la probabilità di andare dallo stato u allo stato s' è:

$$W_{us'} = \Gamma_{s'} w_{us'} = 1$$

Abbiamo quindi che:

$$\begin{aligned} W_{s'u} &= \Gamma_u w_{s'u} = \Gamma_u w_{us'} e^{-\beta(E_u - E_{s'})} = \frac{\Gamma_u}{\Gamma_{s'}} e^{-\beta(E_u - E_{s'})} \\ &= \exp[-\beta(E_u - \log \Gamma_u - E_{s'} + \log \Gamma_{s'})] = \exp(-\beta \Delta F) \end{aligned} \quad (2.15)$$

con:

$$F = E - \log \Gamma \quad \text{e} \quad \Delta F = F_u - F_{s'}$$

E' importante tener presente che, a differenza di $\log \Gamma_{s'}$, la quantità $\log \Gamma_u$ non rappresenta l'entropia microcanonica dello stato u , in quanto, non essendo quest'ultimo uno stato di equilibrio stabile, essa non potrebbe essere definita in modo termodinamicamente corretto.

2.3 Derivazione delle equazioni dinamiche

Attraverso la teoria esposta in forma generale nel paragrafo precedente è ora possibile derivare le equazioni dinamiche per le funzioni di correlazione e di risposta di un modello specifico nell'atto di transitare da uno stato metastabile ad uno stato di equilibrio valicando la barriera energetica che li separa. A tale scopo prenderemo in considerazione il modello p -spin sferico descritto dall'Hamiltoniana:

$$H = - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p}$$

Essa descrive un reticolo di N variabili di spin continue $\sigma_i(t)$ che interagiscono per mezzo di un sistema di accoppiamenti a lunga portata $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ distribuiti in modo gaussiano con valor medio nullo e varianza $\overline{J_{i_1 i_2 \dots i_p}^2} = p! / 2N^{p-1}$. La dinamica di rilassamento è espressa, come sempre, dall'equazione di Langevin:

$$\Gamma_0^{-1} \partial_t \sigma_i(t) = - \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i(t)} - z(t) \sigma_i(t) + \xi_i(t) \quad (2.16)$$

in cui Γ_0 può essere posto convenzionalmente uguale ad uno. L'ampiezza delle variabili $\sigma_i \in] -\infty, \infty[$ è limitata dal vincolo sferico $\sum_i \sigma_i^2 = N$. Il parametro $z(t)$ che figura nell'equazione (2.16) esercita, a questo proposito, una funzione di controllo sulle variabili σ_i assicurando che il vincolo sferico sia rispettato ad ogni istante t . A differenza del modello p -spin di Ising, visto nel Capitolo 1, il modello sferico è dotato di una particolare duttilità formale, grazie all'assenza del termine di potenziale $\frac{1}{2} r_0 \sigma_i^2 + u \sigma_i^4$ che nel caso di Ising, garantisce la condizione $\langle s_i^2 \rangle = 1$ nel limite di $u \rightarrow \infty$ e $r_0 \rightarrow -\infty$ con $u/r_0 = \text{cost}$. Il vincolo sferico garantisce inoltre che $C(t, t) = 1$ ad ogni istante t .

Per la derivazione delle equazioni del moto delle funzioni ad una replica (2.13), basterà prendere in considerazione una delle due azioni scritte nella (2.7). Per ogni

particolare realizzazione del disordine, il funzionale generatore della teoria è dato da:

$$Z_J = \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} \delta(H(0) - N\mathcal{E}_0) \exp\left\{-\beta\Delta E + \sum_i \int dt [l_i(t)\sigma_i(t) + i\hat{l}(t)i\hat{\sigma}(t) + L_1]\right\} \quad (2.17)$$

con:

$$L_1 = \sum_i i\hat{\sigma}_i(t) \left[-\partial_t \sigma_i(t) - z(t)\sigma_i - \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i(t)} + i\hat{\sigma}_i(t) \right] + V\{\sigma\}$$

La delta può essere rappresentata nella forma integrale:

$$\delta(H(0) - N\mathcal{E}_0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} d\phi \exp[\phi\beta(H(0) - N\mathcal{E}_0)]$$

Procedendo come in [37] possiamo isolare, nell'azione (2.17), i termini dipendenti dalla realizzazione del disordine. La nuova azione sarà dunque della forma:

$$S[\sigma, \hat{\sigma}] = S_0[\sigma, \hat{\sigma}] + S_J[\sigma, \hat{\sigma}]$$

con:

$$S_J[\sigma, \hat{\sigma}] = -\phi\beta \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_1}(0) \sigma_{i_2}(0) \dots \sigma_{i_p}(0) + \beta \int dt \sum_{i_k} \sum_{i_2 < \dots < i_p} J_{i_1 i_2 \dots i_p} i\hat{\sigma}_{i_k}(t) \sigma_{i_2}(t) \dots \sigma_{i_p}(t) \quad (2.18)$$

La media sul disordine si riduce ad un prodotto di integrali gaussiani della forma:

$$\int dJ_{i_k i_2 \dots i_p} \exp\left\{-\frac{N^{p-1}}{p!J^2} J_{i_k i_2 \dots i_p}^2 + J_{i_k i_2 \dots i_p} \beta \left[-\phi \sigma_{i_k}(0) \sigma_{i_2}(0) \dots \sigma_{i_p}(0) + \int dt \sum_{k=1}^p i\hat{\sigma}_{i_k}(t) \prod_{l \neq k} \sigma_{i_l}(t) \right] \right\}$$

uguali a:

$$\exp\left\{ \frac{J^2 p!}{4N^{p-1}} \beta^2 \left[\int dt' dt \sum_k \sum_{k'} i\hat{\sigma}_{i_k}(t) i\hat{\sigma}_{i_{k'}}(t') \prod_{l \neq k} \sigma_{i_l}(t) \prod_{l' \neq k'} \sigma_{i_{l'}}(t') + \right. \right. \\ \left. \left. - 2\phi \int dt \sigma_{i_k}(0) \sigma_{i_2}(0) \dots \sigma_{i_p}(0) \sum_{k=1}^p i\hat{\sigma}_{i_k}(t) \prod_{l \neq k} \sigma_{i_l}(t) + \right. \right. \\ \left. \left. + \phi^2 \sigma_{i_k}^2(0) \sigma_{i_2}^2(0) \dots \sigma_{i_p}^2(0) \right] \right\}$$

La somma su tutte le combinazioni degli indici $i_k, i_2 \dots i_p$ rende muti gli indici k e k' ; il doppio integrale in t e t' si trasforma come in [37], mentre per il nuovo termine derivante dal doppio prodotto si ha:

$$\begin{aligned} \sum_{i_k < \dots < i_p} \int dt \sigma_{i_k}(0) \sigma_{i_2}(0) \dots \sigma_{i_p}(0) \sum_{k=1}^p i \hat{\sigma}_{i_k}(t) \prod_{l \neq k} \sigma_{i_l}(t) = \\ = p \sum_{i < i_2 < \dots < i_p} \int dt i \hat{\sigma}_i(t) \sigma_i(0) \sigma_{i_2}(t) \sigma_{i_2}(0) \dots \sigma_{i_p}(t) \sigma_{i_p}(0) \end{aligned}$$

Sostituendo si ha in definitiva:

$$\bar{Z} = \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} d\phi \exp(-\beta \Delta E + S_0[\sigma, \hat{\sigma}] + S[\sigma, \hat{\sigma}] + S_\phi[\sigma, \hat{\sigma}]) \quad (2.19)$$

dove $S_0[\sigma, \hat{\sigma}]$ e $S[\sigma, \hat{\sigma}]$ sono gli stessi termini d'azione che si ottengono nel caso di un normale processo di rilassamento [37], mentre:

$$\begin{aligned} S_\phi[\sigma, \hat{\sigma}] = -\beta \phi N \mathcal{E}_0 + \\ + \frac{J^2 p}{4N^{p-1}} \sum_{(i, i_2 \dots i_p)} \left[\frac{1}{p} \phi^2 - 2\phi \int dt i \hat{\sigma}_i(t) \sigma_i(0) \sigma_{i_2}(t) \sigma_{i_2}(0) \dots \sigma_{i_p}(t) \sigma_{i_p}(0) \right] \end{aligned}$$

Per grandi valori di N , la sommatoria si può approssimare ponendo:

$$Q_5[\sigma, \hat{\sigma}] = \frac{1}{N} \sum_i i \hat{\sigma}_i(t) \sigma_i(0) \quad Q_6[\sigma, \hat{\sigma}] = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i(t) \sigma_i(0)$$

e trascurando i termini diagonali:

$$\begin{aligned} N^p Q_5 Q_6^{p-1} = \sum_i i \hat{\sigma}_i(t) \sigma_i(0) \left[\sum_j \sigma_j(t) \sigma_j(0) \right]^{p-1} \\ = \sum_{(i_1, i_2 \dots i_p)} i \hat{\sigma}_i(t) \sigma_i(0) \sigma_{i_2}(t) \sigma_{i_2}(0) \dots \sigma_{i_p}(t) \sigma_{i_p}(0) + O(N^{p-1}) \end{aligned}$$

L'azione ϕ -dipendente può allora essere scritta nella forma:

$$S_\phi[\sigma, \hat{\sigma}] = -\beta \phi N \mathcal{E}_0 + \frac{\mu N}{2p} \phi^2 - \mu \phi N \int dt Q_5[\sigma, \hat{\sigma}] Q_6^{p-1}[\sigma, \hat{\sigma}] \quad (2.20)$$

dove si è posto $\mu = p\beta^2/2$. Come d'abitudine, l'integrazione può essere effettuata con il metodo del punto di sella, imponendo:

$$Q_\mu[\sigma, \hat{\sigma}] = Q_\mu(t, t') \quad \mu = 1 \dots 6$$

e quindi integrando su tutte le funzioni $Q_\mu(t, t')$ locali nello spazio, ma non nel tempo. Tecnicamente il vincolo può essere introdotto per mezzo di sei funzioni delta della forma:

$$\delta(Q[\sigma, \hat{\sigma}] - Q_\mu) = \frac{N}{2\pi i} \int \mathcal{D}\lambda_\mu \exp\{N(\lambda_\mu, Q_\mu[\sigma, \hat{\sigma}] - Q_\mu(t, t'))\}$$

Sostituendo nella (2.19) e sfruttando le proprietà delle delta si ottiene in definitiva:

$$\begin{aligned} \bar{Z} = \int \left[\prod_{\mu=1}^6 \mathcal{D}Q_\mu \right] \int \left[\prod_{\mu=1}^6 \frac{\mathcal{D}\lambda_\mu}{2\pi i/N} \right] \\ \cdot \exp\left\{ -NG(Q_\mu, \lambda_\mu) + \log \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} \exp(S[\sigma, \hat{\sigma}, \lambda_\mu]) \right\} \end{aligned}$$

In cui:

$$\begin{aligned} G(Q_\mu, \lambda_\mu) = \int dt \left[\sum_{\mu=5}^6 \lambda_\mu(t, 0) Q_\mu(t, 0) + \mu \phi Q_5(t, 0) Q_6^{p-1}(t, 0) \right] + \\ + \int dt dt' \left\{ \sum_{\mu=1}^4 \lambda_\mu(t, t') Q_\mu(t, t') - \frac{\mu}{2} [Q_1(t, t') Q_2^{p-1}(t, t') + \right. \\ \left. + (p-1) Q_3(t, t') Q_4(t, t') Q_2^{p-2}(t, t')] \right\} \end{aligned}$$

e l'azione $S[\sigma, \hat{\sigma}, \lambda_\mu]$ è data da:

$$\begin{aligned} S[\sigma, \hat{\sigma}, \lambda_\mu] = S_0[\sigma, \hat{\sigma}] - \beta \phi N \mathcal{E}_0 + \frac{\mu N}{2p} \phi^2 + \\ + \sum_i \int dt [\lambda_5(t, 0) i \hat{\sigma}_i(t) \sigma_i(0) + \lambda_6(t, 0) \sigma_i(t) \sigma_i(0)] + \\ + \sum_i \int dt dt' [\lambda_1(t, t') i \hat{\sigma}_i(t) i \hat{\sigma}_i(t') + \lambda_2(t, t') \sigma_i(t) \sigma_i(t') + \\ + \lambda_3(t, t') i \hat{\sigma}_i(t) \sigma_i(t') + \lambda_4(t, t') \sigma_i(t) i \hat{\sigma}_i(t')] \quad (2.21) \end{aligned}$$

I parametri λ_μ , Q_μ e ϕ possono essere sostituiti, nel punto di sella, con i rispettivi valori stazionari λ_μ^0 , Q_μ^0 e ϕ^0 . Per quanto concerne i parametri Q_μ e λ_μ , con $\mu = 5, 6$ in particolare, si ricava:

$$\lambda_5^0 = -\mu \phi^0 Q_6^0{}^{p-1} \quad (2.22a)$$

$$\lambda_6^0 = -\mu \phi^0 (p-1) Q_5^0 Q_6^0{}^{p-2} \quad (2.22b)$$

e, allo stesso modo:

$$Q_5^0 = \frac{1}{N} \sum_i \langle i\hat{\sigma}_i(t)\sigma_i(0) \rangle = G(0, t) \quad (2.23a)$$

$$Q_6^0 = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i(t)\sigma_i(0) \rangle = C(t, 0) \quad (2.23b)$$

avendo indicato con le parentesi angolari, la media sull'azione (2.21). Il valore stazionario ϕ_0 della variabile ϕ , si può ricavare direttamente dalla (2.20):

$$\frac{\partial S_\phi}{\partial \phi} = -\beta N \mathcal{E}_0 + \frac{\mu N}{p} \phi - \mu N \int dt Q_5(t, 0) [Q_6(t, 0)]^{p-1} = 0$$

da cui, usando le (2.23):

$$\phi^0 = \frac{p\beta \mathcal{E}_0}{\mu} + \frac{1}{p} \int dt G(0, t) C^{p-1}(t, 0) \quad (2.24)$$

Ora, se si prendono in considerazioni le condizioni al contorno ricavate nel paragrafo precedente, in cui il sistema è soggetto ad una dinamica causale limitata nel tempo dagli istanti $t = 0$ e il generico $t = t^* > 0$, l'integrale nella (2.24) si annulla per causalità della $G(0, t)$:

$$\int_0^{t^*} dt G(0, t) C^{p-1}(t, 0) = 0$$

Raccogliendo i risultati sin'ora ottenuti si può scrivere, in definitiva, l'azione efficace della teoria:

$$\begin{aligned} S_{eff} = & \frac{\mu N}{2} \phi^2 - \beta \phi N \mathcal{E}_0 + \sum_i \int dt i\hat{\sigma}_i(t) [-\partial_t \sigma_i(t) - z(t)\sigma_i(t) + i\hat{\sigma}_i(t)] + \\ & - \sum_i p\beta \mathcal{E}_0 \int dt C^{p-1}(t, 0) i\hat{\sigma}_i(t)\sigma_i(0) - \sum_i p(p-1)\beta \mathcal{E}_0 \int dt G(t, 0) C^{p-2}(t, 0) \sigma_i(t)\sigma_i(0) + \\ & + \sum_i \mu(p-1) \int dt dt' G(t, t') C^{p-2}(t, t') i\hat{\sigma}_i(t)\sigma_i(t') + \sum_i \mu \int dt dt' C^{p-1}(t, t') i\hat{\sigma}_i(t) i\hat{\sigma}_i(t') + \\ & + \sum_i \int dt dt' \lambda_2^0 \sigma_i(t)\sigma_i(t') + V\{\sigma\} \quad (2.25) \end{aligned}$$

Le equazioni dinamiche per le quantità $C(t, t')$ e $G(t, t')$ si possono ricavare a questo punto direttamente dall'azione (2.25). Prima di farlo, tuttavia, è necessario ricordare alcune importanti identità, ricorrenti nell'applicazioni della teoria dinamica allo studio di problemi di moto in presenza di potenziali aleatori [43]. Sia Z un funzionale generatore della forma:

$$Z[l, \hat{l}] = \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} e^{S[\sigma, \hat{\sigma}] + \sum_i \int dt'' [l_i(t'')\sigma_i(t'') + i\hat{l}(t'')i\hat{\sigma}_i(t'')]}$$

variando Z rispetto al campo $i\hat{\sigma}_i(t)$ e al termine di sorgente $l_i(t')$ si ottiene immediatamente:

$$\frac{\delta^2 Z[l, \hat{l}]}{\delta l_i(t') \delta i \hat{\sigma}_i(t)} = \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} \sigma_i(t') \frac{\delta S}{\delta i \hat{\sigma}_i(t)} e^{S[\sigma, \hat{\sigma}] + \sum_i \int dt'' [l_i(t'') \sigma_i(t'') + i \hat{l}(t'') i \hat{\sigma}_i(t'')]}$$

Per $l = \hat{l} = 0$, l'espressione coincide con:

$$\left\langle \sigma_i(t') \frac{\delta S}{\delta i \hat{\sigma}_i(t)} \right\rangle = 0 \quad (2.26)$$

avendo come sempre indicato con le parentesi angolari la media nella misura definita dall'azione dinamica S . Allo stesso modo, variando inizialmente rispetto a $i\hat{\sigma}_i(t)$ e dopo rispetto a $i\hat{l}_i(t')$, si ottiene:

$$\left\langle i \hat{\sigma}_i(t') \frac{\delta S}{\delta i \hat{\sigma}_i(t)} \right\rangle = -\delta(t - t') \quad (2.27)$$

Applicando la (2.26) alla (2.25) si ricava senza difficoltà:

$$\begin{aligned} & [\partial_t + z(t)] C(t, t') + p\beta\mathcal{E}_0 C^{p-1}(t, 0) C(0, t') = \\ & = \mu(p-1) \int_0^t dt'' G(t, t'') C^{p-2}(t, t'') C(t'', t') + \mu \int_0^{t'} dt'' C^{p-1}(t, t'') G(t', t'') \end{aligned} \quad (2.28)$$

Applicando lo stesso metodo a partire dalla (2.27) si ottiene invece:

$$[\partial_t + z(t)] G(t, t') - \delta(t - t') = \mu \int_{t'}^t dt'' C^{p-2}(t, t'') G(t, t'') G(t', t'') \quad (2.29)$$

La quantità $z(t)$ associata al vincolo sferico, può essere messa in relazione all'energia del sistema applicando alla (2.28) il limite $t \rightarrow t'$:

$$z(t) - 1 = \mu p \int_0^t dt'' G(t, t'') C^{p-1}(t, t'') - p\beta\mathcal{E}_0 C^p(t, 0) \quad (2.30)$$

dove si è tenuto conto del fatto che:

$$C(t, t) = 1 \quad \lim_{t' \rightarrow t^-} G(t, t') = 1 \quad \lim_{t' \rightarrow t^\pm} \partial_t C(t, t') = \pm 1 \quad (2.31)$$

Per esplicitare la relazione con l'energia basterà, a questo punto, moltiplicare l'equazione di Langevin (2.16) per $\sigma_i(t')$ e sommare sull'indice i :

$$\sum_i \partial_t \sigma_i(t) \sigma_i(t') = - \sum_i \sigma_i(t') \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i(t)} - z(t) \sum_i \sigma_i(t) \sigma_i(t') + \sum_i \sigma_i(t') \xi_i(t)$$

dividendo per il numero di spin N , mediando sul rumore termico ξ , passando al limite di $t \rightarrow t'$, e tenendo conto del fatto che:

$$\lim_{t \rightarrow t'} \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i(t') \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i(t)} \right\rangle = p\beta \mathcal{E}(t)$$

si ottiene l'identità:

$$z(t) = 1 - p\beta \mathcal{E}(t)$$

che sostituita nella (2.30), restituisce infine:

$$\mathcal{E}(t) = -\frac{p\beta}{2} \int_0^t dt'' G(t, t'') C^{p-1}(t, t'') + \mathcal{E}_0 C^p(t, 0) \quad (2.32)$$

Le equazioni dinamiche per le funzioni a due tempi $C(t, t')$ e $G(t, t')$ possono essere scritte definitivamente nella forma:

$$\begin{aligned} & [\partial_t + 1 - p\beta \mathcal{E}(t)] C(t, t') + p\beta \mathcal{E}_0 C^{p-1}(t, 0) C(0, t') = \\ & = \mu(p-1) \int_0^t dt'' G(t, t'') C^{p-2}(t, t'') C(t'', t') + \mu \int_0^{t'} dt'' C^{p-1}(t, t'') G(t', t'') \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$[\partial_t + 1 - p\beta \mathcal{E}(t)] G(t, t') - \delta(t - t') = \mu \int_{t'}^t dt'' C^{p-2}(t, t'') G(t, t'') G(t', t'') \quad (2.34)$$

coincidenti, nel caso in cui $\mathcal{E}(0) = 0$, con l'equazioni dinamiche generali del modello p -spin sferico [15].

Passiamo ora al caso della funzione a due repliche $\hat{C}(t, t')$. Come già detto nel paragrafo precedente, essa racchiude le proprietà del processo dinamico derivante dall'unione del moto istantaneo dallo stato metastabile s' alla sommità della barriera energetica u (equiparato dalla (2.8) ad un ordinario problema di dinamica causale), e il processo di rilassamento dal punto instabile u allo stato d'equilibrio s . A differenza del caso precedente, nella derivazione di $\hat{C}(t, t')$ non sarà sufficiente concentrarsi su un unico funzionale d'azione, così che la (2.18) dovrà essere riscritta nella forma:

$$S_J[\sigma, \hat{\sigma}] = \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 i_2 \dots i_p} [A_0 + A_1 + A_2]$$

avendo indicato:

$$A_0 = -\phi \sigma_{i_1}(0) \sigma_{i_2}(0) \dots \sigma_{i_p}(0) \quad A_\alpha = \int_{\gamma_\alpha} dt \sum_{k=1}^p i \hat{\sigma}_{i_k}^\alpha(t) \prod_{l \neq k} \sigma_{i_l}^\alpha(t) \quad \alpha = 1, 2$$

dove, in accordo con la notazione introdotta nel paragrafo precedente, si è voluto contrassegnare con le etichette 1 e 2 le coordinate relative alla prima e alla seconda parte

del moto e con il simbolo γ_α ($\alpha = 1, 2$) un generico intervallo d'integrazione nel sottinsieme $t < 0$ e $t > 0$ dell'asse dei tempi. L'integrazione gaussiana produrrà dunque un'azione della forma:

$$S[\sigma, \hat{\sigma}] = \frac{J^2 p!}{4N^{p-1}} (A_0^2 + A_1^2 + A_2^2 + 2A_0A_1 + 2A_0A_2 + 2A_1A_2)$$

Ora, i termini $A_0 + 2A_0A_\alpha$ e A_α^2 con $\alpha = 1, 2$ sono identici, eccetto che per l'intervallo di integrazione nel tempo, a quelli che si ottengono nella (2.19) per le quantità $S_\phi[\sigma, \hat{\sigma}]$ e $S[\sigma, \hat{\sigma}]$ rispettivamente; pertanto, lavorando come nel caso precedente si ottiene per essi un'azione efficace della forma:

$$\hat{S}_{eff} = S_{eff}^1 + S_{eff}^2$$

in cui i due termini S_{eff}^α ($\alpha = 1, 2$) hanno la stessa forma della (2.25). Ad essi si aggiunge il termine misto derivante dal prodotto di A_1 e A_2

$$\frac{J^2 p!}{4N^{p-1}} \beta^2 \int dt dt' \sum_k \sum_{k'} i\hat{\sigma}_{ik}^1(t) i\hat{\sigma}_{ik'}^2(t') \prod_{l \neq k} \sigma_{il}^1(t) \prod_{l' \neq k'} \sigma_{i'l'}^2(t')$$

Procedendo esattamente come per i termini quadratici, da quest'ultima espressione si ottiene senza difficoltà aggiuntive:

$$S_{eff}^{12} = \frac{\mu}{2} \sum_i \int dt dt' \hat{C}(t, t') i\hat{\sigma}_i^1(t) i\hat{\sigma}_i^2(t') + \sum_i \int dt dt' \hat{\lambda}_0^2 \sigma_i^1(t) \sigma_i^2(t') \quad (2.35)$$

avendo tenuto conto del fatto che, per la (2.12), la funzione di risposta a due repliche $G_{12}(t, t') = G_{21}(t, t')$ è nulla per ogni coppia di istanti t e t' . La nuova azione efficace sarà pertanto della forma:

$$\hat{S}_{eff} = S_{eff}^1 + S_{eff}^2 + 2S_{eff}^{12}$$

Usando, a questo punto, la relazione (2.26) e tenendo conto della diversità delle variabili σ_i^1 e σ_i^2 oltre che della (2.12), si ottiene in definitiva:

$$\begin{aligned} & [\partial_t + 1 - p\beta\mathcal{E}(t)] \hat{C}(t, t') + p\beta\mathcal{E}_0 C^{p-1}(t, 0) \hat{C}(0, t') = \\ & = \mu(p-1) \int_0^t dt'' G(t, t'') C^{p-2}(t, t'') \hat{C}(t'', t') + \mu \int_0^{t'} dt'' \hat{C}^{p-1}(t, t'') G(t', t'') \end{aligned} \quad (2.36)$$

Le equazioni (2.33), (2.34) e (2.36) riassumono in conclusione l'evoluzione dinamica di un modello p -spin sferico nell'atto di transitare dallo stato metastabile s' allo stato d'equilibrio s dopo aver superato la barriera determinata dall'insieme di configurazioni u . Delle tre equazioni, solo la (2.36) testimonia la perdita di correlazione del sistema nel susseguirsi delle due fasi del moto ($s' \rightarrow u$ e $u \rightarrow s$), tuttavia, affinché questa possa essere analizzata e il comportamento asintotico della $\hat{C}(t, t')$ messo in luce, è indispensabile studiare da prima le (2.33) e (2.34), facendo in modo che lo scenario dipinto da esse costituisca la guida ad una corretta interpretazione del comportamento dinamico espresso dalla (2.36).

2.4 Soluzione analitica delle quazioni dinamiche

Nel seguente paragrafo dimostreremo come l'esito del processo dinamico dipenda fortemente dal valore dell'energia dello stato di transizione \mathcal{E}_0 . In particolare si osserva che, per una \mathcal{E}_0 "sufficientemente" alta, il sistema rilassa in uno stato diverso da quello iniziale e la funzione di correlazione spin-spin si annulla; mentre, se il valore dell'energia dello stato di transizione \mathcal{E}_0 è prossimo con quella dello stato iniziale \mathcal{E}' , il sistema ricade nello stesso stato in cui si trova all'inizio della dinamica e la funzione di correlazione è uguale al parametro d'ordine di Edwards-Anderson. Seguendo [44], mostreremo l'esistenza di un valore di soglia \mathcal{E}_c tale che per $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_c$ il sistema torna nello stato iniziale, mentre per $\mathcal{E}_0 > \mathcal{E}_c$, rilassa in una nuova valle. La differenza fra l'energia iniziale e tale energia critica rappresenta appunto l'altezza tipica delle barriere energetiche del paesaggio delle fasi. Per $\mathcal{E}_0 = 0$ le equazioni di moto coincidono con quelle di [15] e la dinamica consiste semplicemente in un processo di rilassamento all'equilibrio di tipo aging o FDT a seconda dei valori di t e t' considerati. Un'analisi numerica [44] delle equazioni (2.33), (2.34) e (2.32) ha mostrato come il regime di aging possa essere osservato anche per valori di \mathcal{E}_0 compresi fra zero ed un particolare valore di soglia $\mathcal{E}_c < 0$. Per $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_c$, al contrario, la soluzione numerica evidenzia il rilassamento ad uno stato stabile con funzioni di correlazione FDT. In quest'ultimo caso è possibile determinare analiticamente alcune importanti relazioni circa il comportamento asintotico delle funzioni $C(t, t')$ e $G(t, t')$.

Si consideri inizialmente l'equazione (2.34) in corrispondenza degli istanti di tempo $t > t' \gg 1$; per il teorema di fluttuazione e dissipazione si ha che:

$$(p-1)C^{p-2}(t-t'')G(t-t'') = \frac{dC^{p-1}(t-t'')}{dt''}$$

il secondo membro risulterà pertanto pari a:

$$\begin{aligned} \mu [C^{p-1}(0)G(t-t') - C^{p-1}(t-t')G(0)] - \mu \int_{t'}^t dt'' C^{p-1}(t-t'') \frac{dG(t''-t')}{dt''} = \\ = \mu [G(t-t') - C^{p-1}(t-t')] - \mu \int_{t'}^t dt'' C^{p-1}(t-t'') \frac{dG(t''-t')}{dt''} \end{aligned}$$

avendo tenuto conto delle relazioni (2.31). Aggiungendo e sottraendo da quest'ultima espressione la stessa quantità $C^{p-1}(t-t')G(t-t')$:

$$\begin{aligned} \mu G(t-t') [1 - C^{p-1}(t-t')] + \mu C^{p-1}(t-t') [G(t-t') - 1] + \\ - \mu \int_{t'}^t dt'' C^{p-1}(t-t'') \frac{dG(t''-t')}{dt''} \end{aligned}$$

e scrivendo il secondo termine:

$$G(t-t') - 1 = \int_{t'}^t dt'' \frac{dG(t''-t')}{dt''}$$

la (2.34) si può riscrivere nella forma:

$$\begin{aligned} & [\partial_t + 1 - p\beta\mathcal{E}(t)]G(t-t') - \delta(t-t') = \\ & = \mu G(t-t')[1 - C^{p-1}(t-t')] + \mu \int_{t'}^t dt'' [C^{p-1}(t-t') - C^{p-1}(t''-t')] \frac{dG(t''-t')}{dt''} \end{aligned}$$

Ora, per $t > t' \gg 1$, l'integrale a secondo membro può essere trascurato. Imponendo dunque:

$$C(t-t') \rightarrow q \quad \mathcal{E}(t) \rightarrow \mathcal{E} \quad \text{per} \quad t > t' \gg 1 \quad (2.37)$$

ed utilizzando nuovamente la relazione FDT:

$$(1 - p\beta\mathcal{E}) \frac{dC(t-t')}{dt} + \delta(t-t') = (1 - q^{p-1}) \frac{dC(t-t')}{dt}$$

che integrata rispetto $\tau = t - t'$ in un opportuno intervallo $[0, \bar{\tau}]$ con $\bar{\tau} : \bar{\tau}/t \rightarrow 0$ per $t \gg 1$, sia ha che:

$$-p\beta\mathcal{E} = \mu(1 - q^{p-1}) + \frac{q}{1-q} \quad (2.38)$$

Prendiamo ora in considerazione l'equazione (2.33) e supponiamo che t e t' siano due istanti di tempo generici tali che $t > t'$. In generale esisterà sempre un tempo \bar{t} in corrispondenza del quale:

$$C(t, \bar{t}) = C(t - \bar{t}) \quad \text{con} \quad \frac{t - \bar{t}}{t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$$

Decomponendo gli integrali della (2.33) in modo da separare il regime FDT da quello non stazionario, che si riscontra prendendo in esame intervalli di tempo più ampi [43], avremo:

$$\begin{aligned} & [\partial_t + 1 - p\beta\mathcal{E}(t)]C(t, t') + p\beta\mathcal{E}_0 C^{p-1}(t, 0)C(0, t') = \\ & = \mu(p-1) \int_{\bar{t}}^t dt'' C^{p-2}(t-t'')G(t-t'')C(t'', t') + \mu(p-1)\bar{I} + \mu I(t') \quad (2.39) \end{aligned}$$

avendo posto:

$$I(t') = \int_0^{t'} dt'' [(p-1)C^{p-2}(t, t'')G(t, t'')C(t'', t') + C^{p-1}(t, t'')G(t', t'')]$$

$$\bar{I} = \int_{t'}^{\bar{t}} dt'' C^{p-2}(t, t'')G(t, t'')C(t'', t')$$

Nel regime in cui $t' \ll \bar{t} < t$ possiamo approssimare $C(t'' - t') \sim C(t, t')$ in modo tale che il primo integrale a secondo membro della (2.39) risulti uguale a:

$$\begin{aligned} & \int_{\bar{t}}^t dt'' C^{p-2}(t-t'')G(t-t'')C(t''-t') \sim \\ & \sim C(t, t') \int_{\bar{t}}^t dt'' \frac{dC^{p-1}(t-t'')}{dt''} = C(t, t')[1 - C(t-\bar{t})] \end{aligned}$$

Sostituendo avremo dunque:

$$\begin{aligned} [\partial_t + 1 - p\beta\mathcal{E}(t)]C(t, t') + p\beta\mathcal{E}_0C^{p-1}(t, 0)C(0, t') = \\ = \mu C(t, t')[1 - C(t - \bar{t})] + \mu(p-1)\bar{I} + \mu I(t') \end{aligned} \quad (2.40)$$

Ora, come anticipato, la soluzione numerica delle (2.33), (2.34) e (2.32) [44] mostra che per $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_c$ il sistema rilassa in uno stato stabile con funzioni di correlazioni FDT per $t, t' \gg 1$. Quindi è ragionevole supporre che l'integrale \bar{I} , che qui rappresenta il contributo del regime non stazionario, si annulli per tempi lunghi. Specificando la (2.40) per $t' = 0$ e ponendo per ovvi motivi $I(t') = 0$ si ha quindi:

$$[1 - p\beta\mathcal{E}(t)]C(t, 0) + p\beta\mathcal{E}_0C^{p-1}(t, 0) = \mu C(t, 0)(1 - q^{p-1})$$

L'annullamento della derivata è legato, in particolare, al meccanismo di *debole rottura di ergodicità* [15, 43] in virtù del quale, fissato un generico istante iniziale t' , il sistema è sempre in grado di allontanarsi dalla configurazione assunta in t' con una dinamica sempre più lenta man mano che t' aumenta. Imponendo allora:

$$C(t, 0) = q_1 \quad \text{per} \quad t \gg 1$$

si ha in definitiva:

$$-p\beta\mathcal{E} = \mu(1 - q^{p-1}) - p\beta q_1^{p-2}\mathcal{E}_0 - 1 \quad (2.41)$$

Applicando questo stesso ragionamento all'equazione (2.32), si può ricavare un'ulteriore espressione della quantità $-p\beta\mathcal{E}$ nella forma:

$$-p\beta\mathcal{E} = \mu(1 - q^p) + q_1^p\mathcal{E}_0 \quad (2.42)$$

combinando le equazioni (2.38), (2.41) e (2.42) ed introducendo la nuova variabile:

$$z = \beta(1 - q)q^{\frac{p-2}{2}} \quad (2.43)$$

si possono riassumere i risultati ottenuti fin'ora nell'unica equazione:

$$\frac{1}{2}pz^2 + (pz|\mathcal{E}_0|)^{-\frac{2}{p-2}} = 1 \quad (2.44)$$

in cui compare solamente il parametro \mathcal{E}_0 . Per ogni fissato valore di \mathcal{E}_0 , inoltre, tutta la dipendenza di q dalla temperatura è espressa dalla definizione (2.43). Come conferma il grafico di Figura 2.5, l'equazione (2.44) è soddisfatta solamente per valori di $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_c$ con:

$$\mathcal{E}_c = -(2p)^{-\frac{1}{2}}(p-2)^{\frac{2-p}{2}}(p-1)^{\frac{p-2}{2}}$$

Per $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_c$ l'equazione (2.44) ammette due soluzioni, ma solo quella compresa nell'intervallo:

$$0 < z < \sqrt{\frac{2}{p(p-1)}}$$

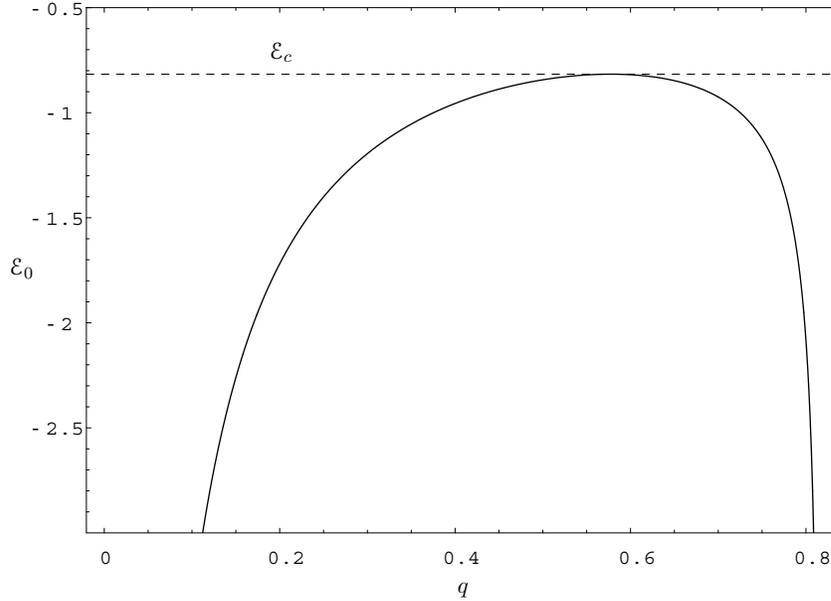


Figura 2.5: Rappresentazione della curva (2.44), nel piano (q, \mathcal{E}_0) , per $p = 3$. L'equazione è soddisfatta unicamente nel semipiano $\mathcal{E}(z) < \mathcal{E}_c$.

corrisponde ad una soluzione fisica del problema. Per $\mathcal{E}_0 = -\beta/2$ le equazioni (2.38), (2.41) e (2.42) conducono alle relazioni:

$$q = q_1 \quad \mathcal{E} = \mathcal{E}_0$$

corrispondenti al caso in cui il sistema, inizialmente in uno stato ad energia \mathcal{E}_0 , vi rimane durante tutto il processo dinamico. La dipendenza di q dalla temperatura può essere espressa, in questo caso, attraverso la sola equazione:

$$\mu q^{p-2}(1-q) = 1 \tag{2.45}$$

Ricapitolando: quando il sistema effettua una transizione ad uno stato di energia $\mathcal{E}_0 > \mathcal{E}_c$, la dinamica è caratterizzata da un regime di tipo aging [15]; quando $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_c$ il sistema rilassa in uno stato stabile; per $\mathcal{E}_0 = -\beta/2$ il sistema rimane in equilibrio per un tempo indefinito.

Passiamo ora alla funzione a due repliche $\hat{C}(t, t')$. Lo studio numerico dell'equazione (2.36) nel regime in cui $t, t' \rightarrow \infty$ evidenzia [44] la seguente circostanza:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_c & \quad \hat{C}(t, t') \rightarrow q \\ \mathcal{E}_0 > \mathcal{E}_c & \quad \hat{C}(t, t') \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Questo significa che per energie $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_c$ le repliche rilassano nello stesso stato in cui si trovavano all'inizio della dinamica, mentre per $\mathcal{E} > \mathcal{E}_c$ il sistema rilassa in uno stato differente. Lo stesso risultato può anche essere ottenuto analiticamente, a partire

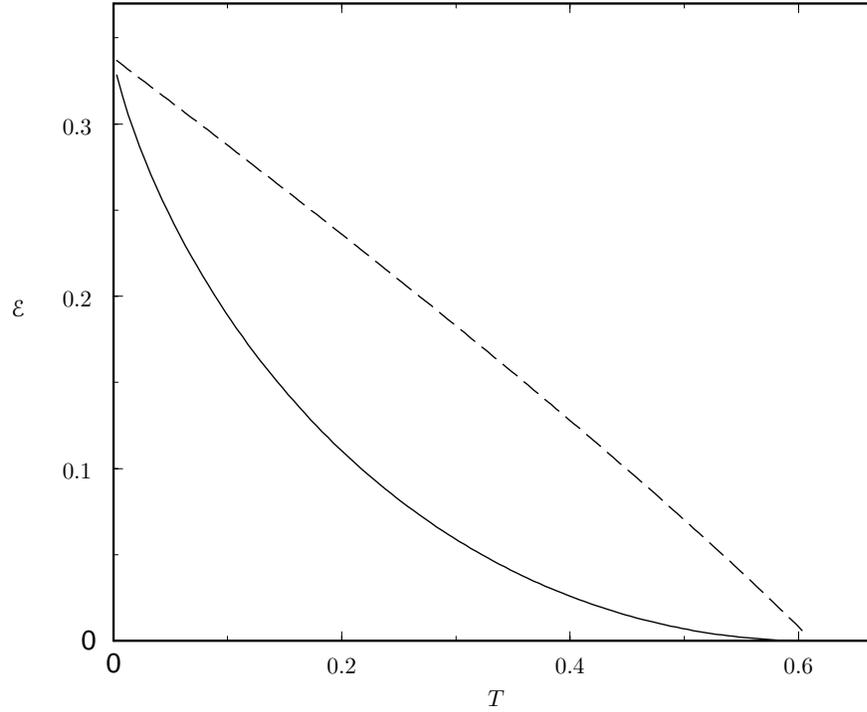


Figura 2.6: Barriera energetica \mathcal{E}_b in funzione della temperatura (linea tratteggiata). La linea continua rappresenta l'azione effettiva $-AT$ che controlla la probabilità di transizione da uno stato metastabile nel caso $p = 3$. Tratto da [44].

dall'equazione (2.36), assumendo che il regime FDT determini completamente la dinamica per tempi grandi [44]. Sulla base di quanto esposto possiamo concludere che la differenza $\mathcal{E}_b = \mathcal{E}_c - \mathcal{E}'$, con \mathcal{E}' energia del sistema nello stato iniziale s' , corrisponda all'altezza della barriera energetica fra i due stati s' e s . L'andamento della quantità E_b come funzione della temperatura è rappresentato in Figura (2.6).

2.5 Probabilità di transizione

Appurato che il processo dinamico descritto dalle equazioni (2.33), (2.34), (2.36) e (2.32) corrisponda effettivamente alla transizione del sistema oltre la barriera energetica dello stato u , è ora possibile determinare la probabilità di fuga dallo stato metastabile s' . Come predicato dalle (2.5) e (2.15), essa è legata all'azione del processo istantoneo dalla relazione $P \propto \exp(NA)$, dove:

$$A = \frac{1}{N} \log Z = \frac{1}{N} \log \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\hat{\sigma} e^{\int_{i'}^0 dt'' L[\sigma, \hat{\sigma}]} \quad (2.46)$$

Derivando rispetto a β si ottiene:

$$\frac{dA}{d\beta} = \frac{1}{N(p-1)!} \int_{t'}^0 dt'' \left\langle \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_p)} J_{i_1 i_2 \dots i_p} i \hat{\sigma}_{i_1}(t'') \sigma_{i_2}(t'') \dots \sigma_{i_p}(t'') \right\rangle \quad (2.47)$$

Effettuando la trasformazione di coordinate (2.8), si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{d\beta} = & \frac{1}{N(p-1)!} \int_{t'}^0 dt'' \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_p)} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \langle i \hat{\sigma}_{i_1}(t'') \sigma_{i_2}(t'') \dots \sigma_{i_p}(t'') \rangle + \\ & + \frac{1}{N(p-1)!} \int_{t'}^0 dt'' \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_p)} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \langle \partial_t \sigma_{i_1}(t'') \sigma_{i_2}(t'') \dots \sigma_{i_p}(t'') \rangle \end{aligned} \quad (2.48)$$

Il primo termine può essere visto come una somma di funzione di risposta a $p-1$ spin della forma:

$$G_{i_1 i_2 \dots i_p}(t=t') = \frac{\partial \langle \sigma_{i_2}(t) \sigma_{i_2}(t) \dots \sigma_{i_p}(t) \rangle}{\partial \beta h_{i_1}(t)} = 1$$

Il che rende nullo il primo termine se si considera che $\bar{J} = 0$. Il secondo termine non è che la derivata temporale dell'Hamiltoniana:

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = -\frac{1}{(p-1)!} \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_p)} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \partial_t \sigma_{i_1}(t) \sigma_{i_2}(t) \dots \sigma_{i_p}(t)$$

da cui la (2.48) diventa:

$$\frac{dA}{d\beta} = -\frac{1}{N} [H(0) - H(t')] = -\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}' \quad (2.49)$$

Per integrare l'equazione (2.49) è conveniente fare riferimento ai risultati ottenuti da Crisanti e Sommers con il metodo TAP [14], in virtù dei quali si ha:

$$f = -q^{p/2} \left[\frac{1}{pz} + \frac{z(p-1)}{2} \right] - \frac{1}{2\beta} \log(1-q) - \frac{\beta}{4} [1 + (p-1)q^p - pq^{p-1}] \quad (2.50)$$

Considerato che $E = d(\beta f)/d\beta$, possiamo esprimere l'azione A in funzione della sola energia \mathcal{E}_0 :

$$\begin{aligned} d(\beta f') &= \mathcal{E}' d\beta & dA &= (\mathcal{E}' - \mathcal{E}_0) d\beta \\ \beta f' &= \beta \mathcal{E}' + \Gamma(\mathcal{E}') & A &= \beta f' - \beta \mathcal{E}_0 - \Gamma(\mathcal{E}') \end{aligned}$$

La funzione incognita $\Gamma(\mathcal{E}')$ si può ricavare sulla base dei risultati precedenti; in particolare, ricordando che per $\mathcal{E}_0 = -\beta/2$ il sistema è in equilibrio per un tempo indeterminato, si può richiedere che l'azione del processo istantaneo associata al valore di energia $\mathcal{E}_0 = -\beta/2$ sia identicamente nulla, da cui:

$$\Gamma(\mathcal{E}') = \beta f' - \beta/2$$

Ricordando che in corrispondenza di questa soluzione si ha:

$$\mu q^{p-2}(1-q) = 1$$

si ricava, in definitiva:

$$-A = \mathcal{E}_0^2 + \beta \mathcal{E}_0 - [\beta f' - g(z)] \quad (2.51)$$

avendo indicato:

$$g(z) = \frac{1}{2} \left(\frac{2-p}{2} - \log \frac{pz^2}{2} + \frac{p-1}{2} z^2 - \frac{2}{p^2 z^2} \right) \quad z < z_c$$

È da notare che nell'espressione (2.50) dell'energia libera non figura il termine di complessità. Questa peculiarità consegue dal fatto che nella derivazione dell'espressione (2.50) [14] si è sommato esclusivamente su una classe di stati associati al valore di energia \mathcal{E} . Di conseguenza la (2.50) rappresenta propriamente l'energia libera degli stati di tale classe. Per disporre di un'energia libera completa, si può sommare la funzione di partizione $\exp(-\beta f)$ degli stati di classe \mathcal{E} , su tutte le classi di energia, includendo il corrispondente fattore di degenerazione di ogni classe. Con queste premesse si dimostra [14] che, al di sotto della temperatura critica, l'energia libera può essere espressa nella forma:

$$\bar{f} = f - Tg(z) - \frac{1}{2\beta} \log(1 + 2\pi) \quad (2.52)$$

L'ultimo termine della (2.52) è frutto della normalizzazione della traccia sugli spin e rappresenta l'entropia del sistema a temperatura infinita.

Allo stesso modo possiamo esprimere la (2.51) introducendo l'*energia libera*² dello stato instabile "a caso" \mathcal{E}_0 nella forma $f_0 = \mathcal{E}_0 - T s_0$, con:

$$\overline{\langle \delta(N\mathcal{E}_0 - H[\sigma]) \rangle} = e^{N s_0}$$

Procedendo in questo modo si ricava:

$$s_0 = \frac{1}{2}(1 + \log 2\pi) - \mathcal{E}_0^2$$

da cui immediatamente:

$$\beta f_0 = \mathcal{E}_0^2 + \beta \mathcal{E}_0 - \frac{1}{2}(1 + \log 2\pi) \quad (2.53)$$

Sostituendo la (2.52) e la (2.53) nella (2.51), si ricava infine:

$$-A = \mathcal{E}_0^2 + \beta \mathcal{E}_0 - \frac{1}{2}(1 + \log 2\pi) - \beta \bar{f}' = \beta(f_0 - \bar{f}') \quad (2.54)$$

²Il corsivo vuole sottolineare che il termine *energia libera*, in questo contesto, va inteso con il significato attribuitogli nei paragrafi precedenti. Non essendo quello in questione uno stato di equilibrio, non è possibile definire un'energia libera in modo termodinamicamente corretto

La probabilità di transizione da uno stato metastabile s' con energia libera \bar{f}' ad un stato d'equilibrio s dinamicamente separato dal primo da un insieme di configurazioni instabili u di energia $f_0 = \mathcal{E}_0 + \log \Gamma_u$, è data dall'espressione:

$$P \sim e^{NA} = \exp[\beta N(\bar{f}' - f_0)] \quad (2.55)$$

Gli sviluppi formali esposti nel presente paragrafo hanno fatto leva sull'ipotesi che l'azione A del processo di transizione sia una quantità automediante. Se pur non dimostrata, questa assunzione è in parte supportata dall'espressione (2.49), che lega in relazione di proporzionalità la quantità A e l'energia. Anche in questo caso, tuttavia, non si può escludere a priori l'esistenza di barriere molto piccole e rare che contribuiscono in qualche modo al processo di rilassamento perturbando la relazione di dipendenza espressa dalla (2.49). Dunque il risultato (2.55) deve essere interpretato unicamente come una misura "tipica" della probabilità di transizione oltre una barriera energetica piuttosto che come risultato esaustivo.

2.6 Conclusioni

In questa sezione si è analizzato, per mezzo del metodo istantonico [40, 42], il processo di transizione da uno stato metastabile s' con energia libera \bar{f}' ad un generico stato di equilibrio s , associato al superamento della barriera energetica u . Il meccanismo di fuga dallo stato metastabile s' può essere riprodotto, sul piano formale, mappando il processo istantonico, anticausale per formulazione, con la medesima transizione invertita nel tempo. In questa veste l'evento $s' \rightarrow s$, costituito dalle due fasi di moto $s' \rightarrow u$ e $u \rightarrow s$, si riduce al problema più semplice della dinamica causale di due repliche dello stesso sistema con energia iniziale fissata \mathcal{E}_0 . La probabilità di transizione può essere determinata a partire dall'azione dinamica del processo istantonico la quale, a sua volta, può essere espressa nella forma più generale possibile, prendendo in considerazione la degenerazione della classe di configurazioni instabili ad energia \mathcal{E}_0 .

Quest'ultima affermazione, affiancata all'immagine dello spazio delle fasi come emerge dall'approccio TAP, costituisce un buono spunto di riflessione circa i limiti di validità della teoria. Nella fase di bassa temperatura, infatti, il numero di stati con energia \mathcal{E} è esponenzialmente grande, $N(\mathcal{E}) \sim \exp N\Sigma(\mathcal{E})$ con $\Sigma(\mathcal{E})$ strettamente positiva e monotona nell'intervallo di energia $[\mathcal{E}_s, \mathcal{E}_d]$ (vedi §1.5). Per questo motivo gli stati con energia maggiore sono generalmente più probabili ed un processo dinamico che abbia inizio da una configurazione generica si conclude di solito in uno stato di energia $\mathcal{E}_{\max} = \mathcal{E}_d$. Logicamente, per quanto numerosi, gli stati ad alta energia godono di una stabilità estremamente precaria. Dunque partendo da condizioni iniziali *a caso* e lasciando evolvere il sistema, si arriva col favore della probabilità ad una situazione marginalmente stabile. Come abbiamo dimostrato, tuttavia, stati di questo tipo possono sempre essere raggiunti se l'evoluzione dinamica prevede l'attraversamento di uno stato con energia $\mathcal{E}_0 > \mathcal{E}_c$ maggiore di una certa soglia critica.

In sostanza il risultato della (2.55), corrispondente alla legge di scala dinamica:

$$\tau \sim e^{AN^\varepsilon} \quad \varepsilon = 1 \quad (2.56)$$

dove τ è una scala di tempo tipica del problema, è da intendere esclusivamente in riferimento ai processi di transizione fra gli stati più numerosi del paesaggio energetico, cioè quelli per i quali si ha $\mathcal{E} \sim \mathcal{E}_d$. Quest'ultima prerogativa costituisce evidentemente la maggiore limitazione del metodo sopra esposto; la formulazione di una teoria con la quale determinare l'altezza della barriera fra una coppia di stati di energia fissata, costituisce tutt'ora un problema aperto.

Capitolo 3

Esperimenti numerici

3.1 Introduzione

L'invenzione del calcolatore elettronico ha avuto effetti determinanti sulla meccanica statistica. Da una parte, esso ha permesso di affrontare i problemi che richiedevano calcoli numerici complicati, dall'altra ha fornito un importante contributo alla comprensione dei concetti fondamentali. I vantaggi legati all'uso della sperimentazione numerica sono molteplici: una volta definito il modello, ad esempio, il calcolo non contiene approssimazioni ed è perfettamente esplicito. Questo è un vantaggio rispetto al trattamento analitico, che richiede di solito ipotesi intermedie ed approssimazioni. Quindi i risultati possono essere confrontati direttamente con esperimenti reali per determinare l'affidabilità del modello e con le soluzioni analitiche per valutare la validità delle diverse approssimazioni. Ancora, le simulazioni numeriche danno accesso a dettagli microscopici (come la posizione di una particella ad ogni istante) che non sono disponibili negli esperimenti. Infine è possibile definire il modello anche per situazioni non accessibili sperimentalmente, in modo da controllare le previsioni teoriche. In questo senso la simulazione numerica costituisce il "laboratorio privilegiato" [45] per l'analisi di circostanze che vanno oltre la realtà fenomenologica, ma che costituiscono un'indispensabile fucina di teorie destinate alla descrizione del mondo reale.

Il metodo Monte Carlo [46, 47, 48], in particolare, ha costituito negli ultimi due decenni uno strumento imprescindibile della fisica dei sistemi disordinati ed in particolare dei vetri di spin, dove i risultati analitici forniscono un quadro esauriente solo in approssimazione di campo medio.

3.2 Il metodo Monte Carlo

Nell'ambito della meccanica statistica ricorre spesso l'esigenza di calcolare il valore di aspettazione di una grandezza osservabile in un sistema all'equilibrio con un bagno termico. In un sistema governato da un'Hamiltoniana H per il quale $[C]$ rappresenta l'insieme di tutte le possibili configurazioni dello spazio delle fasi del sistema relativamente

a tutti i suoi gradi di libertà, si ha:

$$\langle O \rangle = \frac{\int [dC] O_C e^{-\beta H_C}}{\int [dC] e^{-\beta H_C}} \quad (3.1)$$

Evidentemente l'immensa varietà di possibili stati microscopici di un sistema termodinamico non permette di valutare $\langle O \rangle$ direttamente dalla (3.1): nel caso di un piccolo modello di Ising tridimensionale costituito da un cubo di $10 \times 10 \times 10$ spin, si avrebbero ad esempio $2^{1000} \simeq 10^{300}$ configurazioni diverse, molte più di quelle che un comune calcolatore è oggi in grado di elaborare in un tempo accettabile. D'altra parte l'informazione espressa dall'intero ensemble canonico è estremamente dettagliata e addirittura sovrabbondante se paragonata alla precisione di un qualsivoglia macchina di calcolo.

La caratteristica principale del metodo Monte Carlo consiste, al contrario, nel campionare l'ensemble canonico attraverso un numero di configurazioni rilevanti, dalle quali poter ricavare una stima affidabile della medesima quantità (3.1). Aldilà delle possibili implementazioni gli schemi di aggiornamento e di verifica possono essere suddivisi in due principali categorie: gli algoritmi statici a campionamento diretto e gli algoritmi dinamici a campionamento pesato.

Il primo tipo consiste nel campionamento di una sequenza di possibili configurazioni a partire dalla distribuzione P desiderata. Gli stati generati in corrispondenza di ogni iterazione sono del tutto scorrelati dai precedenti ed i risultati prodotti possono essere trattati con le tradizionali tecniche statistiche di rivelazione degli errori e calcolo dei valori medi. Questo metodo, di largo utilizzo nel campo dell'integrazione numerica in spazi a bassa dimensione, si rivela piuttosto inefficace nei problemi di meccanica statistica e teoria dei campi in cui la distribuzione P dipende da un numero di gradi di libertà molto elevato. Le configurazioni prodotte convergono solo sporadicamente verso autentici stati di equilibrio, particolare che rende questa tecnica di campionamento adatta solamente ad una classe ristretta di problemi quali ad esempio i fenomeni di percolazione. Nella realtà lo stato di equilibrio di un sistema non è determinato con la stessa probabilità da tutte le configurazioni dello spazio delle fasi, ma dipende dal peso con cui ognuna di esse contribuisce alla misura canonica.

La caratteristica di base dei metodi del secondo tipo risiede nell'imitazione quest'ultima proprietà. In quest'ottica lo spazio delle fasi può essere riprodotto attraverso una sequenza di stati tale che la probabilità che ogni singola configurazione ha di esserne inclusa sia proporzionale al relativo peso di Boltzmann. Questa modalità di campionamento costituisce l'esempio più comune di *importance sampling*, su cui sono fondati la maggior parte degli algoritmi Monte Carlo dinamici.

Affinchè si possa realizzare uno schema di *importance sampling* come quello appena delineato è necessario innanzitutto abbandonare la pretesa di generare configurazioni indipendenti in modo sequenziale, e ripiegare piuttosto su catene di eventi di tipo Markoviano, in cui la relazione causale si estende solo tra stati adiacenti. In un sistema che possa assumere soltanto stati discreti appartenenti ad un certo insieme $\Omega \equiv \{\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_n\}$, la catena di Markov \mathbf{X} è la successione delle variabili aleatorie \mathbf{X}_t con $t = 1, 2, \dots$ tali che: (1) $\mathbf{X}_t \in \Omega \quad \forall t$ (2) la probabilità condizionata dello stato

\mathbf{X}_{t+1} dipende solo dal valore di \mathbf{X}_t . Il processo è allora completamente caratterizzato dalla matrice che definisce la probabilità di transizione fra stati dell'insieme numerabile Ω :

$$W_{ij} = P(\mathbf{X}_t = \mathbf{X}_j | \mathbf{X}_{t-1} = \mathbf{X}_i)$$

Dall'interpretazione della W_{ij} come probabilità condizionata seguono alcune proprietà importanti:

$$\sum_j W_{ij} = 1 \quad (3.2a)$$

$$W_{ij} \geq 0, \quad \forall x_i, x_j \in \Omega \quad (3.2b)$$

Se $\mathbf{P}_0 \equiv \{\pi_1(0), \pi_2(0) \dots \pi_n(0)\}$ è la probabilità associata alle configurazioni di Ω nello stato iniziale della catena, la probabilità \mathbf{P}_t all'istante t sarà legata a \mathbf{P}_0 dalla legge lineare:

$$\mathbf{P}_t = \hat{W}^t \mathbf{P}_0$$

Una domanda ragionevole da porsi, nell'intenzione di riprodurre con una catena di Markov i microstati di un sistema all'equilibrio, è se un processo descritto da una matrice di trasferimento \hat{W} , partendo da una generica distribuzione iniziale, rilassi in un tempo infinito ad una misura di probabilità invariante, cioè una distribuzione nello spazio degli eventi $\mathbf{P}_{\text{inv}} \equiv \{\pi_1, \pi_2 \dots \pi_n\}$ (si è rimossa la dipendenza temporale per sottolineare il regime stazionario) tale che:

$$\mathbf{P}_{\text{inv}} = \hat{W} \mathbf{P}_{\text{inv}}$$

e sotto quale ipotesi tale rilassamento si verifica. A tal proposito è possibile dimostrare il seguente teorema:

Teorema 1 *Condizione necessaria e sufficiente affinché una catena di Markov abbia un rilassamento ad un misura invariante è che:*

$$\exists n : W_{ij}^{(n)} > 0 \quad \forall i, j$$

cioè che gli elementi della matrice di transizione ad n passi siano tutti positivi¹. La condizione espressa nel teorema è detta di *irriducibilità* ed è indispensabile affinché la catena di Markov possa riprodurre il comportamento di un sistema ergodico.

Una classe importante di catene di Markov con dinamica stazionaria è quella in cui le probabilità di transizione godono della proprietà di *bilancio dettagliato*. Presi comunque tre stati i, j e k si ha allora:

$$W_{ij}W_{jk}W_{ki} = W_{ik}W_{kj}W_{ji}$$

¹In particolare, la costante di tempo del processo di rilassamento è legata al massimo autovalore dello spettro di \hat{W} .

In questo caso la probabilità invariante \mathbf{P}_{inv} obbedisce alla condizione:

$$\pi_i W_{ij} = \pi_j W_{ji} \quad (3.3)$$

Sfruttando la condizione di irriducibilità e il principio (3.3), si può costruire la matrice di transizione W_{ij} del processo in modo da generare una distribuzione di probabilità invariante che riproduca la distribuzione di Boltzmann del sistema all'equilibrio:

$$\pi_i = \frac{e^{-\beta H[\mathbf{X}_i]}}{Z}$$

la (3.3) si traduce, in questa circostanza, nella condizione:

$$\frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \frac{\pi_j}{\pi_i} = e^{-\beta(E_j - E_i)}$$

avendo indicato logicamente $E_\mu = H[\mathbf{X}_\mu]$ con $\mu = i, j$.

L'algoritmo proposto da Metropolis nel 1953 per il calcolo di integrali multidimensionali [49], fornisce uno schema generale per la definizione della matrice di transizione \hat{W} nel rispetto del principio di bilancio dettagliato (3.3). Esso consiste nel dividere la probabilità di transizione in una probabilità di campionamento a priori $T(\mathbf{X}_i \rightarrow \mathbf{X}_j)$ e la probabilità $A(\mathbf{X}_i|\mathbf{X}_j)$ di accettare la mossa proposta:

$$W_{ij} = T(\mathbf{X}_i \rightarrow \mathbf{X}_j)A(\mathbf{X}_i|\mathbf{X}_j)$$

L'imposizione del principio del bilancio dettagliato si traduce immediatamente nella condizione:

$$A(\mathbf{X}_i|\mathbf{X}_j) = \rho_{ij}A(\mathbf{X}_j|\mathbf{X}_i) \quad \rho_{ij} = \frac{\pi_i T(\mathbf{X}_j \rightarrow \mathbf{X}_i)}{\pi_j T(\mathbf{X}_i \rightarrow \mathbf{X}_j)} \quad (3.4)$$

Nel §3.6 dimostreremo come la precisione delle medie accumulate per mezzo di una dinamica Monte Carlo dipenda in modo cruciale dal tempo di correlazione del processo. Affinchè si possa avere un algoritmo il più efficiente possibile è necessario che il sistema disponga di un'elevata mobilità nello spazio delle configurazioni. A tale scopo è conveniente fissare i parametri nella (3.4) in modo tale che la più grande fra le probabilità di accettazione $A(\mathbf{X}_i|\mathbf{X}_j)$ e $A(\mathbf{X}_j|\mathbf{X}_i)$ sia pari ad uno. In questo modo la condizione (3.4) si riduce alla nota espressione:

$$A(\mathbf{X}_i|\mathbf{X}_j) = \min \{1, \rho_{ij}\} \quad (3.5)$$

Nella pratica il meccanismo per fare in modo che le mosse vengano accettate con probabilità $A(\mathbf{X}_i|\mathbf{X}_j)$ consiste nel confrontare il rapporto ρ_{ij} con un numero casuale uniformemente distribuito fra 0 e 1 ed accettare la mossa nel caso in quest'ultimo risultati minore di ρ_{ij} , poichè la probabilità che questo avvenga è giust'appunto pari ad $A(\mathbf{X}_i|\mathbf{X}_j)$.

Adottando uno schema di aggiornamenti organizzato in modo tale che la probabilità $T(\mathbf{X}_i \rightarrow \mathbf{X}_j)$ con cui viene proposta la transizione da \mathbf{X}_i a \mathbf{X}_j sia la stessa che

contraddistingue la transizione inversa, il rapporto di accettazione ρ_{ij} è dato semplicemente dal fattore $\pi_j/\pi_i = \exp[-\beta(E_j - E_i)]$. Un aspetto di notevole convenienza dell'algoritmo di Metropolis consiste nella necessità di controllare unicamente le energie delle configurazioni accoppiate dalla transizione, particolare estremamente utile se il numero di stati accessibili in una mossa è molto grande. La fisionomia di una singola mossa $\mathbf{X}_i \rightarrow \mathbf{X}_j$ può essere delineata pensando che l'operazione che richiede più tempo, fra quelle implementate nell'algoritmo, è in generale il calcolo delle energie E_i ed E_j . Per questo motivo risulta conveniente adottare un modello di transizione in virtù del quale la differenza $\Delta E = E_j - E_i$ contenga meno termini possibile, come ad esempio nel caso in cui \mathbf{X}_i e \mathbf{X}_j differiscano per l'orientazione di un unico spin.

L'interpretazione dinamica del modello passa attraverso l'equazione di evoluzione della distribuzione di probabilità, nota con il nome di *master equation*:

$$\frac{d\pi(\mathbf{X}, t)}{dt} = \sum_{\mathbf{X}' \neq \mathbf{X}} [\pi(\mathbf{X}', t)W(\mathbf{X}' \rightarrow \mathbf{X}) - \pi(\mathbf{X}, t)W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}')]$$

Come richiesto dal Teorema 1, con il passare del tempo la distribuzione degli stati converge verso quella canonica corrispondente alla condizione di equilibrio $d\pi_i/dt = 0$. Tale convergenza, tuttavia, non implica che anche gli osservabili misurati tendano con uguale rapidità alla distribuzione limite. È possibile addirittura che il sistema osservato non sia realmente ergodico, nel senso che intere porzioni dello spazio delle fasi risultino irraggiungibili in tempi finiti (su questo argomento torneremo in dettaglio nel §3.3). Una conoscenza, anche solo approssimativa, del tempo di rilassamento τ del sistema è di importanza decisiva affinché le misure raccolte nel corso della simulazione riproducano effettivamente un valore di equilibrio; a questo scopo sarà necessario scartare i dati prodotti durante la fase di termalizzazione, durante la quale la distribuzione di probabilità del processo non ha ancora raggiunto il regime stazionario. Una volta all'equilibrio, in forza dell'ipotesi ergodica, è possibile calcolare le medie nell'ensemble canonico delle grandezze osservate per mezzo delle corrispondenti medie temporali:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int [dC] O_C e^{-\beta H[C]} \simeq \frac{1}{t - t_0} \sum_{t'=t_0}^t O(t') \quad (3.6)$$

Il metodo Monte Carlo sostituisce, dunque, alla dinamica “vera” del sistema, una dinamica deterministica in cui l'evoluzione ulteriore del sistema è univocamente definita dallo stato dinamico presente, una dinamica fittizia *aleatoria*, in cui lo stato presente determina soltanto con quale probabilità il sistema si troverà in un generico stato successivo.

La realizzazione effettiva di questa dinamica richiede che il calcolatore possa produrre con efficienza e rapidità sequenze molto lunghe di numeri aleatori, uniformemente distribuiti ed indipendenti fra loro. Nella pratica comune, così come in questo lavoro di tesi, la genesi dei numeri casuali è affidata ad una classe di algoritmi basati sul meccanismo della *congruenza lineare*, che genera una sequenza di interi $\{I_n\}$, compresi

nell'intervallo fra 0 e $m - 1$ mediante la relazione di ricorrenza:

$$I_{n+1} = aI_n + c \pmod{m}$$

in cui m , a e c sono interi positivi chiamati rispettivamente *modulo*, *moltiplicatore* ed *incremento*. La sequenza si ripeterà al più dopo m iterazioni, scegliendo quindi in modo opportuno m , a e c , il periodo avrà il massimo valore possibile m . In questo caso, tutti gli interi compresi nell'intervallo 0 e $m - 1$ appaiono una ed una sola volta nella sequenza e quindi ogni *seme* I_0 è adatto ad inizializzare il processo. Una volta ricavato il generico I_j , il rapporto I_j/m fornirà un numero compreso nell'intervallo $[0, 1[$ uniformemente distribuito. Una congruenza lineare abbastanza efficiente sfrutta il fatto che in un programma C (linguaggio diventato ormai tradizionale in questo ambito), se un'operazione fra due operandi di tipo `long` causa overflow, vengono conservati solo i bit di ordine più basso. Dunque impostando m uguale al massimo valore memorizzabile dal calcolatore (es. $2^{N_b} - 1$ per una macchina con architettura ad N_b bit), l'operazione di *resto* viene eseguita automaticamente.

Il metodo della congruenza lineare ha il vantaggio di essere molto veloce, perchè richiede solo poche operazioni per ogni chiamata: ragione questa che ne spiega il suo uso quasi universale. Tuttavia esso produce delle correlazioni fra le chiamate successive. Presi k numeri aleatori successivi per rappresentare un punto in uno spazio k -dimensionale, allora i punti tenderanno a disporsi su piani $(k - 1)$ -dimensionali anzichè riempire uniformemente tutto lo spazio. Vi saranno al più $m^{1/k}$ piani o anche meno se la scelta dei parametri non viene operata nel modo adeguato [50].

3.3 Nuovi algoritmi di simulazione

L'affidabilità delle simulazioni numeriche come strumento d'indagine del comportamento vetroso, rappresenta tutt'oggi un problema aperto della fisica statistica. L'esistenza di processi di rilassamento caratterizzati da scale di tempo eccezionalmente lunghe, in particolare, costituisce un argomento di primaria importanza nello studio numerico delle proprietà di un sistema all'*equilibrio*. A differenza di quanto avviene in altre circostanze (gas, liquidi, ferromagneti), in una fase vetrosa la taglia del sistema incide drammaticamente sui tempi di rilassamento, rendendo la riproduzione di stati di equilibrio un obiettivo irrealizzabile entro i tempi di lavoro di un comune calcolatore.

In generale, il fenomeno del "rallentamento critico", costituisce un argomento cruciale nell'ambito delle simulazioni Monte Carlo, anche al di fuori dei sistemi complessi. Si consideri a titolo di esempio un ferromagnete di Ising in una scatola periodica di volume $N = L^D$. Sotto la temperatura critica T_c la distribuzione di probabilità $P(\mathbf{X})$ del sistema all'equilibrio, presenta due massimi estremamente pronunciati in corrispondenza degli stati con magnetizzazione $\pm m$, dove m è la magnetizzazione spontanea del sistema nel limite termodinamico. Il minimo della $P(\mathbf{X})$, contrariamente, individuerà un insieme di configurazioni intermedie in corrispondenza delle quali il sistema è suddiviso in due settori con magnetizzazione opposta separati da un interfaccia $D - 1$

dimensionale. Il rapporto fra i due valori estremali della distribuzione $P(\mathbf{X})$ sarà tale che:

$$P_{\max}/P_{\min} \propto \exp(2\beta f_{\text{int}} N^{\frac{D-1}{D}}) \quad (3.7)$$

in cui f_{int} è la densità di energia libera dell'interfaccia. Per passare dallo stato con magnetizzazione positiva a quello con magnetizzazione negativa per mezzo di una dinamica di Metropolis, il sistema dovrà necessariamente attraversare il set di configurazioni intermedie per il quale $P(\mathbf{X}) = P_{\min}$. Il tempo "ergodico" che il sistema impiega per passare da un'estremità all'altra dello spazio delle fasi può essere stimato pertanto come [51]:

$$\tau_{\text{eg}} \propto P_{\max}/P_{\min} \propto \exp(2\beta f_{\text{int}} N^{\frac{D-1}{D}})$$

laddove lo spettro dei tempi di correlazione che caratterizzano il modello cinetico in prossimità del punto critico è limitato superiormente dalla quantità [52]:

$$\tau_{\max} \propto N^{\frac{z}{D}}$$

con $z \sim 2$ per un modello di Ising bidimensionale. Affinchè una delle due fasi possa essere analizzata con il metodo Monte Carlo, dunque, è necessario che i tempi di misura t e t_0 che figurano nella (3.6) siano scelti in modo tale che:

$$\{t_0 \gg \tau_{\max}\} \wedge \{t - t_0 \ll \tau_{\text{eg}}\}$$

Nel caso dei vetri di spin l'esponente critico z presenta, se confrontato con il modello precedente, uno spettro di valori decisamente proteso verso l'alto; per sistemi di Ising si ha, ad esempio, $z = 4$ (campo medio), $z \simeq 5$ ($D = 4$), $z \simeq 6$ ($D = 3$). In termini dinamici questo scenario implica un processo di evoluzione assimilabile ad una lenta esplorazione del paesaggio energetico, durante la quale il sistema si sposta fra valli di stati metastabili superando di volta in volta le barriere che le separano. Quest'ultima considerazione rappresenta, in sintesi, la ragione del fallimento del Monte Carlo convenzionale nella simulazione di sistemi dotati di uno spazio delle fasi complesso. Campionando configurazioni successive in accordo con il loro peso di Boltzmann, la probabilità che il sistema riesca a scalare una barriera di energia prima di rilassare nuovamente in un valle metastabile, è esponenzialmente bassa:

$$P(E \rightarrow E + \Delta E) \propto \exp(-\beta \Delta E)$$

Nella fase di bassa temperatura, pertanto, il sistema resta intrappolato all'interno di un minimo locale per un periodo esponenzialmente lungo e solo una piccola porzione dello spazio delle fasi viene esplorata di fatto nel corso della dinamica.

Sebbene i vetri di spin non costituiscano l'unica classe di sistemi dove il processo di termalizzazione deve far fronte all'esistenza di scale di tempo esponenzialmente lunghe, in essi la risoluzione del problema del *rallentamento critico* è legata in modo indissolubile alla legittimità stessa dell'uso del Monte Carlo come metodo di simulazione. A differenza dei sistemi dotati di un comportamento vetroso, nell'esempio di Ising le valli

energetiche sono equivalenti a meno di un'operazione di simmetria. Non ha importanza dunque in quale dei due minimi si svolga la dinamica, le quantità misurate differiranno esclusivamente per il segno della magnetizzazione. Al contrario, l'insieme di stati che costituiscono la fase di vetro di spin, sono slegati da qualsiasi relazione di simmetria, di conseguenza le proprietà espresse dal sistema in una singola valle, non rappresentano esaurientemente il comportamento del sistema in generale.

La necessità di superare questa importante difficoltà ha stimolato, negli ultimi anni, un intenso lavoro di implementazione degli algoritmi Monte Carlo [53, 54, 47]. I progressi effettuati in questa direzione hanno portato alla nascita di due principali categorie di algoritmi, ai quali si fa spesso riferimento rispettivamente con il nome di “algoritmi di cluster” e “metodi degli ensemble generalizzati”. Gli algoritmi di Swendsen-Wang [55] e Wolf [56] sono un esempio di procedure del primo tipo. Nati allo scopo di ridurre il tempo di rilassamento nella simulazione di sistemi al punto critico, sono entrambi basati su una dinamica di aggiornamenti non locali, in virtù della quale ogni configurazione della catena di Markov è ricavata dalla precedente tramite l'inversione di un intero cluster di spin allineati. L'assemblamento dei cluster viene realizzato, iterazione dopo iterazione, per mezzo di un processo casuale ispirato al fenomeno dell'accrescimento dei domini nei modelli ferromagnetici. Proprio quest'ultima caratteristica rende gli algoritmi di cluster poco adatti allo studio di sistemi privi di ordine a lungo raggio.

Per sistemi come i vetri di spin, in cui il rallentamento a bassa temperatura è legato direttamente alle proprietà della distribuzione di Boltzmann, l'alternativa consiste nell'effettuare la simulazione in un “ensemble generalizzato” [57, 58, 59, 60], basato su una distribuzione di probabilità più regolare, in modo che il sistema possa esplorare accuratamente lo spazio delle configurazioni che contribuiscono alla misura canonica senza rimanere confinato a lungo in un solo minimo locale. Questo nuovo ensemble, può essere costruito assumendo nel ruolo di variabili dinamiche del processo di Markov, quantità quali la temperatura (*Tempering* ed *Annealing* simulati) o l'energia interna (algoritmo *Multicanonico* [61]). Il metodo del *Parallel Tempering*, di cui si è fatto uso nel presente lavoro di tesi, rientra appunto in questa seconda categoria; ad esso è dedicato il paragrafo successivo.

3.4 Il Parallel Tempering

La tecnica del *Parallel Tempering* (PT) [62], costituisce una versatile ed efficace evoluzione del *Tempering Simulato* (ST) [63] elaborato da Marinari e Parisi nel '92 in alternativa al metodo del *Annealing Simulato* (SA) [64], proposto da S. Kirkpatrick ed altri nel '83 per l'ottimizzazione degli algoritmi di ricerca nei problemi non polinomiali. Quest'ultimo rappresenta storicamente il primo esempio di utilizzo di una “temperatura” come parametro variabile del processo di Markov associato alla dinamica Monte Carlo. Allo scopo di mettere in risalto l'ineguagliabile efficacia del *Tempering* nella risoluzione del problema delle barriere energetiche, può essere utile riportare di seguito una breve descrizione dell'algoritmo SA.

Il termine l'*Annealing* (ricottura) contraddistingue in metallurgia il procedimento con il quale vengono trattati i campioni allo scopo di aumentarne la robustezza, dunque la stabilità a livello microscopico. A tal fine un metallo viene inizialmente riscaldato fino alla fase liquida e di seguito raffreddato lentamente ed indotto alla cristallizzazione. Nella fase liquida le particelle sono in grado di muoversi liberamente così da consentire al sistema una rapida ispezione di tutto lo spazio delle fasi. Man mano che la temperatura diminuisce, il sistema è portato ad esplorare porzioni dello spazio delle fasi sempre più ridotte fino ad assestarsi nello stato di minima energia per $T \rightarrow 0$. In tal modo è possibile compiere un'ampia esplorazione delle possibili configurazioni in tempi rapidi, quando le temperature sono elevate, per poi affinare la ricerca, evitando di rimanere intrappolati nei primi minimi locali incontrati. È come compiere dapprima una sorta di ricognizione per individuare le zone più promettenti per poi concentrare la ricerca soltanto su di esse.

Formalmente il processo di raffreddamento è riprodotto attraverso sequenze di catene di Markov omogenee e di lunghezza finita N_k con $k = 1, 2 \dots N_{(\beta)}$ e $\beta_k < \beta_{k+1}$. Come è stato dimostrato, il procedimento conduce con probabilità unitaria allo stato di minima energia, a condizione che il raffreddamento venga operato con la dovuta lentezza (i.e. $T_k = O(1/\log L_k)$ con $L_k = \sum_{i=1}^k N_i$ [65]), possibilità quest'ultima che va ben oltre le disponibilità di un moderno calcolatore. Impostando protocolli di raffreddamento più veloci, il metodo fornisce risultati attendibili solo a $T = 0$, dove il contributo entropico si annulla e l'operazione di ricerca è limitata alla sola funzione energia.

Il superamento di questi limiti applicativi (che tuttavia non impediscono al SA di rappresentare una tecnica di affermata validità per molti altri problemi di ottimizzazione) rappresenta senza dubbio una delle maggiori qualità degli algoritmi di *Tempering*. A differenza del *Annealing*, nel quale ogni episodio di raffreddamento annulla la condizione di equilibrio acquisita in precedenza, essi sono basati su un meccanismo di scambi di temperatura fra copie all'equilibrio di uno stesso sistema. Anzichè soffermarsi su di un unico sistema a temperatura variabile, il *Parallel Tempering* agisce simultaneamente su più copie dello stesso sistema, aventi tutte la stessa realizzazione del disordine congelato, ognuna ad una temperatura differente. Ogni configurazione è lasciata evolvere indipendentemente dalle altre per mezzo di una tradizionale dinamica di Metropolis, fino a quando, in accordo con il protocollo di aggiornamenti stabilito, essa viene scambiata con la configurazione di un'altra copia a temperatura differente. Questa strategia va sviluppata con alcuni vincoli per garantire un'efficiente termalizzazione verso un autentico stato di equilibrio e per assicurare che, una volta raggiunto l'equilibrio, le configurazioni che cambiano temperatura siano ancora in equilibrio con il nuovo bagno termico. Quest'ultima considerazione rappresenta l'aspetto più importante di questo metodo ed il principale motivo di differenza con l'*Annealing* simulato: dopo una prima fase di assestamento, a qualsiasi temperatura una copia si venga a trovare, essa sarà sempre all'equilibrio rispetto all'usuale distribuzione di Boltzmann.

Si considerino dunque $N_{(\beta)}$ copie non interagenti di uno stesso sistema, aventi tutte la stessa realizzazione del disordine. Sia $\{\beta_m\}$ con $m = 1, 2 \dots N_{(\beta)}$, la lista delle

temperature associate ad ognuna di queste copie e $\{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{X}_1\} \times \dots \times \{\mathbf{X}_{N(\beta)}\}$ lo spazio delle fasi del sistema congiunto. La funzione di partizione, in virtù dell'indipendenza delle copie, sarà data da:

$$Z_{\text{EXT}} = \sum_{\{\mathbf{X}\}} \exp\left(-\sum_{m=1}^{N(\beta)} \beta_m H[\mathbf{X}_m]\right) = \prod_{m=1}^{N(\beta)} Z(\beta_m) \quad (3.8)$$

dove $Z(\beta_m)$ rappresenta la funzione di partizione di ogni singola copia a contatto con il bagno termico β_m . Data una n -upla di temperatura $\{\beta\}$, la probabilità di trovare il sistema nello stato $\{X\}$ sarà data da:

$$P(\mathbf{X}_1, \beta_1; \mathbf{X}_2, \beta_2 \dots \mathbf{X}_{N(\beta)}, \beta_{N(\beta)}) = \prod_{m=1}^{N(\beta)} \pi(\mathbf{X}_m, \beta_m) \quad (3.9)$$

dove, per ogni singola copia, si ha:

$$\pi(\mathbf{X}_m, \beta_m) = \frac{e^{-\beta_m H[\mathbf{X}_m]}}{Z(\beta_m)} \quad (3.10)$$

Il campionamento dello spazio delle configurazioni del sistema congiunto può essere effettuato organizzando nell'ensemble (3.8) un doppio processo di Markov in accordo con la distribuzione di probabilità (3.9). A tale scopo si possono considerare le seguenti tipologie di mosse MC.

(1) Aggiornamento delle configurazioni a temperatura fissa.

$$(\mathbf{X}_m, \beta_m) \rightarrow (\mathbf{X}'_m, \beta_m)$$

(2) Scambio di temperatura fra configurazioni differenti.

$$(\mathbf{X}_m, \beta_m | \mathbf{X}_n, \beta_n) \rightarrow (\mathbf{X}_n, \beta_m | \mathbf{X}_m, \beta_n)$$

Ora, affinché il vettore di stato $\{\mathbf{X}\}$ converga effettivamente ad un insieme di configurazioni d'equilibrio, è indispensabile che, una volta effettuata una sostituzione di tipo (2), le configurazioni scambiate risultino ancora in equilibrio con il bagno termico ad esse accoppiato, secondo la distribuzione canonica (3.10). A tal fine basta imporre che la matrice di transizione $W(\mathbf{X}_m, \beta_m | \mathbf{X}_n, \beta_n)$, corrispondente alla probabilità di avere uno scambio di configurazioni fra l' m -esima e l' n -esima copia, soddisfi la relazione di bilancio dettagliato:

$$\begin{aligned} P(\mathbf{X}_1, \beta_1 \dots; \mathbf{X}_m, \beta_m; \mathbf{X}_n, \beta_n \dots \mathbf{X}_{N(\beta)}, \beta_{N(\beta)}) W(\mathbf{X}_m, \beta_m | \mathbf{X}_n, \beta_n) = \\ = P(\mathbf{X}_1, \beta_1 \dots; \mathbf{X}_n, \beta_m; \mathbf{X}_m, \beta_n \dots \mathbf{X}_{N(\beta)}, \beta_{N(\beta)}) W(\mathbf{X}_n, \beta_m | \mathbf{X}_m, \beta_n) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Quest'ultima garantisce l'approccio ad una misura invariante nell'ensemble (3.8), dunque una condizione di equilibrio per gli $N_{(\beta)}$ sotto-sistemi che esso rappresenta. Semplificando primo e secondo membro della (3.11), si ricava in definitiva:

$$\frac{W(\mathbf{X}_m, \beta_m | \mathbf{X}_n, \beta_n)}{W(\mathbf{X}_n, \beta_n | \mathbf{X}_m, \beta_m)} = \frac{\pi(\mathbf{X}_m, \beta_m) \pi(\mathbf{X}_n, \beta_n)}{\pi(\mathbf{X}_n, \beta_n) \pi(\mathbf{X}_m, \beta_m)} = e^{-\Delta S} \quad (3.12)$$

avendo indicato:

$$\Delta S = (\beta_n - \beta_m)(H[\mathbf{X}_m] - H[\mathbf{X}_n])$$

Adottando l'algoritmo di Metropolis anche per la dinamica nello spazio delle temperature, la condizione (3.12), si traduce nell'imposizione:

$$A(\mathbf{X}_m, \beta_m | \mathbf{X}_n, \beta_n) = \min \{1, e^{-\Delta S}\} \quad (3.13)$$

avendo indicato con $A(\mathbf{X}_m, \beta_m | \mathbf{X}_n, \beta_n)$ la probabilità di accettazione dello scambio. Ricapitolando, la dinamica nell'ensemble esteso (3.8) è costituita da due processi simultanei. Ogni copia è simulata contemporaneamente ed indipendentemente in un ensemble canonico per mezzo di un algoritmo di Metropolis convenzionale. Una volta realizzato un aggiornamento completo di tutti i reticoli (*sweep*), si comincia a scorrere l'elenco delle temperature in ordine crescente, proponendo, di volta in volta, uno scambio di configurazioni fra le copie consecutive i.e. \mathbf{X}_m e \mathbf{X}_{m+1} . Ogni scambio proposto è accettato con probabilità $A(\mathbf{X}_m, \beta_m | \mathbf{X}_{m+1}, \beta_{m+1})$.

La ragione per cui l'operazione di scambio è ristretta esclusivamente al caso $n = m + 1$, risiede nel fatto che la probabilità di accettazione della mossa decade esponenzialmente con la differenza $\beta_m - \beta_n$. Il valore di aspettazione canonico di una generica grandezza osservabile O può essere misurato come d'abitudine:

$$\langle O \rangle_{\beta_m} = \frac{1}{t - t_0} \sum_{t'=t_0}^t O[\mathbf{X}_m(t')]$$

Logicamente lo scambio di configurazioni fra temperature consecutive non richiede un'effettiva sostituzione di tutti gli spin. Per un reticolo sufficientemente grande una simile operazione servirebbe unicamente a compromettere parte della rapidità guadagnata con la scelta di questo algoritmo. Etichettando ogni temperatura ed ogni configurazione con un indice appropriato, sarà sufficiente scambiare le etichette delle temperature coinvolte. Il diagramma in Figura 3.1 schematizza il funzionamento di una tipica routine PT.

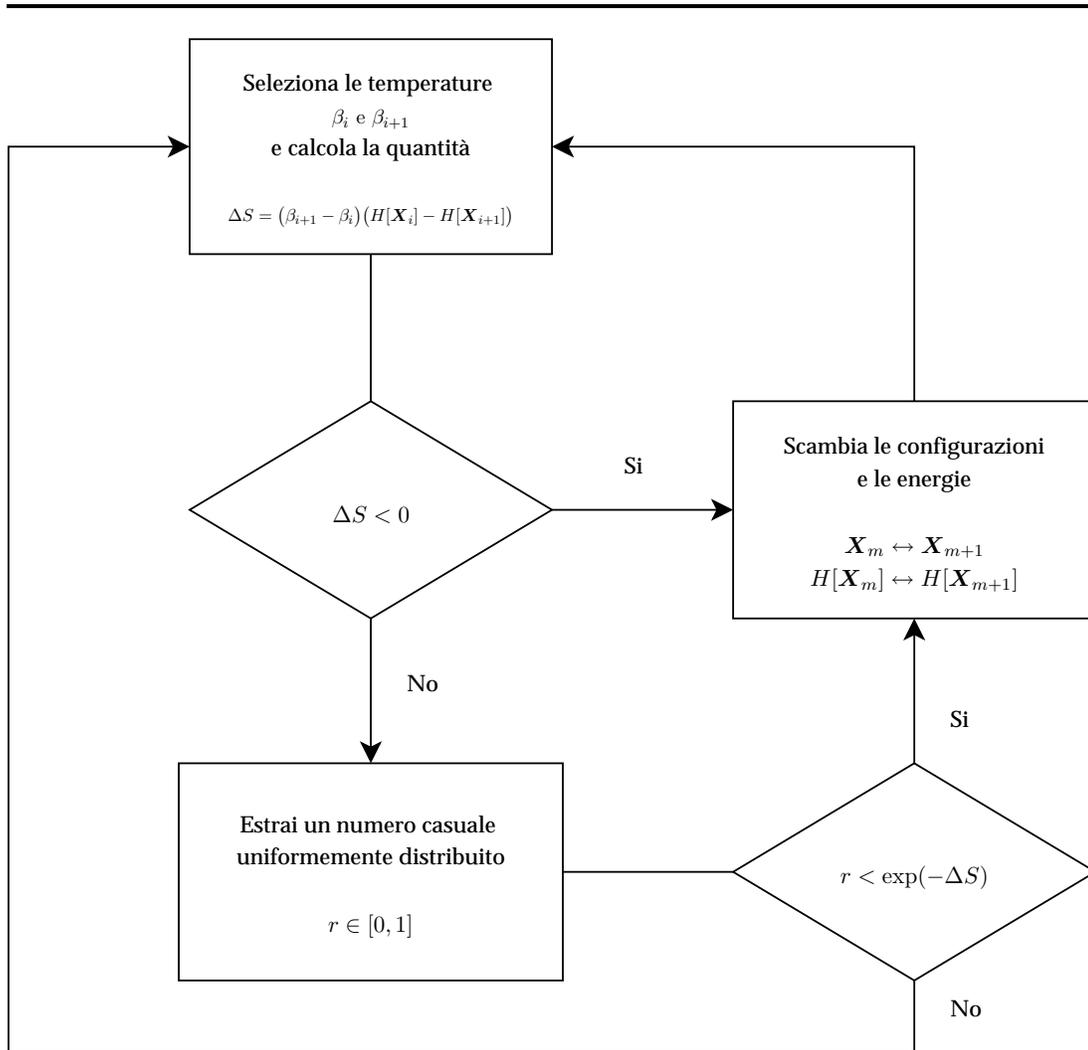


Figura 3.1: Diagramma di flusso di una tipica procedura *Parallel Tempering* con algoritmo di Metropolis.

Quanto detto finora dovrebbe essere sufficiente a motivare l'efficacia degli algoritmi di *Tempering* nella risoluzione del problema delle barriere energetiche. Si supponga di impostare i parametri della simulazione così che la lista delle temperature risulti distribuita, in modo non eccessivamente asimmetrico, attorno al punto critico T_c . Le copie simulate nell'intervallo $T > T_c$ non presentano, evidentemente, nessun segno di rottura di ergodicità, dunque sono in grado di esplorare liberamente lo spazio delle fasi nel modo previsto dalla distribuzione canonica. Nella fase rotta, al contrario, le copie tenderanno a stabilizzarsi all'interno di valli tanto più profonde quanto minore è la temperatura del bagno termico ad esse associato. Ogni qual volta viene effettuata

un'operazione di scambio, la copia inizialmente a temperatura più bassa si troverà proiettata nel mezzo di un paesaggio energetico molto meno "scosceso" del precedente, se non addirittura "pianeggiante" nel caso in cui la transizione l'abbia condotta dalla fase rotta a quella ergodica. Attraversando in questo modo lo spazio delle configurazioni ogni sistema è grado di emergere senza difficoltà da qualsiasi minimo locale esso si trovi a visitare durante la dinamica di Metropolis, così da poter campionare accuratamente i micro-stati dell'ensemble canonico anche nella fase di bassa temperatura. Il principio del bilancio dettagliato (3.11) assicura infine che ogni copia del sistema risulti sempre all'equilibrio con la temperatura a cui essa è accoppiata dinamicamente.

Se una conoscenza (anche solo indicativa) della temperatura critica costituisce come detto il principale motivo d'ispirazione per la scelta degli estremi della successione $\{\beta_m\}_{m=1}^{N^{(\beta)}}$, la scelta degli incrementi $\delta = \beta_{m+1} - T_m$ richiede una riflessione leggermente più approfondita. Seguendo [62] possiamo imporre che la probabilità di accettazione di uno scambio di temperature sia costante e di ordine uno. Dalla (3.13) si ottiene allora:

$$O(1) = -\log A(\mathbf{X}_m, \beta_m | \mathbf{X}_{m+1}, \beta_{m+1}) = \delta(H[\mathbf{X}_m] - H[\mathbf{X}_{m+1}]) \sim \delta^2 \frac{dE}{d\beta}$$

avendo approssimato il valore locale dell'energia $H[\mathbf{X}]$ con la sua media termica E . Considerando che $E \propto N$, affinché entrambi i membri abbiano lo stesso ordine di grandezza è necessario che:

$$\delta \sim 1/\sqrt{N} \quad (3.14)$$

In presenza di una transizione di fase di seconda specie, la (3.14) dovrà essere modificata in modo da controllare la divergenza del calore specifico:

$$\frac{dE}{d\beta} \propto C_V \sim |T - T_c|^{-\alpha}$$

Ricorrendo alla legge di scala $C_V \sim N^{\frac{\alpha}{D\nu}}$ si ricava:

$$\delta \sim 1/\sqrt{N^{1+\frac{\alpha}{D\nu}}} \quad (3.15)$$

Nella pratica, tuttavia, stime di questo tipo forniscono solo indicazioni sommarie sull'ordine di grandezza dell'intervallo. Una strada più ortodossa, sebbene un po' più dispendiosa, consiste nell'osservare direttamente l'andamento sperimentale dell'accettanza, per un determinato insieme di temperature, e ritoccare successivamente il valore di δ in modo da garantire delle condizioni di lavoro ottimali. Le curve in Figura 3.2 raffigurano l'andamento sperimentale della distribuzione di probabilità $P(E)$ per tre diverse temperature. Affinchè una certa configurazione possa costituire uno stato di equilibrio comune per gli ensemble a temperatura β_m e $\beta_m + \delta$ è necessario, evidentemente, che il valore dell'energia ad essa associata sia compreso nella regione individuata dall'intersezione delle curve $P_{\beta_m}(E)$ e $P_{\beta_m+\delta}(E)$. Un criterio di sicura validità per la scelta degli incrementi δ , consiste dunque nell'effettuare una simulazione preventiva con un insieme di temperature arbitrario, e ritoccare di seguito i valori scelti in modo che su

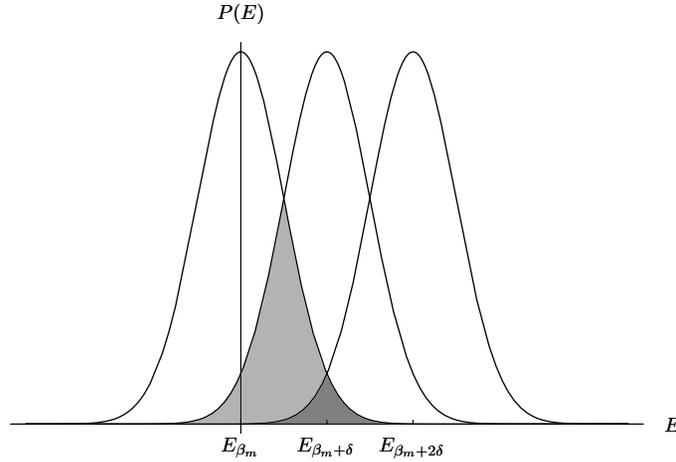


Figura 3.2: Distribuzione di probabilità dell'energia per tre sistemi in equilibrio con le temperature β_m , $\beta_m + \delta$ e $\beta_m + 2\delta$. L'area definita dalla sovrapposizione delle curve (in grigio) rappresenta l'insieme delle configurazioni d'equilibrio comuni a diversi livelli di temperatura.

tutto l'intervallo in esame si abbia una sovrapposizione apprezzabile fra le distribuzioni consecutive. Come si intuisce dalla Figura 3.2, minore è la differenza fra una coppia di temperature consecutive β_m e β_{m+1} , maggiore sarà la percentuale di configurazioni di equilibrio comuni.

La scelta di una sequenza di temperature troppo fitta, tuttavia, impedirebbe alle copie di visitare tutti gli stati termici a disposizione, ostacolando in tal modo quell'altalenarsi del sistema fra la fase calda a quella fredda che costituisce la chiave di volta dell'algoritmo e la principale ragione della sua efficacia. Può accadere infatti che due o tre stati di temperatura consecutivi, per i quali si abbia una consistente sovrapposizione energetica, comincino a scambiare configurazioni solamente fra di loro, impedendo a queste di visitare stati diversi. In una situazione del genere tutti i vantaggi associati al fatto di aver allargato l'ensemble canonico assumendo la temperatura fra le variabili dinamiche, viene drammaticamente a mancare. Il sistema non è più intrappolato sul fondo di un'unica valle, ma ugualmente confinato in una rete di minimi locali, senza la possibilità di ispezionare accuratamente l'intero spazio delle fasi. Onde evitare il verificarsi di una simile evenienza è indispensabile controllare, oltre al rapporto di accettazione degli scambi anche il tempo di permanenza di ogni campione in ogni singolo stato di temperatura. Nel §4.3 vedremo in dettaglio come questi criteri siano stati presi in considerazione nell'ambito dello studio numerico del modello p -spin con $p = 3$ interazioni.

Per concludere vogliamo citare alcuni esempi in cui l'impiego del *Parallel Tempering* non produce la situazione di lavoro ottimale finora descritta. Come è facile intuire, soffermandosi sulla descrizione dell'algoritmo esposta in precedenza, il carattere del *Tempering* prevede una certa continuità tra le configurazioni relative agli stati termici adiacenti, esso è quindi inadeguato a simulare transizioni strutturali quali quelle

del primo ordine. Analogamente il metodo si rivela inefficiente nel caso degli eteropolimeri con interazioni casuali, a causa del fatto che la transizione vetrosa è, in questa circostanza, di natura discontinua [66]. In presenza di barriere entropiche, inoltre, gli algoritmi di *Tempering* risultano inefficienti quanto l'ordinario *Annealing* simulato: queste sono infatti indifferenti alle condizioni di temperatura e il tempo necessario per valicarle dipende tipicamente dal rapporto dei volumi dello spazio delle fasi nello stato di massima e minima energia [67].

3.5 Il *Multispin Coding*

Se il *Parallel Tempering* rappresenta una valida contromisura algoritmica al problema delle barriere energetiche, la codifica multispin (più comunemente *Multispin Coding*) fornisce, sul piano della tecnica di programmazione, un efficace espediente per la riduzione dei tempi di calcolo dell'elaboratore basato sull'uso di alcune funzioni a basso livello per la manipolazione dei bit.

L'idea cardinale alla base *Multispin Coding* è quella di memorizzare più variabili, come gli spin in un sistema magnetico, nei singoli bit di un'unica *parola*. Il termine *parola* indica in questa circostanza il numero di bit di memoria che la CPU del calcolatore è in grado di processare contemporaneamente (tipicamente 32 o 64). Avvalendosi di questa tecnica, si può fare in modo che gli algoritmi Monte Carlo operino su un'intera *parola* di spin contemporaneamente, piuttosto che su di un singolo spin alla volta, riunendo in un unico passo un calcolo che altrimenti avrebbe dovuto essere svolto in modo sequenziale, con una notevole riduzione dei tempi di lavoro del processore.

Molte sono le modalità con cui è possibile mettere in pratica questo genere di idee. Fra i più comuni ricordiamo gli algoritmi ad aggiornamento *sincrono*, nei quali i bit rappresentano gli spin di uno stesso sistema e gli algoritmi di aggiornamento *asincrono*, nei quali i bit di una stessa *parola* rappresentano gli spin di reticoli distinti, così che ogni passo del Monte Carlo vada ad aggiornare simultaneamente sistemi diversi. Questa seconda categoria di algoritmi si presta, evidentemente, ad implementare semplici procedure di calcolo parallelo.

Supponiamo, a titolo di esempio, di lavorare con un reticolo di V spin di Ising $S_i = \pm 1$, su di una macchina con architettura a N_b bit. Per fare in modo che ogni variabile di spin possa essere memorizzata all'interno di un unico bit si potrà, per cominciare, effettuare un cambiamento di coordinate della forma:

$$S_i = 1 - 2\eta_i \quad \eta_i = 0, 1 \quad (3.16)$$

Le nuove variabili η_i possono ora essere allocate in un vettore unidimensionale $\widehat{\mathbf{X}}$

costituito da $N_w = V/N_b$ parole di N_b bit:

$$\widehat{\mathbf{X}} \equiv \left[\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \eta_{N_b-1} & \cdots & \eta_1 & \eta_0 \\ \hline \eta_{2N_b-1} & \cdots & \eta_{N_b+1} & \eta_{N_b} \\ \hline \cdots & & & \\ \hline \eta_{V-1} & \cdots & \eta_{V-N_b} & \eta_{V-N_b-1} \\ \hline \end{array} \right] \quad (3.17)$$

La posizione reticolare e l'indirizzo di memoria di ogni variabile η_i , sono legati dalle relazioni:

$$w = \left\lfloor \frac{i}{N_b} \right\rfloor \quad b = i \pmod{N_b}$$

avendo indicato con gli indici w e b gli indirizzi di memoria della *parola* e del bit all'interno del quale il valore di η_i è memorizzato. In questo modo, una generica successione di prodotti della forma $J_i S_i$ con $i = 1, 2 \dots V$, tradizionalmente destinata ad una procedura di tipo sequenziale, può essere valutata in un ciclo di sole N_w iterazioni, per mezzo dell'operatore logico XOR (\oplus), con una riduzione del tempo di calcolo di un fattore $1/N_b$:

$$\sum_{i=1}^V J_i S_i = 1 - 2 \sum_{w=1}^{N_w} \left[\widehat{J}_w \oplus \widehat{X}_w \right]_{\text{MSC}} \quad (3.18)$$

L'operatore $[\cdot]_{\text{MSC}}$ restituisce il numero di bit unitari della *parola* $\widehat{J}_w \oplus \widehat{X}_w$ e può essere definito implementando una procedura di traslazione e conteggio dei bit dalla quale risulti:

$$\begin{aligned} [1]_{\text{MSC}} &= \left[\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array} \right]_{\text{MSC}} = 1 \\ [2]_{\text{MSC}} &= \left[\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array} \right]_{\text{MSC}} = 1 \\ [3]_{\text{MSC}} &= \left[\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 0 & 0 & 1 & 1 \\ \hline \end{array} \right]_{\text{MSC}} = 2 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.19)$$

Una volta definita la (3.19) in forma tabellare non vi sarà più necessità di ripetere l'operazione ed il calcolo della sommatoria (3.18) si ridurrà ad un semplice passaggio del valore di $\widehat{J}_w \oplus \widehat{X}_w$ alla tabella.

Gli aggiornamenti locali del reticolo previsti dall'algoritmo di Metropolis, costituiti nella fattispecie dall'inversione di un singolo spin alla volta, possono essere realizzati analogamente attraverso un uso combinato degli operatori AND (\wedge), OR (\vee), NOT (\sim) e dell'operatore (\ll) di traslazione dei bit verso le posizioni più significative. Si

supponga, ad esempio, di voler capovolgere lo spin b -esimo, in accordo con le regole di selezione previste dall'algoritmo. Chiamando \widehat{X}_w e \widehat{X}'_w le parole del vettore reticolare \widehat{X} in cui è memorizzato lo spin b -esimo rispettivamente prima e dopo l'inversione, si ha che:

$$\widehat{X}'_w \{ \eta_b \rightarrow \sim \eta_b \} = [X_w \wedge C_b] \vee [\sim \eta_b \ll b] \tag{3.20}$$

avendo indicato con C_b l'elemento del vettore C definito dalla regola di composizione:

$$C_b = \sim (1 \ll b) \quad C = \begin{bmatrix} \boxed{1 \ \dots \ 1 \ 0} \\ \boxed{1 \ \dots \ 0 \ 1} \\ \vdots \\ \boxed{0 \ \dots \ 1 \ 1} \end{bmatrix}$$

La (3.20) risulta evidente se scritta esplicitamente nella forma:

$$\begin{array}{cccccc} \boxed{\eta_{N_b-1}} & \boxed{\eta_{N_b-2}} & \cdots & \boxed{\eta_b} & \cdots & \boxed{\eta_0} & \wedge \\ \boxed{1} & \boxed{1} & \cdots & \boxed{0} & \cdots & \boxed{1} & = \\ \hline \boxed{\eta_{N_b-1}} & \boxed{\eta_{N_b-2}} & \cdots & \boxed{0} & \cdots & \boxed{\eta_0} & \vee \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \cdots & \boxed{\sim \eta_b} & \cdots & \boxed{0} & = \\ \hline \boxed{\eta_{N_b-1}} & \boxed{\eta_{N_b-2}} & \cdots & \boxed{\sim \eta_b} & \cdots & \boxed{\eta_0} & \end{array}$$

Nel §4.2 vedremo come il *Multispin Coding* è stato adoperato nel presente lavoro di tesi per implementare l'algoritmo di Metropolis nel caso specifico del modello p -spin con $p = 3$.

3.6 Errori, correlazione e ricampionamento

In generale tutti gli algoritmi Monte Carlo sono accomunati dalla proprietà che l'errore statistico ε è legato all'investimento delle risorse computazionali dalla relazione $\varepsilon \sim n^{-1/2}$, in cui n rappresenta il numero di misure *indipendenti* della quantità osservata. L'elaborazione di algoritmi sempre più efficienti ha contribuito a migliorare tale relazione di rendimento di prefattori dell'ordine di 10^6 o più, ma la dipendenza inversa da $n^{1/2}$, legata al carattere stocastico del metodo, resta comunque inevitabile. In questo il Monte Carlo differisce in modo sostanziale da altre tecniche numeriche per le quali l'errore decade con andamento n^{-4} , e^{-n} o anche e^{-2^n} . Tuttavia, quando l'oggetto in esame si arricchisce di dettagli e gradi di libertà tali da rendere inefficace la

maggior parte di queste tecniche, il Monte Carlo conserva inalterate le sue prerogative originali, costituendo in tal modo uno strumento di calcolo realmente insostituibile. Un esempio in questa direzione può essere fornito dal confronto fra l'integrazione Monte Carlo e quella basata sulla formula adattiva di Simpson, in cui l'errore è legato al numero di suddivisioni dalla relazione $n^{-4/d}$: in questo caso il Monte Carlo risulta di gran lunga più efficiente non appena $d > 8$. Nel paragrafo che segue cercheremo di motivare gli argomenti qualitativi qui menzionati con qualche dettaglio formale, con particolare riferimento alle tecniche di valutazione degli errori utilizzate nell'analisi dei dati presentati nel capitolo successivo.

Siano $x_1, x_2 \dots x_n$, i risultati di n misure consecutive di una quantità x effettuate per mezzo di una simulazione Monte Carlo in condizioni di equilibrio termico. Indicheremo con $\langle \cdot \rangle$ il valore di aspettazione associato alla distribuzione di probabilità esatta $p(x)$ della variabile aleatoria x , e con $\bar{\cdot}$ la media aritmetica sull'insieme dei valori osservati $x_1, x_2 \dots x_n$:

$$\langle x \rangle = \int dx x p(x) \quad \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_i x_i$$

In generale la stima \bar{x} effettuata sulla base dei dati numerici può essere completata da una varianza della forma:

$$\sigma(\bar{x}) = \langle [\bar{x} - \langle \bar{x} \rangle]^2 \rangle = \langle \bar{x}^2 \rangle - \langle \bar{x} \rangle^2 \quad (3.21)$$

Se i dati x_i fossero scorrelati la relazione coinciderebbe semplicemente con:

$$\sigma(\bar{x}) = \sigma^2(x_i)/n$$

dove $\sigma^2(x_i) = \langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2$ è la varianza di una singola misura rispetto alla distribuzione esatta $p(x)$. Evidentemente l'utilizzo di un Monte Carlo dinamico, basato su un algoritmo di Metropolis con aggiornamenti locali del reticolo, non può produrre misure completamente scorrelate, di conseguenza si avrà un incremento sistematico dell'errore sulla media \bar{x} . Sotto ipotesi più generiche dalla (3.21) si ricava:

$$\sigma^2(\bar{x}) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n [\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2] - \frac{2}{n^2} \sum_{i < j}^{1,n} [\langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle]$$

in cui il primo termine coincide con il rapporto $\sigma^2(x_i)/n$ relativo alla singola osservazione x_i , mentre il secondo può essere riscritto tenendo conto del fatto che:

$$\begin{aligned} \sum_{i < j}^{1,n} \langle x_i x_j \rangle &= 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \langle x_i x_j \rangle = 2(n-1) \sum_{i=1}^{n-1} \langle x_i x_{i+1} \rangle + \\ &+ 2(n-2) \sum_{i=1}^{n-2} \langle x_i x_{i+2} \rangle \dots + 2 \langle x_{n-1} x_n \rangle = 2 \sum_{t=1}^{n-1} (n-t) x_1 x_{1+t} \end{aligned}$$

avendo considerato che, per invarianza traslazionale sull'asse dei tempi, si ha:

$$\langle x_i x_{i+t} \rangle = \langle x_{i-1} x_{i-1+t} \rangle \cdots = \langle x_1 x_{1+t} \rangle$$

Lo stesso si ha chiaramente per il secondo termine $\langle x_i \rangle \langle x_j \rangle$, da cui in definitiva si ottiene:

$$\sigma^2(\bar{x}) = \sigma^2(x_i) \frac{2\tau_x}{n}$$

avendo posto:

$$\tau_x = \frac{1}{2} + \sum_t \left(1 - \frac{t}{n}\right) c(t) \quad c(t) = \frac{\langle [x_1 - \langle x \rangle][x_{1+t} - \langle x \rangle] \rangle}{\sigma^2(x_i)}$$

Le quantità $c(t)$ e τ_x sono rispettivamente la funzione di correlazione normalizzata ed il *tempo di correlazione integrato*; quest'ultimo esprime il numero medio di iterazioni Monte Carlo che devono intercorrere fra due misure della stessa osservabile x affinché queste risultino effettivamente indipendenti. Esso dipende in modo cruciale dalla tipologia degli aggiornamenti con cui è implementato l'algoritmo di Metropolis e vale 1/2 nel caso in cui due configurazioni consecutive x_t e x_{t+1} nella dinamica siano già completamente scorrelate. Per tempi $t \gg 1$ tutte le funzioni $c(t)$ presentano un tipico rilassamento esponenziale:

$$c(t) \sim e^{-\frac{t}{\tau_c}} \quad t \gg 1$$

È abitudine comune considerare le due grandezze τ_x e τ_c dello stessa grandezza, ed in linea di principio è vero per un certa classe di osservabili x , ma non in generale. Infatti ci si aspetta che la funzione di correlazione $c(t)$ obbedisca ad una legge di scala della forma:

$$c(t) \sim |t|^{-a} f\left([\beta - \beta_c]|t|^b\right) \quad a, b > 0$$

valida nel limite in cui $(\beta - \beta_c) \rightarrow 0$ e $|t| \rightarrow \infty$ con $\xi = (\beta - \beta_c)|t|^b = \text{cost}$. Ipotizzando dunque che f sia una funzione continua, sempre positiva e rapidamente decrescente per $|\xi| \rightarrow \infty$, non è difficile dimostrare che [48]:

$$\tau_c \sim |\beta - \beta_c|^{-\frac{1}{b}} \quad \tau_x \sim |\beta - \beta_c|^{-\frac{1-a}{b}} \quad c(t)|_{\beta=\beta_c} \sim |t|^{-a} \quad (3.22)$$

In generale si ha quindi che $\tau_x \leq \tau_c$ dove il segno di uguaglianza vale unicamente nel caso in cui la funzione di correlazione $c(t)$ sia puramente esponenziale ($a = 0$). Queste ultime considerazioni rispecchiano, nel dominio dei tempi, una nota relazione spaziale: sostituendo a τ_c la lunghezza di correlazione e a τ_x la suscettività, le (3.22) sono equivalenti alla legge di scala $\gamma = (2 - \eta)\nu$, in cui $\gamma \neq \nu$ nel caso generale. Quest'ultima riflessione dovrebbe chiarire in modo inequivocabile la differenza fra la scala di tempo τ_c ed il tempo di correlazione integrato τ_x : il primo esprime il più lento modo di rilassamento del sistema, indicando così il numero di iterazioni n_d da scartare all'inizio della simulazione prima che il sistema abbia raggiunto l'equilibrio (di solito $n_d \sim 20\tau_c$ è una scelta adeguata); il secondo determina l'ordine di grandezza dell'errore

che si ottiene sulla stima dell'osservabile x una volta raggiunto l'equilibrio. Resta il fatto che la presenza di una correlazione fra i dati enfatizza l'errore di una quantità $\sqrt{2\tau_x}$ così come se il numero di misure *effettivamente* effettuate di x fosse in realtà $n_{eff} = n/2\tau_x < n$.

La simulazione del modello p -spin descritta nel capitolo seguente, prevede la stima di osservabili mediate su diverse realizzazioni del disordine. I dati relativi al campionamento del disordine, tuttavia, non presentano la correlazione tipica delle variabili generate durante la dinamica di Metropolis, pertanto il calcolo degli errori introdotti dalle fluttuazioni da campione a campione può essere trattato con la normale procedura di stima della deviazione standard.

$$\sigma^2(\bar{O}) = \frac{1}{N_J(N_J - 1)} \sum_{i=1}^{N_J} [O_i - \bar{O}]^2$$

Nello specifico la generazione numerica di ogni campione prevede la scelta di diverse costanti di accoppiamento che rimangono *congelate* durante tutto il corso della simulazione. Allo scopo di assicurare l'effettiva indipendenza di tali variabili sarà sufficiente inizializzare la sequenza dei numeri casuali associata alla simulazione dei singoli campioni con una successione di *semi* a loro volta scorrelati e ben distribuiti in un intervallo. Simulando un singolo campione per volta questo intento può essere realizzato utilizzando l'ultimo numero casuale prodotto nel corso della simulazione di un determinato campione come seme per il campione successivo. Se si simulano più campioni in parallelo (come è stato fatto per questo lavoro), bisognerà accertarsi che l'insieme dei semi passati al blocco dei campioni paralleli risponda agli stessi requisiti di uniformità e decorrelazione (vedi Figura 3.3).

Prima di concludere vogliamo soffermarci sul caso in cui le grandezze ricercate siano frutto della misura indiretta di quantità non osservabili. Tutte le misure che si ottengono per mezzo di una rielaborazione dei dati mediati (alle volte per mezzo di fit non lineari o interpolazioni numeriche) implicano generalmente l'uso di stimatori non imparziali (o *biased*). È di fondamentale importanza, dunque, che la stima di tali quantità e dell'errore ad esse associato sia pianificata allo scopo di preservare intatta l'accuratezza delle misure effettuate nel corso della simulazione. A questo fine sono stati elaborati [68, 69, 46] alcuni metodi basati sul ricampionamento dei dati numerici (*bootstrap*, *jackknife*) per mezzo dei quali è possibile valutare gli errori sulle misure indirette in modo statisticamente soddisfacente. Di seguito daremo una breve descrizione del problema, al termine della quale verrà introdotto il metodo *jackknife* di cui si è fatto uso nel presente lavoro di tesi.

Si supponga di avere complessivamente n misure della quantità x ed una funzione f , per semplicità a valori reali, e di voler stimare il valore della funzione f in corrispondenza del valore aspettato $\langle x \rangle$ e la relativa deviazione standard. Un metodo semplice, ma assolutamente deprecato, consiste nel calcolare la media:

$$\bar{f} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f[x_i]$$

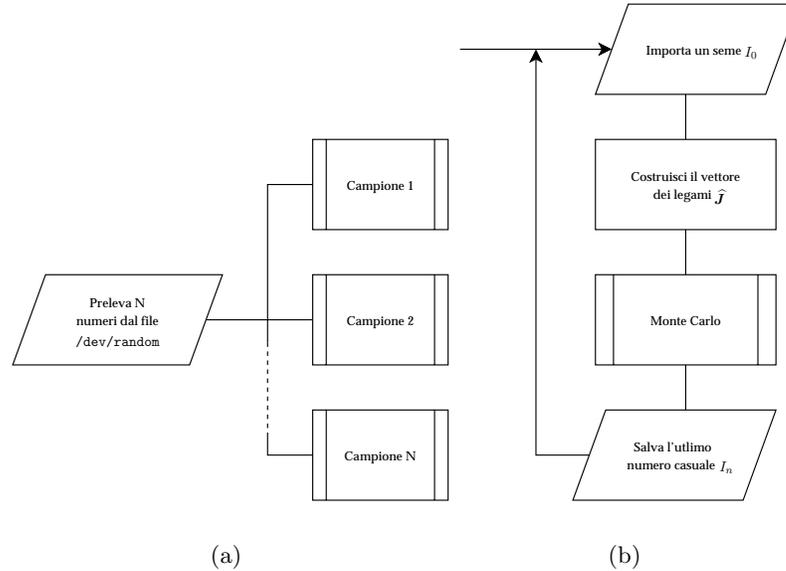


Figura 3.3: Implementazione parallela (a) della procedura di costruzione del vettore dei legami $\hat{\mathcal{J}}$ (b). I numeri casuali passati come semi alle applicazioni di simulazione dei campioni possono essere ricavati trasformando i primi 4 byte del file di dispositivo `/dev/random` di un comune kernel Linux in un numero intero a 10 cifre.

Quest'ultima rappresenta evidentemente una misura poco accurata della quantità ricercata, in quanto la media $\overline{f[x]}$, costituisce in questo caso uno stimatore altamente affetto da *bias*:

$$\langle f[x] \rangle \neq f[\langle x \rangle]$$

Trascurando i momenti superiori al secondo, la differenza può essere espressa nella forma:

$$\langle f[x] \rangle - f[\langle x \rangle] \simeq \frac{1}{2} f''[\langle x \rangle] \sigma^2$$

dello stesso ordine di grandezza della misura tranne nel caso in cui f sia una funzione lineare della variabile x . Una stima più imparziale (anche se non del tutto) della quantità $f[\langle x \rangle]$ è data chiaramente da $f[\bar{x}]$. L'errore sistematico che si commette è in questo caso:

$$f[\langle x \rangle] - f[\bar{x}] \simeq \frac{1}{2n} f''[\langle x \rangle]$$

con un *bias* dell'ordine di $1/n$. Se l'errore statistico nella valutazione di $f[\bar{x}]$ è dell'ordine di $1/\sqrt{n}$, il *bias* è praticamente trascurabile. Per il calcolo dell'errore sulla $f[\bar{x}]$ si può quindi utilizzare il metodo *jackknife* introducendo la quantità:

$$y_j = \frac{1}{n-1} \sum_{i \neq j} x_i$$

ottenuta escludendo dalla media della quantità x il j -esimo valore misurato. Le nuove variabili y_j saranno in generale altamente correlate, tuttavia esse possono essere utilizzate per calcolare n valori di $f_j = f[y_j]$, dai quali è possibile calcolare:

$$\delta^2 f[\bar{x}] = \frac{n}{n-1} \sum_{j=1}^n (f[y_j] - f[\bar{x}])^2 \quad (3.23)$$

e dimostrare che nel limite di N grande, $\delta^2 f[\bar{x}] \rightarrow \sigma^2(f[\bar{x}])$. È possibile generare una sequenza di approssimazioni sempre migliori di $\sigma^2(f[\bar{x}])$ escludendo dalla definizione delle y_j non un solo dato alla volta, ma un intero blocco di m dati:

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{1}{n-m} \sum_{i=m+1}^n x_i \\ &\vdots \\ y_j &= \frac{1}{n-m} \sum_{i=1}^{(j-1)m} x_i + \frac{1}{n-m} \sum_{i=jm+1}^n x_i \\ &\vdots \\ y_{n/m} &= \frac{1}{n-m} \sum_{i=n-m+1}^n x_i \end{aligned}$$

con $m = 1, 2, 4, 8, \dots, n/2$. Chiaramente, il numero di valori x_i condivisi fra le variabili y_j diminuisce all'aumentare di m fino ad annullarsi per $m = n/2$.

Capitolo 4

Simulazioni numeriche del modello 3-spin

4.1 Introduzione

La parte originale di questo lavoro di tesi è stata dedicata allo studio delle scale di tempo di correlazione in un modello di campo medio con interazione a tre spin. Il primo tentativo di uno studio numerico delle scale di tempo nei modelli di vetro spin risale al 1982, anno in cui Mackenzie e Young individuarono la necessità di investigare il fenomeno di rottura dell'ergodicità nella fase di bassa temperatura dei modelli a portata infinita attraverso uno studio della dinamica all'equilibrio del modello di Sherrington-Kirkpatrick. In questo lavoro pionieristico [70, 71] gli autori diedero un'evidenza numerica, per sistemi fino a 192 spin, dell'esistenza di uno spettro di tempi di rilassamento divergenti nel limite di $V \rightarrow \infty$, già invocata da Sompolinsky a livello teorico [72]. In particolare essi misero in evidenza l'esistenza di una scala di tempo τ divergente nel limite termodinamico con andamento $\log \tau \propto V^{1/4}$, e di una seconda scala di tempo "ergodica" τ_{eg} legata alla taglia del sistema dalla relazione $\log \tau_{\text{eg}} \propto V^{1/2}$. Quest'ultima è determinata dai processi associati ad un'inversione completa di tutti gli spin del reticolo.

Tali risultati furono accettati in un primo momento sulla base di alcune semplici argomentazioni basate sull'osservazione del fatto che in un sistema di V spin, congelati in uno stato fondamentale con orientazioni casuali, la variazione di energia libera per unità di volume associata al capovolgimento di un blocco di ΔN elementi, cresce con la taglia del blocco come $\Delta f \propto \Delta N^{1/2}$. In questo modo quando il sistema è sottoposto ad un'eccitazione in cui tutti gli spin vengono invertiti ($\Delta N = V$) la variazione di energia libera corrispondente risulterà proporzionale alla radice quadrata del volume del sistema:

$$\log \tau_{\text{eg}} \propto \Delta f \propto V^{1/2}$$

Un calcolo esatto della funzione di partizione per sistemi in cui $V \leq 20$ [73], mostra altresì che l'ampiezza caratteristica dei blocchi di spin che vengono invertiti quando il

sistema è sottoposto ad un'eccitazione termica elementare (es. dallo stato fondamentale al primo stato eccitato), aumenta con il volume del reticolo con andamento $\Delta N \propto V^{1/2}$, da cui $\Delta f \propto V^{1/4}$.

Lo scenario che traspare da questo primo tentativo di indagine è dunque quello di uno spazio delle fasi in cui una grande barriera energetica di altezza $V^{1/2}$ separa l'una dall'altra due larghe vallate simmetriche ognuna delle quali è a sua volta popolata da minimi secondari separati da barriere di altezza $V^{1/4}$.

Tale concezione è stata smentita più di recente da Billoire e Marinari. Seguendo la stessa procedura computazionale di Mackenzie e Young gli autori di [74] hanno dimostrato che entrambi i tempi di rilassamento del modello SK sono dotati dello stesso comportamento di scala, in accordo con l'immagine di uno spazio delle fasi in cui l'altezza delle barriere energetiche diverge nel limite termodinamico con andamento $V^{1/3}$ [75].

L'indagine numerica che costituisce l'argomento di questo capitolo ha come obiettivo quello di analizzare lo stesso problema affrontato in [70, 71, 74] nel caso del modello p -spin, con l'intenzione di mettere alla prova l'osservazione teorica [44] presentata nel Capitolo 2 in virtù della quale $\log \tau \propto V$. Se paragonata con il caso dei modelli *short-range*, la simulazione dei modelli a portata infinita costituisce certamente un progetto di grande ambizione a causa del fatto che il tempo macchina necessario ad effettuare uno *sweep* reticolare cresce con il volume del sistema con andamento V^p . Da questo la scelta del caso meno dispendioso $p = 3$.

Affinchè lo spazio delle fasi del sistema possa essere sondato attraverso una dinamica simulata è chiaramente indispensabile che le configurazioni iniziali siano ben termalizzate. Questo garantisce l'opportunità di affiancare all'analisi dinamica descritta poc'anzi uno studio delle proprietà statiche, con il duplice proposito di verificare il corretto stato di termalizzazione dei campioni simulati e fornire al tempo stesso un quadro numerico più ampio di quello attualmente disponibile in letteratura [76], poichè derivato dalla simulazione di sistemi di taglia maggiore.

Il capitolo è strutturato come segue: il §4.2 è dedicato alla presentazione del metodo di lavoro e delle scelte algoritmiche che sono state seguite per la stesura dei programmi di simulazione; nel §4.3 è affrontato il problema della termalizzazione dei campioni; il comportamento del sistema all'equilibrio è presentato nei §4.4 – 4.6 mentre i risultati inerenti alla dinamica costituiscono l'argomento dei §4.7 – 4.8; il §4.9 è dedicato infine alle considerazioni conclusive.

Le simulazioni numeriche presentate sono state effettuate sul *cluster* pc Gallega presso i laboratori di Saclay (Parigi).

4.2 Dal modello all'algoritmo

In questo paragrafo descriveremo alcuni particolari dell'algoritmo adoperato per la simulazione del modello 3-spin, cercando di sottolineare le principali difficoltà computazionali che si riscontrano in questa categoria di problemi e le strategie che sono

state adoperare per fronteggiarle. Il modello 3-spin con interazioni a portata infinita è governato dall'hamiltoniana:

$$H_J = - \sum_{1 \leq i < j < k \leq V} J_{ijk} S_i S_j S_k - h \sum_{i=1}^V S_i \quad (4.1)$$

in cui le variabili di Ising $S_i = \pm 1$ sono accoppiate le une con le altre dagli elementi di matrice J_{ijk} , distribuiti secondo la legge:

$$P(J_{ijk}) = \frac{1}{2} \delta(J_{ijk} - J) + \frac{1}{2} \delta(J_{ijk} + J)$$

Affinchè l'energia libera sia estensiva, gli accoppiamenti p -spin devono essere normalizzati in modo tale che $\overline{J_{i_1 i_2 \dots i_p}^2} = p! / 2V^{p-1}$, che nel caso specifico di $p = 3$ comporta:

$$\overline{J_{ijk}^2} = J^2 = \frac{3!}{2V^2} \quad J = \pm \frac{\sqrt{3}}{V}$$

Partendo da una generica configurazione $\mathbf{X} = \{S_1, S_2 \dots S_V\}$, ed adottando l'algoritmo di Metropolis, si può generare una nuova configurazione \mathbf{X}' proponendo l'inversione di un singolo spin alla volta. La scelta dello spin può essere effettuata per mezzo di una selezione casuale oppure scorrendo in modo sequenziale tutti gli spin del reticolo. Il secondo criterio, che si è scelto di adottare per questo lavoro, consente di risparmiare risorse nella generazione dei numeri casuali e fornisce altresì la sicurezza che tutti gli spin del reticolo vengano proposti per l'inversione lo stesso numero di volte. Per ogni valore dell'indice i si calcola dunque la differenza di energia ΔE fra la vecchia configurazione e quella che si ottiene capovolgendo l' i -esimo spin:

$$\Delta E = E\{-S_i\} - E\{S_i\}$$

In accordo con la (3.5), per $\Delta E < 0$, la mossa è accettata con probabilità uno e si procede subito all'aggiornamento del reticolo; se altrimenti $\Delta E > 0$, si accetta la mossa con probabilità:

$$w_i = e^{-\beta \Delta E}$$

operazione questa che può essere effettuata estraendo un numero casuale r uniformemente distribuito nell'intervallo $[0, 1]$ ed accettando la mossa nel caso in cui esso risulti minore di w_i . La procedura viene ripetuta sullo spin $i + 1$ e così via fino a che tutto il reticolo non sia stato "spazzato" (*sweep*) dal ciclo degli aggiornamenti.

Ogni passo dell'algoritmo di Metropolis coinvolge complessivamente $N_{(\beta)}$ sistemi a temperatura differente. Ognuno di essi è rappresentato da due repliche indipendenti, per un totale di $2N_{(\beta)}$ copie accomunate dalla stessa istanza della matrice dei legami J_{ijk} . Lo scambio delle configurazioni fra i diversi bagni termici (vedi §3.4) può essere eseguito in modo sequenziale al termine di ogni *sweep*, di modo che una singola iterazione Monte Carlo sia costituita complessivamente da uno *sweep* completo di tutti i reticoli seguito da un ciclo di aggiornamenti *Parallel Tempering*. I dati presentati nei

paragrafi successivi sono stati prodotti sottoponendo i campioni ad una prima fase di termalizzazione costituita da $4 \cdot 10^5$ iterazioni, al termine delle quali, le sei configurazioni in equilibrio con le temperature $T = 0.3, 0.36, 0.42, 0.48, 0.54$ e 0.6 sono state lasciate libere di evolvere per mezzo del solo algoritmo di Metropolis per altre $2 \cdot 10^6$ iterazioni, destinate allo studio della dinamica.

L'uso della codifica *Multispin* (vedi §3.5) permette tuttavia di ridurre il costo computazionale di un fattore N_b dipendente dall'architettura del calcolatore. Per chiarire quest'ultima affermazione possiamo ripartire dalla definizione (4.1) dell'energia nel caso specifico in cui $h = 0$:

$$E = - \sum_{1 \leq i < j < k \leq V} J_{ijk} S_i S_j S_k = - \frac{1}{3!} \sum_{(ij)} S_i S_j \left(\sum_k J_{ijk} S_k - J_{iji} S_i - J_{ijj} S_j \right) \quad (4.2)$$

Facendo ricorso alla trasformazione di coordinate (3.16):

$$J_{ijk} S_k = 1 - 2J_{ijk} \oplus \eta_k \quad \text{con} \quad \begin{cases} J_{ijk} = 1 - 2J'_{ijk} \\ S_k = 1 - 2\eta_k \end{cases}$$

possiamo riscrivere la (4.2) nella forma:

$$\begin{aligned} E &= - \frac{1}{3!} \sum_{(ij)} S_i S_j \left[\sum_k (1 - 2J'_{ijk} \oplus \eta_k) - 2 + 2J'_{iji} \oplus \eta_i + 2J'_{ijj} \oplus \eta_j \right] \\ &= - \frac{1}{3!} \sum_{(ij)} S_i S_j \left[V - 2 - 2 \left(\sum_k J'_{ijk} \oplus \eta_k - J'_{iji} \oplus \eta_i - J'_{ijj} \oplus \eta_j \right) \right] \end{aligned}$$

Tutti gli elementi simmetrici del tensore J'_{ijk} possono essere posti convenzionalmente uguali a zero:

$$J'_{iik} = J'_{ijj} = J'_{iji} = 0 \quad \forall i j k \in [1, V]$$

in tal modo la (4.2) può essere riscritta definitivamente come:

$$E = - \frac{1}{3!} \sum_{(ij)} S_i S_j \left[V - 2 - 2 \left(\sum_k J'_{ijk} \oplus \eta_k - \eta_i - \eta_j \right) \right] \quad (4.3)$$

A questo punto la sommatoria sull'indice k può essere calcolata attraverso le tecniche di *Multispin Coding* descritte nel §3.5:

$$\begin{cases} \sum_k J'_{ijk} \oplus \eta_k = \left[\sum_w \hat{J}_{w+\Delta_{ij}} \oplus \hat{X}_w \right]_{\text{MCS}} \\ \Delta_{ij} = iV N_w + j N_w \end{cases}$$

Le quantità \hat{X}_w e \hat{J}_w rappresentano in questo contesto gli *array* unidimensionali in cui sono memorizzate le variabili di spin e gli accoppiamenti J'_{ijk} . Per ogni η_i , l'indice reticolare i e l'indirizzo di memoria corrispondente sono legati dalla relazione:

$$w = \left[\frac{i}{N_b} \right] \quad b = i \pmod{N_b}$$

in cui w e b sono rispettivamente gli indirizzi della *parola* e del bit in cui la variabile η_i è memorizzata ed N_b è la lunghezza in bit di una singola *parola*. Per \hat{J}_{ijk} si ricava analogamente:

$$w = \left[\frac{k}{N_b} \right] + iVN_w + jN_w \quad b = k \pmod{N_b}$$

dove N_w è il numero di parole in cui il reticolo è suddiviso: $N_w = V/N_b$. L'algoritmo di Metropolis precedentemente descritto, può essere messo in pratica riscrivendo la (4.3) nel modo seguente:

$$E = \frac{1}{3!} \sum_i E_i \quad \text{con} \quad E_i = -S_i \sum_{j \neq i} S_j E_{ij}$$

avendo chiamato:

$$E_{ij} = V - 2 - 2 \left(\sum_k \hat{J}'_{ijk} \oplus \eta_k - \eta_i - \eta_j \right)$$

La differenza energetica ΔE associata all'inversione del generico spin i si può ricavare dalla (4.3) evidenziando la dipendenza dalla variabile S_i :

$$E\{\sigma_i\} = -\frac{1}{3!} \left[3S_i \sum_{(jk) \neq i} J_{ijk} S_j S_k + \sum_{(ljk) \neq i} J_{ljk} S_l S_j S_k \right]$$

Invertendo l' i -esimo spin si ottiene:

$$\Delta E = E\{-S_i\} - E\{S_i\} = S_i \sum_{(jk) \neq i} J_{ijk} S_j S_k = -E_i$$

Dunque, come previsto dall'algoritmo di Metropolis, se $\Delta E < 0$ ($E_i > 0$) l' i -esimo spin viene immediatamente invertito, mentre nel caso in cui $\Delta E > 0$ ($E_i < 0$) la nuova configurazione viene accettata con probabilità:

$$w_i = e^{-\beta \Delta E} = e^{\beta E_i}$$

La Tabella 4.1 riassume i parametri utilizzati per l'impostazione della prima parte della simulazione adibita alla termalizzazione dei campioni e allo studio del sistema all'equilibrio.

V	Campioni	Iterazioni	Temp.	ΔT
32	1000	$2 \cdot 10^5 + 2 \cdot 10^5$	$0.3 \div 1.2$	0.6
64	500	$2 \cdot 10^5 + 2 \cdot 10^5$	$0.3 \div 1.2$	0.6
96	200	$2 \cdot 10^5 + 2 \cdot 10^5$	$0.3 \div 1.2$	0.6
128	200	$2 \cdot 10^5 + 2 \cdot 10^5$	$0.3 \div 0.9$	0.3
160	200	$2 \cdot 10^5 + 2 \cdot 10^5$	$0.3 \div 0.9$	0.3
192	200	$2 \cdot 10^5 + 2 \cdot 10^5$	$0.3 \div 0.9$	0.3

Tabella 4.1

4.3 Studio della termalizzazione

Nel capitolo precedente è stato sottolineato come il raggiungimento dell'equilibrio termico costituisca un aspetto cruciale delle simulazioni Monte Carlo. Come si è detto nel §3.2, il termine “equilibrio” denota in questo contesto la circostanza in cui la probabilità di trovare il sistema in una certa configurazione \mathbf{X} sia proporzionale al rispettivo peso di Boltzmann $\exp(-\beta H[\mathbf{X}])$. Quest'ultima rappresenta evidentemente la condizione primaria nello studio numerico di un sistema termodinamico in assenza della quale una qualunque misurazione del tipo (3.6) perderebbe istantaneamente di significato. Una parte cospicua del lavoro numerico che costituisce l'argomento di questo capitolo è stata dedicata allo studio del processo di termalizzazione, con il duplice obiettivo di pianificare una strategia di lavoro attraverso la quale ottenere dei risultati soddisfacenti con il minor dispendio possibile di risorse computazionali e valutare a posteriori la bontà delle misure raccolte. Come detto nel paragrafo precedente il modello studiato presuppone un impiego di tempo macchina del tipo:

$$T_{\text{CPU}} = O(N_{(\beta)} V^3) \quad (4.4)$$

La messa a punto di un piano di lavoro volto a minimizzare i prefattori della (4.4) costituisce una prerogativa indispensabile, laddove un approccio non ottimale al problema può causare una dilatazione dei tempi di calcolo di giorni interi, senza nessun guadagno sull'accuratezza dei risultati. In questo paragrafo descriveremo le tecniche di verifica della termalizzazione che sono state seguite ed ideate a questo scopo.

Prima di addentrarci nella descrizione dei risultati originali, però, può essere utile menzionare alcuni dei criteri di verifica tradizionali della fisica dei sistemi disordinati. In particolare mostreremo come l'uso del *Parallel Tempering* e l'assenza di simmetria TRS introducano la necessità di un approccio diverso.

Si consideri a titolo di esempio un sistema Ising disordinato sottoposto ad una generica dinamica Monte Carlo. Un primo criterio per lo studio della termalizzazione

consiste nel verificare la simmetria della distribuzione di probabilità $P(q)$ dell'overlap $q = \frac{1}{V} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta$ di due repliche indipendenti dello stesso sistema simulate in parallelo. Poichè la scala di tempo più lunga nella dinamica di Metropolis è quella abbinata all'inversione di tutti gli spin $\{S_i^\alpha\} \rightarrow \{-S_i^\alpha\}$, e di conseguenza all'inversione dell'overlap $q \rightarrow -q$, il fatto che due generiche configurazioni $\{S_i^\alpha\}$ e $\{-S_i^\alpha\}$ compaiano nella distribuzione del parametro q con la stessa frequenza, necessita che sia stato esplorato l'intero spazio delle fasi. Come già detto quest'ultima è un'esigenza specifica dei sistemi disordinati (ed in particolare dei vetri di spin) motivata dal fatto che i singoli stati puri del sistema non sono legati da una qualche particolare regola di simmetria, come avviene al contrario nei modelli ferromagnetici, ed una conoscenza esaustiva del sistema presuppone il campionamento di ciascuno di essi.

Un ulteriore criterio, proposto da Bhatt e Young nel '88 [77], consiste in un confronto fra la distribuzione di probabilità $P(q)$ non appena menzionata, con la distribuzione $f(Q)$ del parametro di auto-sovrapposizione:

$$Q(t) = \frac{1}{Nt} \sum_{t'=t}^{2t} \sum_{i=1}^V S_i^\alpha(t') S_i^\alpha(t' + t)$$

Impostando le configurazioni iniziali delle due repliche in modo casuale, l'overlap fra di esse sarà in principio nullo per poi aumentare nel corso della dinamica fino a stabilizzarsi in corrispondenza del valore di equilibrio della specifica realizzazione del disordine. Osservando l'evoluzione della distribuzione di probabilità di q iterazione dopo iterazione, a partire dall'istante iniziale, la si vedrebbe acquistare il profilo della distribuzione $P(q)$ del sistema all'equilibrio allargandosi dal centro verso le estremità. Analogamente, nei punti in cui la $P(q)$ d'equilibrio presenta i suoi massimi, la distribuzione transiente risulterà inizialmente minore e tenderà ad avvicinarsi alla prima dal basso.

Al contrario le variabili $S_i(t')$ e $S_i(t' + t)$ saranno inizialmente molto correlate ed il loro overlap sarà tipicamente più grande rispetto a quello di due configurazioni all'equilibrio. La distribuzione di probabilità $f(Q)$ del parametro Q presenterà dei picchi in corrispondenza dei valori di Q maggiori in modulo rispetto a quelli all'equilibrio, e con il passare del tempo tenderà alla $P(q)$ dall'alto. Quando la distribuzione transiente risulta uguale alla $f(Q)$, entro gli errori statistici, si può ritenere che il sistema abbia raggiunto una condizione d'equilibrio. In corrispondenza si dovrà avere chiaramente:

$$Q(t_{eq}) \simeq q_{eq}$$

Usando il *Parallel Tempering*, tuttavia, criteri come quelli descritti cessano di essere così efficaci come nel caso dell'algoritmo di Metropolis tradizionale. Il processo di inversione di tutti gli spin, ad esempio, non è detto definisca ancora la scala di tempo più lunga, a causa dei continui trasferimenti da un ensemble canonico all'altro. Si rischia dunque di osservare una distribuzione di probabilità degli overlap sufficientemente simmetrica senza che essa sia accompagnata da una reale condizione di equilibrio. In presenza di sistemi privi di simmetria TRS, oltretutto, la $P(q)$ non è più simmetrica

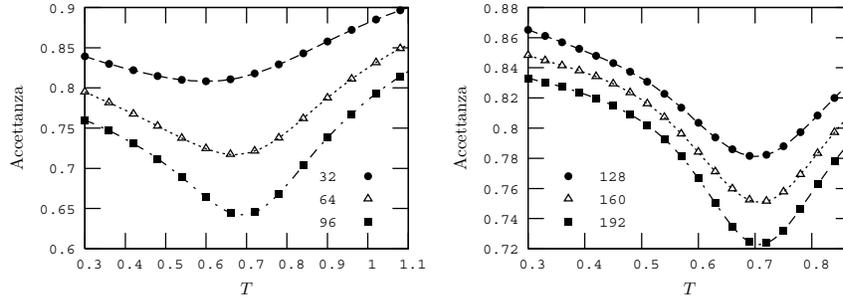


Figura 4.1: Rapporto di accettazione del *Parallel Tempering* per i reticoli con $V = 32, 64, 96$ e $N_{(\beta)} = 16$ (a sinistra) e $V = 128, 160, 192$ e $N_{(\beta)} = 21$ (a destra).

sotto la trasformazione $q \rightarrow -q$, e di conseguenza mancherebbero le motivazioni teoriche, oltre che quelle pratiche, per affidarsi ad una prova basata sulla simmetria. Anche per il secondo criterio, il comportamento sostanzialmente regolare descritto in precedenza viene offuscato dallo scambio delle configurazioni da un bagno termico all'altro. Le caratteristiche del *Tempering* suggeriscono piuttosto l'utilizzo di tecniche di verifica in grado di rivelare la rapidità e l'ergodicità della dinamica nell'ensemble esteso. Per cominciare si possono prendere in considerazioni i seguenti criteri:

- a) Per ogni ciclo del *Tempering* si registrano gli spostamenti delle configurazioni da un bagno termico all'altro in modo da misurare la frequenza di accettazione degli scambi fra tutte le coppie di temperature consecutive (Figura 4.1). Come già anticipato nel Capitolo 4, questa condizione è senza dubbio necessaria affinché si realizzi una corretta termalizzazione, ma non è sufficiente a garantire che le copie visitino realmente tutti gli stati termici a disposizione. Può accadere infatti che una certa configurazione si sposti solamente all'interno di una stesso sottoinsieme di temperature senza mai attraversare l'intero spazio delle fasi.
- b) Per prevenirsi da questo inconveniente è doveroso controllare il tempo di permanenza di una stessa replica in ogni singolo bagno termico e verificare che essa abbia sostato in tutti gli stati di temperatura per tempi di permanenza confrontabili (Figura 4.3).
- c) Esaminando il transiente in scala logaritmica di una generica osservabile, è possibile stabilire dopo quante iterazioni essa raggiunga il valore stazionario, per fare in modo che non vi siano cambiamenti apprezzabili durante la fase di misura (Figura 4.2).

Per avere una visione ancora più completa dell'efficienza del *Parallel Tempering* può essere utile affiancare alle tre analisi appena descritte ancora due tecniche:

Diagrammi di Frequenza. Siano ad esempio $\tau_i(T)$ $i = 1, 2 \dots N_{(\beta)}$ i tempi di permanen-

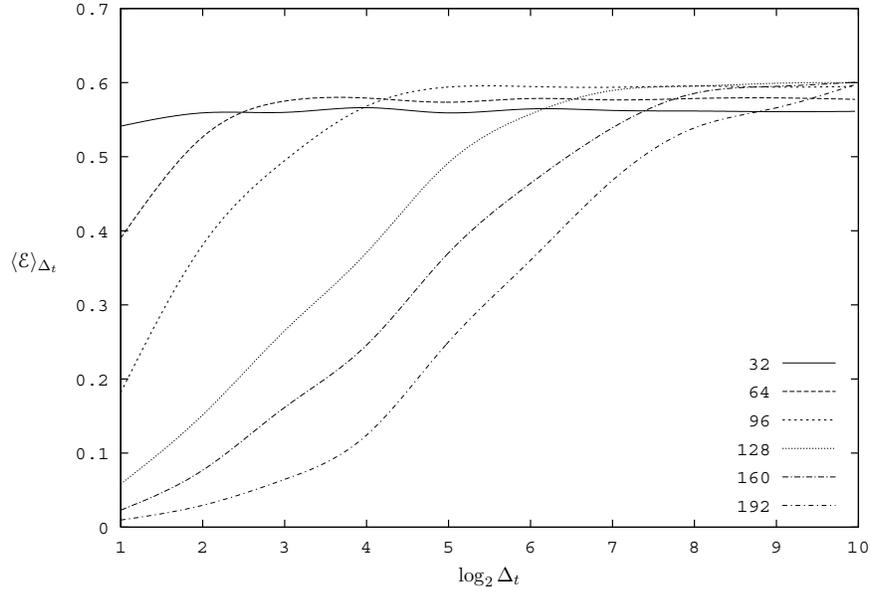


Figura 4.2: Grafico di convergenza della densità di energia su scala logaritmica.

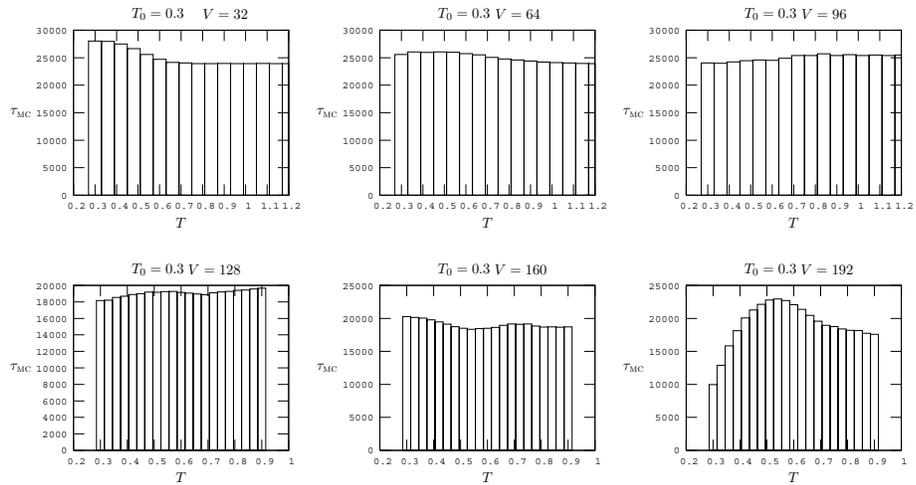


Figura 4.3: Istogrammi di permanenza di sei campioni di volume diverso.

za in ogni bagno termico delle configurazioni inizialmente a temperatura T . Chiamando $\Delta = \tau_{\max} - \tau_{\min}$ la differenza fra il massimo e il minimo della sequenza $\tau_i(T)$ può essere utile esaminare la distribuzione della variabile Δ nell'insieme di tutti i campioni simulati. Come si vede in Figura 4.4, quando il volume del sistema aumenta e la probabilità degli scambi delle configurazioni diminuisce, le linee tendono a distribuirsi su un intervallo più ampio. La comparsa di valori di Δ sempre più alti evidenzia la presenza di una distribuzione di probabilità $P(\Delta)$ lentamente variabile. I diagrammi di frequenza in Figura 4.4 mettono al riparo dalla presenza di eventuali campioni anomali in cui le configurazioni tendono a rimanere bloccate troppo a lungo in uno stesso stato termico producendo in tal modo valori di Δ patologicamente fuori dalla media.

Test Multinomiale. Sul piano puramente probabilistico, ogni stato termico può essere visto come una specifica classe multinomiale. In quest'ottica, la probabilità di trovare una particolare successione di tempi di permanenza $\tau_1, \tau_2 \dots \tau_{N(\beta)}$ nella storia di un particolare campione può essere espressa nella forma:

$$P_{n, \{p_i\}}(\tau_1, \tau_2 \dots \tau_{N(\beta)}) = \frac{n!}{\tau_1! \tau_2! \dots \tau_{N(\beta)}!} \prod_{i=1}^{N(\beta)} p_i^{\tau_i}$$

dove p_i è la probabilità associata ad ogni singola classe e $n = \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_{N(\beta)}$ è il numero di cicli *Tempering*. Allo scopo di valutare la dispersione dei tempi di permanenza è possibile paragonare i τ_i della simulazione con i valori che si avrebbero nel caso ideale di una sequenza di stati termici totalmente scorrelati. In quest'ultimo caso si avrebbe $p_i = 1/N(\beta) \forall i$ e dunque:

$$\langle \tau_i \rangle = \langle \tau \rangle = n/N(\beta) \quad \text{var } \tau_i = \frac{n}{N(\beta)} \left(1 - \frac{1}{N(\beta)} \right)$$

Gli istogrammi in Figura 4.5 mostrano la frequenza ν_k con cui le variabili τ_i relative ad una certa configurazione (es. quella che all'istante iniziale si trova a temperatura più bassa) soddisfano la condizione:

$$\left\{ \tau_i \in [\langle \tau \rangle - k\sigma_\tau, \langle \tau \rangle + k\sigma_\tau] \right\} \vee \left\{ \tau_i \notin [\langle \tau \rangle - (k-1)\sigma_\tau, \langle \tau \rangle + (k-1)\sigma_\tau] \right\}$$

All'aumentare del volume la larghezza della distribuzione aumenta vistosamente senza tuttavia dilagare in una situazione di eccessiva dispersione, indicando che gli stati termici sono sufficientemente scorrelati e che le scelte fatte nell'impostazione della simulazione (es. l'insieme delle temperature e il numero di iterazioni) ha prodotto un campionamento soddisfacente dello spazio delle fasi.

4.4 Fluttuazione dei parametri d'ordine (OPF)

Una delle principali caratteristiche della fase di bassa temperatura dei vetri di spin è rappresentata dalla perdita della proprietà di automedia da parte dei parametri d'ordine. L'overlap $q = \frac{1}{V} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta$, che nella fase paramagnetica è assimilato ad una

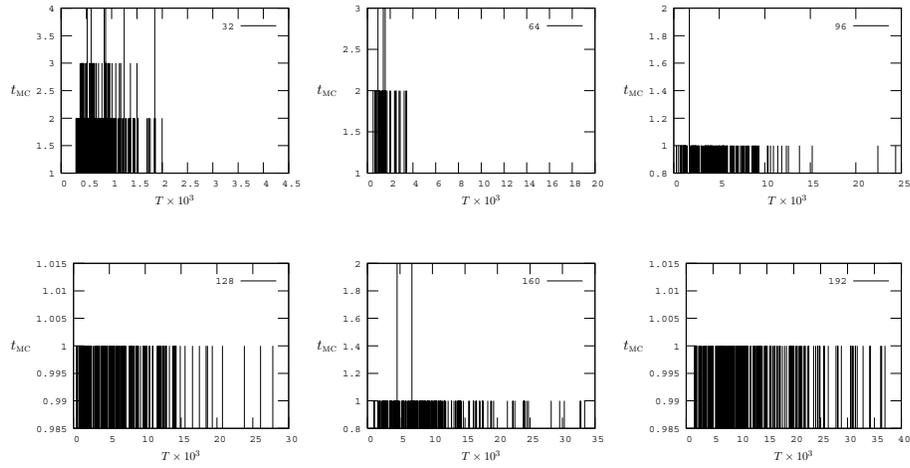


Figura 4.4: Diagrammi di frequenza.

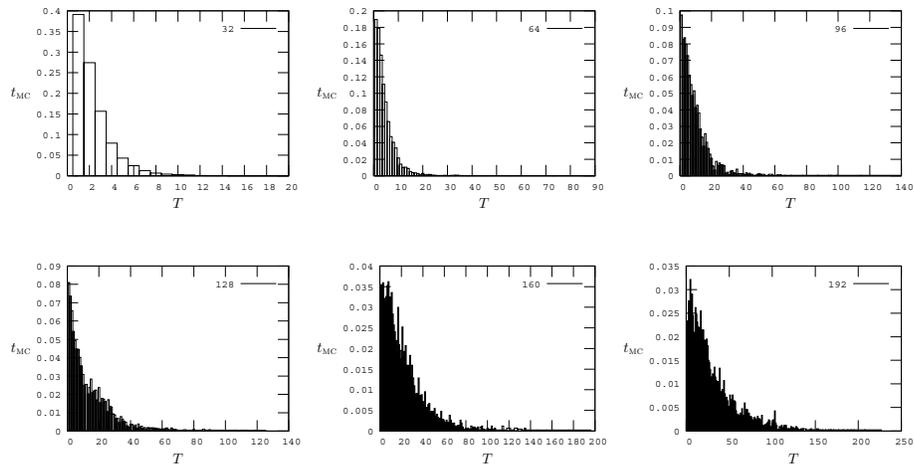


Figura 4.5: Test multinomiale.

variabile casuale con valore d'aspettazione nullo e varianza $\sigma^2 \sim 1/V$, esibisce ad esempio delle forti fluttuazioni da campione a campione che non si annullano nel limite di volume infinito, mentre la distribuzione $P_J(q)$, banale nella fase calda, è tale che $\overline{P_J(q_{12}, q_{34})} \neq \overline{P_J(q_{12})P_J(q_{34})}$ come conseguenza diretta della rottura della simmetria delle repliche.

Lo studio delle fluttuazioni dei parametri d'ordine (d'ora in avanti OPF) nei sistemi di taglia finita, passa necessariamente attraverso l'uso della simulazione numerica. A tale scopo si è cercato di definire una nuova classe di parametri adimensionali, conformi all'ipotesi di riscaldamento:

$$X = f_X(L^{1/\nu}[T - T_c(L)])$$

con $T_c(L) = T_c(\infty) + aL^{-1/\nu}$, in grado di rivelare alcune proprietà importanti della fase di bassa temperatura, se utilizzate come termine di confronto di sistemi di taglia diversa.

Nello studio delle transizioni di fase nei sistemi ordinati è abitudine comune analizzare la dipendenza dalla temperatura del bagno termico di parametri d'ordine quali la suscettività magnetica e il rapporto di Binder $B_T(m)$. Quest'ultimo, in particolare, misura il coefficiente di curtosi della funzione di distribuzione del parametro d'ordine, che nel caso dei ferromagneti coincide con la magnetizzazione locale m :

$$B = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right) \quad m = \frac{1}{V} \sum_i S_i$$

Nella fase paramagnetica, $\langle m^4 \rangle = 3\langle m^2 \rangle^2$ e $B = 0$; la distribuzione è in questo caso una normale con valor medio nullo e varianza pari ad $1/V$. Nella fase rotta la distribuzione è invece leptocurtica, con $B = 1 \forall T < T_c$ nel limite termodinamico. L'andamento di B in funzione della temperatura (Figura 4.6) è dunque semplicemente:

$$B = \theta(T_c - T) : \quad (4.5)$$

Nei vetri di spin il rapporto di Binder può essere espresso nuovamente a partire dal parametro d'ordine q :

$$B = \frac{1}{3} \left(3 - \frac{\overline{\langle q^4 \rangle}}{\langle q^2 \rangle^2} \right) \quad (4.6)$$

In questo caso, però, il parametro non è fruttuoso come nei modelli ferromagnetici. In sistemi descritti da un'hamiltoniana simmetrica per inversione temporale $\{S_i\} \rightarrow \{-S_i\}$ (d'ora in poi TRS), B può essere adoperato con successo per rivelare la presenza di transizioni con rottura spontanea di simmetria TRS, ma risulta inevitabilmente meno esauriente nell'indicare l'esistenza di una transizione con rottura di simmetria delle repliche. L'andamento di B oltretutto, non possiede nella fase rotta le stesse doti di semplicità che nei modelli ferromagnetici: mentre nella fase paramagnetica è

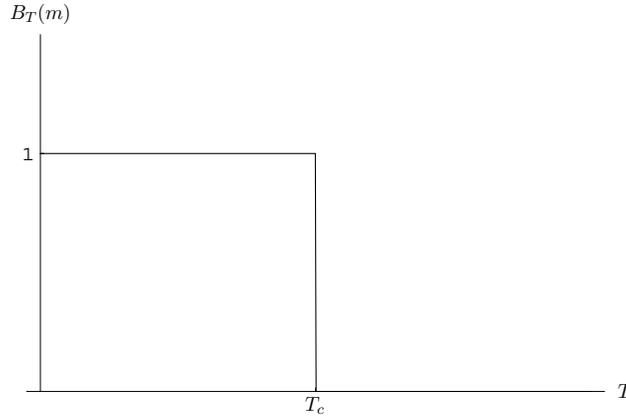


Figura 4.6

ugualmente nullo, nella fase fredda esso manifesta una dipendenza non banale da T , sebbene per $T = 0$ esibisca sempre il valore universale $B = 1$.

In sistemi privi di simmetria TRS, il rapporto di Binder presenta un andamento fortemente diverso: esso risulta negativo in prossimità della temperatura critica e le curve relative a sistemi di volume differente non si intersecano al punto critico. È dunque necessario definire dei nuovi parametri d'ordine in grado di mettere a nudo il meccanismo di rottura di simmetria delle repliche tipico dei vetri di spin a prescindere dall'esistenza di una simmetria di tipo TRS. Come hanno osservato gli autori di [78], un indice inconfutabile di rottura di simmetria delle repliche consiste proprio nell'assenza dell'automeia nella fase di bassa temperatura. Tale fenomeno può essere evidenziato ricorrendo al rapporto:

$$G = \frac{\overline{\langle q^2 \rangle^2} - \overline{\langle q^2 \rangle}^2}{\overline{\langle q^4 \rangle} - \overline{\langle q^2 \rangle}^2} \quad (4.7)$$

La definizione del parametro G è fondata su alcune importanti relazioni di validità generale ricavate a partire dalle proprietà di equivalenza delle repliche. Tale proprietà, richiesta nell'ambito delle soluzioni di Parisi affinché l'energia libera del sistema replicato risulti proporzionale al numero n delle repliche ed abbia un limite ben definito per $n \rightarrow 0$, richiede che ogni riga della matrice delle repliche sia la permutazione di qualsiasi altra riga, così che si abbia:

$$\sum_{\beta=1}^n q_{\alpha\beta} = \sum_{\beta=1}^n q_{\gamma\beta} \quad \forall \alpha \gamma$$

Le fluttuazioni sul disordine possono essere quindi descritte nel limite di $V \rightarrow \infty$ dalla relazione:

$$\overline{P_J(q_{12}, q_{34})} = \frac{1}{3} \overline{P_J(q_{12})} \delta(q_{12} - q_{34}) + \frac{2}{3} \overline{P_J(q_{12})} \overline{P_J(q_{34})} \quad (4.8)$$

In cui i numeri da 1 a 4 si riferiscono in generale a quattro diversi indici di replica. Come già detto $\overline{P_J(q_{12}, q_{34})} \neq \overline{P_J(q_{12})} \overline{P_J(q_{34})}$, dunque il parametro d'ordine $P_J(q)$

fluttua rispetto alla realizzazione dei legami J in modo non banale. Moltiplicando ambo i membri della (4.8) per q_{12}^2 e q_{34}^2 e integrando su tutti i possibili valori di overlap si ottiene immediatamente:

$$\overline{\langle q_{12}^2 \rangle^2} = \frac{1}{3} \overline{\langle q_{12}^4 \rangle} + \frac{2}{3} \overline{\langle q_{34}^2 \rangle^2} \quad (4.9)$$

Come dimostrato da Guerra in un importante lavoro del '96 [79], la regola (4.9) è valida per qualsiasi sistema disordinato in campo medio stocasticamente stabile, i.e. le cui proprietà (statiche e dinamiche) cambiano di poco sotto l'azione di una piccola perturbazione aleatoria. Sulla base di quanto detto si può definire il rapporto (4.7), in cui il numeratore non è altro che la fluttuazione quadratica media della suscettibilità di vetro di spin $\chi_{\text{SG}} = V \overline{\langle q^2 \rangle}$ a meno di un fattore V . L'utilità nella definizione di G risiede nel fatto che tale quantità si annulla nella fase calda dove le fluttuazioni della $P_J(q)$ dovute al disordine si dissolvono nel limite termodinamico, mentre nella fase di bassa temperatura, vista la generalità della (4.9), si può dimostrare che G assume il valore universale $1/3$. Il parametro G avrà dunque la semplice forma:

$$G = \frac{1}{3} \theta(T_c - T) \quad V \rightarrow \infty \quad (4.10)$$

Confrontando quest'ultima relazione con la (4.5) si intuisce come il parametro G rivesta, nel caso dei vetri di spin, lo stesso ruolo che il parametro di Binder ha nei sistemi ferromagnetici. In presenza di una transizione di fase con rottura di simmetria delle repliche, infatti, G va a zero come $1/V$ per $T > T_c$, mentre per $T \rightarrow 0$ converge ad un valore finito. Ci si aspetta dunque che la temperatura critica resti indicata dall'intersezione delle curve $G(T, V)$ corrispondenti alle diverse taglie V del reticolo.

Alle caratteristiche finora elencate si aggiunge infine la notevole proprietà [80] che per ogni volume V finito o infinito, il valore di G a $T = 0$ sia sempre pari ad $1/3$:

$$\lim_{T \rightarrow 0} G(V, T) = \frac{1}{3} \quad \forall V$$

a condizione che lo stato fondamentale sia unico e non vi sia discontinuità nella distribuzione del campo locale h_i tale che:

$$H = - \sum_{i=1}^V h_i S_i \quad h_i \propto \frac{\partial H}{\partial S_i} \neq 0 \quad \forall i$$

per $T = 0$. Tale condizione è soddisfatta in generale da tutti i modelli di vetro di spin con legami distribuiti in modo continuo. A temperatura $T > 0$, il profilo di G dipende chiaramente dai dettagli del sistema e dallo schema di rottura della simmetria delle repliche adottato per descrivere la fase di bassa temperatura.

La generalità della proprietà di equivalenza delle repliche suggerisce, in generale, che la (4.10) sia valida per ogni sistema in cui le OPF non svaniscono nei limite di $V \rightarrow \infty$. Nel caso in cui questo accada, entrambi il numeratore ed il denominatore della (4.7) si annullano per $V \rightarrow \infty$ e, nonostante ciò non impedisca alla G di mantenersi

finita per $T < T_c$, la sola equivalenza delle repliche non è più sufficiente a determinarne l'andamento. Quest'ultimo dipenderà al contrario dalle correzioni ai parametri d'ordine (non più legati alla (4.9)), introdotte dalla taglia finita del sistema.

Allo scopo di evidenziare l'eventuale sopravvivenza delle OPF al limite termodinamico, è necessario introdurre un ulteriore parametro che non risenta delle ambiguità associate al rapporto fra due quantità tendenti a zero. Il parametro:

$$A = \frac{\overline{\langle q^2 \rangle^2} - \langle q^2 \rangle^2}{\langle q \rangle^2} \quad (4.11)$$

corrispondente al numeratore della (4.7) opportunamente normalizzato, rappresenta in questo senso la scelta migliore. A differenza di G , A è vincolato alla temperatura da un legame di dipendenza più articolato, dunque è inevitabilmente meno indicato a rivelare la presenza di una transizione di fase. Ciò nondimeno A fornisce una misura inequivocabile delle fluttuazioni delle suscettività di vetro di spin χ_{SG} , così che, in presenza di un unico stato fondamentale, esso si annulla a $T = 0$ quando l'overlap è pari ad uno.

Come già detto in apertura lo studio dei parametri A e G risulta particolarmente utile nello studio delle transizioni RSB in sistemi descritti da un'hamiltoniana priva di simmetria TRS, come nella fattispecie il modello a p -spin interazioni con p dispari. In questo caso il confronto dei risultati numerici con la teoria di campo medio risulta avvantaggiato dal fatto che il parametro q_0 della soluzione 1RSB è nullo ad ogni temperatura $T < T_c$. In questa circostanza i parametri A e B si riducono alle semplici espressioni:

$$A = \frac{m}{3(1-m)} \quad (4.12)$$

$$B = \frac{2-3m}{2(1-m)} \quad (4.13)$$

4.5 I parametri A , B e G

Il grafico di B al variare della temperatura (Figura 4.7) non mostra alcuna intersezione fra le curve corrispondenti a volumi diversi. In prossimità della temperatura critica $T_c \sim 0.65$, tuttavia, B diventa negativo e presenta un minimo che aumenta al crescere del volume del reticolo. Tale andamento è in buon accordo con le previsioni analitiche (4.13), in virtù delle quali per $T \rightarrow T_c^-$ e $m \rightarrow 1^-$, la quantità B esibisce una divergenza negativa. Si conferma in tal modo quanto già osservato dagli autori di [76] e prima ancora da Hukushima e Kawamura in relazione al modello di Potts a tre stati [81]. Tale proprietà, in ogni caso, non rappresenta una caratteristica generale dei sistemi dotati di una fase 1RSB, ma dipende fortemente dal valore dei parametri q_0 , q_1 ed m della soluzione. Nel caso del modello di Potts, ad esempio, ci si aspetta che B sia pari a -1 al punto critico. Il parametro B , come anticipato, non possiede le caratteristiche di universalità che manifesta nel caso dei sistemi ferromagnetici ed il suo andamento dipende in modo cruciale dalle caratteristiche del modello.

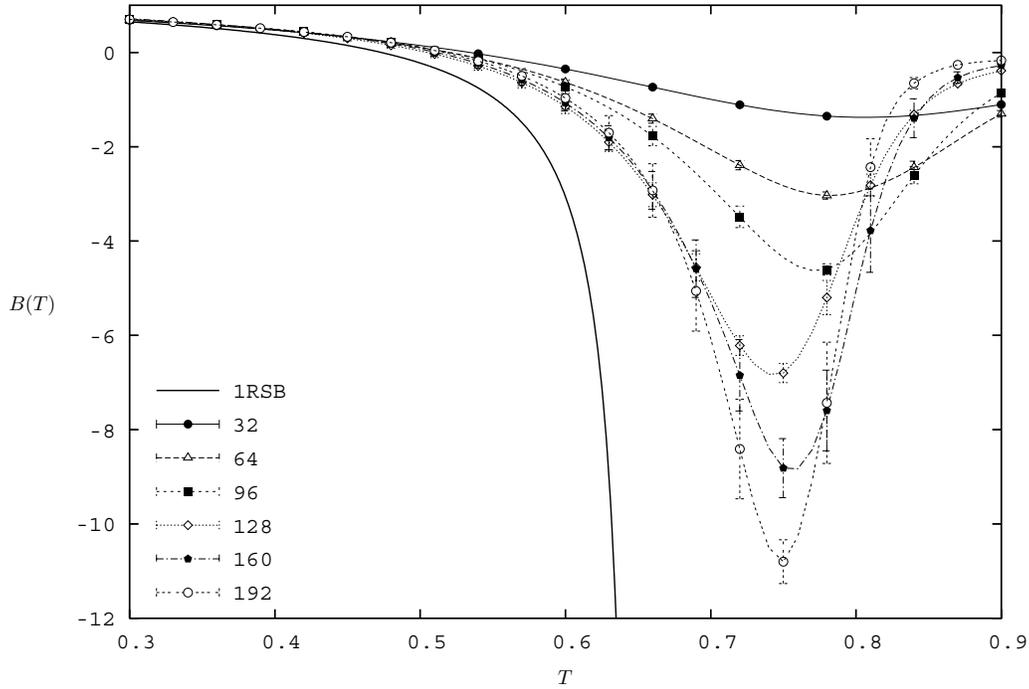


Figura 4.7: Parametro OPF B in funzione della temperatura per sei reticoli di volume differente.

L'andamento di A rappresentato in Figura 4.8 testimonia l'esistenza di fluttuazioni OPF nella fase di bassa temperatura. In modo speculare a quanto avviene per B la curva ha un massimo pronunciato in prossimità della temperatura critica che cresce molto rapidamente all'aumentare del volume, in accordo con l'espressione analitica (4.12). Per $T \rightarrow 0$ le repliche si avvicinano all'unico stato fondamentale e le fluttuazioni si annullano.

L'andamento sperimentale di G , infine, testimonia chiaramente l'evidenza di una transizione RSB a temperatura $0.6 \div 0.7$. Sebbene le forti fluttuazioni rendono vano l'eventuale tentativo di estrapolazione della temperatura critica dalle curve, il grafico in Figura 4.9 costituisce una prova eloquente dell'esistenza di una fase fredda con rottura di simmetria delle repliche e anche l'andamento delle curve a bassa temperatura ($T \sim 0.3$) è in accordo con quanto previsto circa l'universalità del valore $1/3$ a $T = 0$.

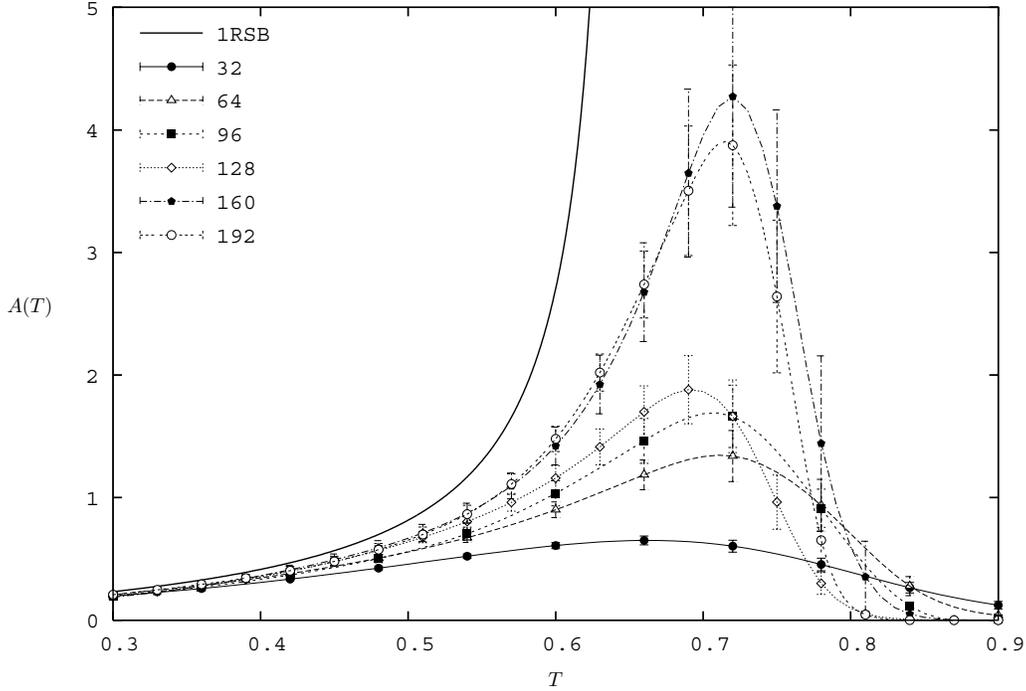


Figura 4.8: Parametro OPF A in funzione della temperatura per sei reticoli di volume differente.

4.6 Comportamento all'equilibrio

4.6.1 $\mathcal{E}(T)$ e $C(T)$

Il grafico in Figura 4.10, mostra l'andamento della densità di energia in funzione della temperatura. La traccia continua rappresenta l'andamento analitico ottenuto dall'integrazione numerica della soluzione 1RSB:

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{2\beta}[1 - (1 - m)q_1^p] \quad (4.14a)$$

$$q_1 = \frac{\int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1}) \tanh^2(x\sqrt{\lambda_1})}{\int Dx \cosh^m(x\sqrt{\lambda_1})} \quad (4.14b)$$

dove $\lambda_1 = \frac{3}{2}\beta^2 q_1^2$ per stabilità e $Dx = e^{-x^2/2}/\sqrt{2\pi}$. La seconda delle (4.14), in special modo, è stata risolta numericamente con l'ausilio delle routine DGAUSS e DSNLEQ della libreria informatica del CERN. Per il calcolo degli integrali impropri si è scelto di

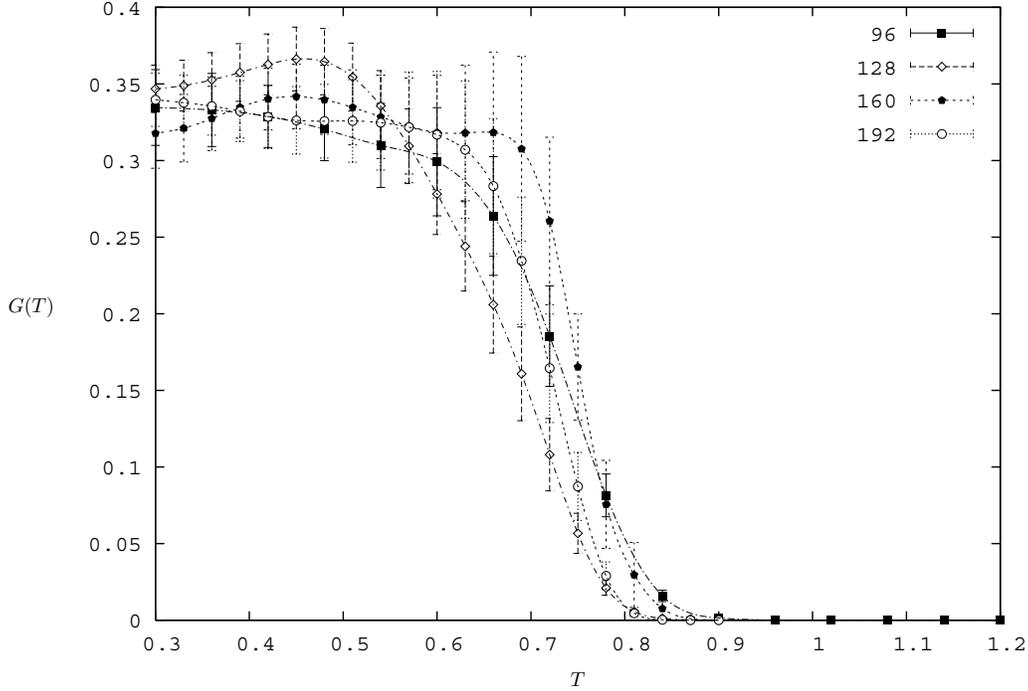


Figura 4.9: Parametro OPF G in funzione della temperatura per quattro reticoli di volume differente.

adoperare un criterio iterativo della forma:

$$I_{n+1} = I_n + \int_{nL}^{(n+1)L} dx f(x) \quad L = 10^{-12}$$

con il limite di tolleranza:

$$\varepsilon = |I_{n+1} - I_n| = 10^{-12}$$

Dal confronto della curva sperimentale con quella analitica è possibile osservare con particolare chiarezza gli effetti dovuti alla taglia finita del sistema. Chiamando $\Delta_V = |\mathcal{E}_\infty - \mathcal{E}_V|$, è stato possibile riscontrare in corrispondenza della temperatura minima, un andamento (Figura 4.11) della forma:

$$\mathcal{E}_V = \mathcal{E}_\infty + aV^{\frac{1}{\nu}} \quad \text{con} \quad \nu = 1.127 \pm 0.007$$

Il grafico in Figura 4.12 rappresenta l'andamento sperimentale del calore specifico ottenuto dalla derivazione delle curve sperimentali $\mathcal{E}(T)$ ed il valore teorico che si ottiene

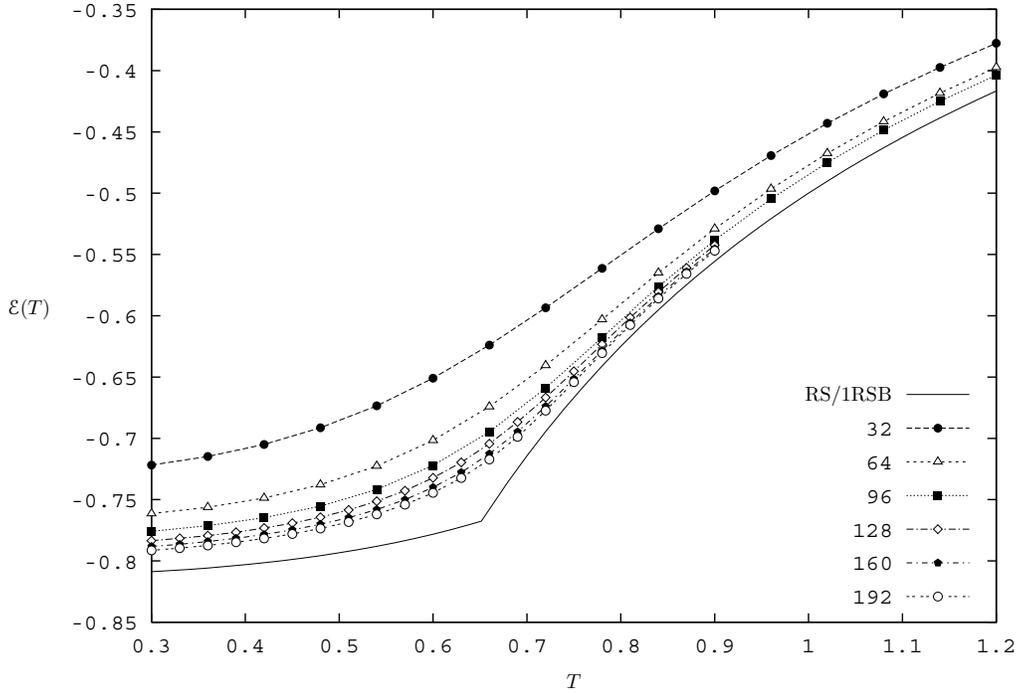


Figura 4.10: Densità di energia in funzione della temperatura per sei reticoli di volume differente. La linea continua rappresenta la soluzione analitica.

allo stesso modo a partire dalla soluzione RS/1RSB. Il grafico mostra chiaramente un ampio massimo sopra la temperatura di transizione ad indicare che, già prima di T_c , il sistema presenta un parziale congelamento che conduce ad una significativa variazione di entropia. A $T = T_c$ ci si aspetta solo una piccola variazione di entropia che giustifica l'assenza di eventuali anomalie nell'andamento sperimentale di $C(T)$. Tale proprietà avvicina i sistemi simulati a quelli reali, nei quali il picco del calore specifico (analogamente a quello della suscettività), si presenta generalmente a temperatura $T > T_c$.

4.6.2 $P(q)$, χ_{sg} e q

La distribuzione $P(q)$ del parametro di overlap può essere ottenuta memorizzando, ad ogni intervallo di misura successivo alla fase di termalizzazione, la quantità a due repliche:

$$Vq(t) = \sum_{i=1}^V S_i^\alpha(t) S_i^\beta(t)$$

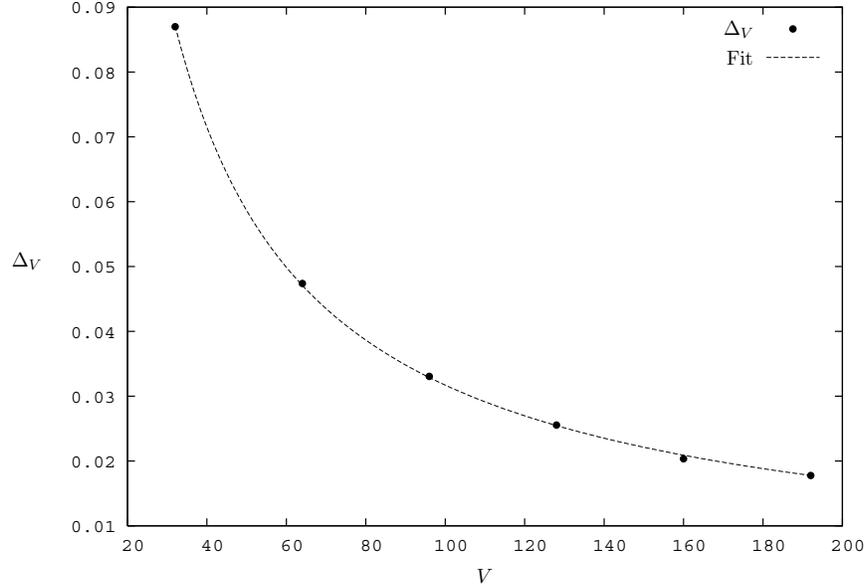


Figura 4.11: Differenza Δ_V fra la densità di energia \mathcal{E}_∞ della soluzione analitica e la quantità \mathcal{E}_V misurata a temperatura $T = 0.3$ in funzione della taglia del sistema.

così da poter ricostruire, al termine della simulazione, l'istogramma del parametro q , secondo la relazione:

$$\overline{P_J(q)} = \left\langle \delta \left(\frac{1}{V} \sum_i S_i^\alpha(t) S_i^\beta(t) - q \right) \right\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{t'=1}^t \delta \left(\frac{1}{V} \sum_i S_i^\alpha(t') S_i^\beta(t') - q \right) \quad (4.15)$$

dove il secondo passaggio è reso possibile dal fatto che, all'equilibrio termico le configurazioni campionate dal Monte Carlo seguono la distribuzione di Boltzmann. Il grafico in Figura 4.14 mostra l'andamento della $P(q)$ per un sistema di 192 spin, in corrispondenza di sei diverse temperature. Al diminuire della temperatura il grafico esibisce chiaramente il passaggio da una fase calda caratterizzata da una distribuzione gaussiana con valor medio nullo, ad una fase rotta caratterizzata da una distribuzione bimodale. La presenza di un picco in $q_1 \sim 1$ comincia a manifestarsi già a $T \simeq 0.74$ (all'incirca la stessa temperatura del massimo del calore specifico in Figura 4.12). Al diminuire della temperatura l'ampiezza del picco in q_1 aumenta con regolarità mentre l'ampiezza del picco in q_0 diminuisce. I due picchi raggiungono la stessa altezza a $T \simeq 0.45$ mentre alla temperatura più bassa $T = 0.3$ il picco in q_1 diventa predominante. Per meglio evidenziare la già palese compatibilità di questi risultati con la soluzione 1RSB, si è cercato estrapolare dalle curve $P(q)$ una stima numerica dei parametri q_0 ,

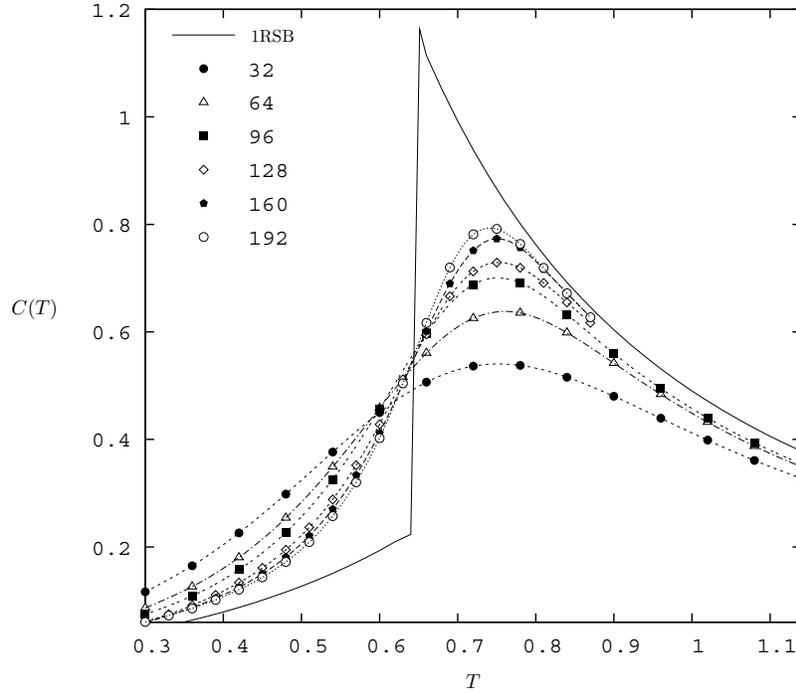


Figura 4.12: Calore specifico $C(T) = \partial\mathcal{E}/\partial T$ in funzione della temperatura. La linea continua rappresenta l'andamento teorico che si ricava dalla soluzione 1RSB.

q_1 ed m definiti nella:

$$P(q) = mq_0\delta(q - q_0) + (1 - m)q_1\delta(q - q_1)$$

A tale scopo si è scelto di interpolare il secondo picco della Figura 4.13 con delle splines cubiche naturali $s_i(T)$ per poi determinare da queste l'ascissa del massimo delle $P(q)$ sotto le imposizioni (volutamente semplicistiche):

$$P(q_1) \simeq P_{\max} \quad q_0 \sim 0 \quad m \sim \frac{q_1 - \overline{\langle q \rangle}}{q_1}$$

Le due curve in Figura 4.15 mostrano il risultato delle stime così ricavate per i reticoli di volume $V = 128, 160$ e 192 , nell'intervallo di temperatura $T \in [0.3, 0.72]$. Come si vede l'andamento delle curve sperimentali ricalca in modo soddisfacente quello della soluzione analitica, con un margine di errore fino al 3% per q_1 e fino al 10% per m , accettabili se giudicati in relazione all'approccio informale usato per questo tipo di analisi.

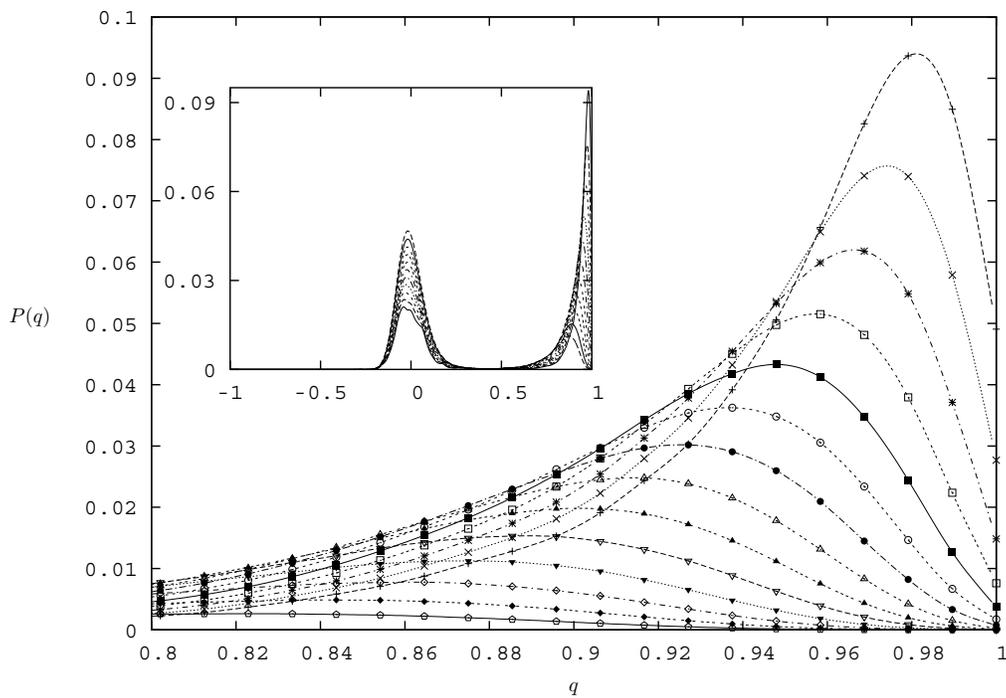
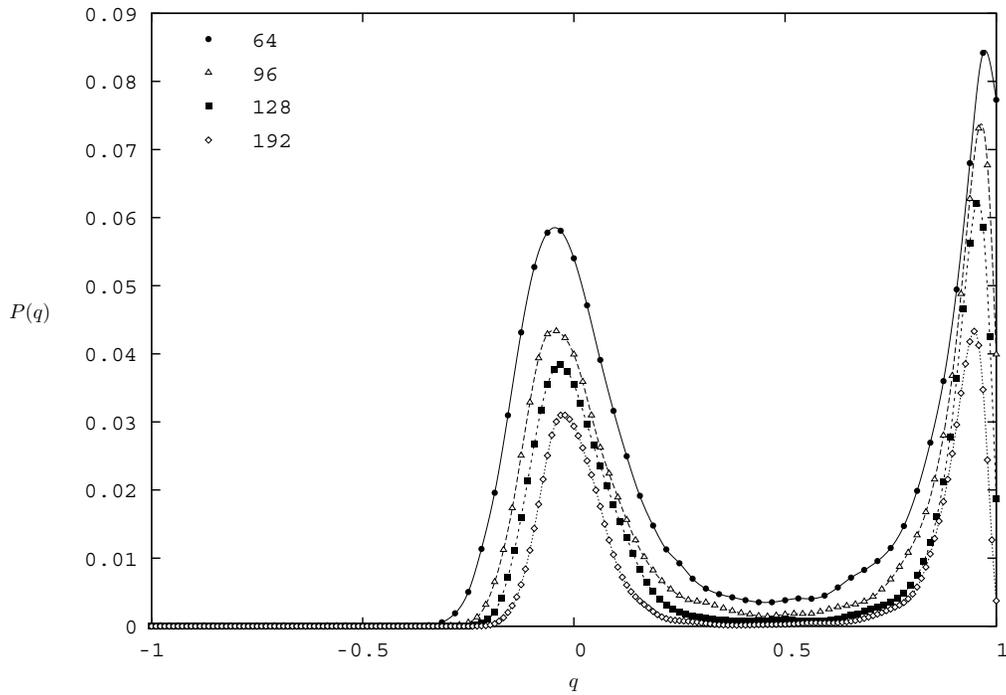


Figura 4.13: In alto la distribuzione $P(q)$ dell'overlap misurata a temperatura $T = 0.42$ per quattro reticoli di taglia diversa. In basso la $P(q)$ per un sistema di 192 spin per temperature da 0.3 a 0.74. In primo piano l'immagine ingrandita del picco corrispondente al parametro q_1 della soluzione 1RSB.

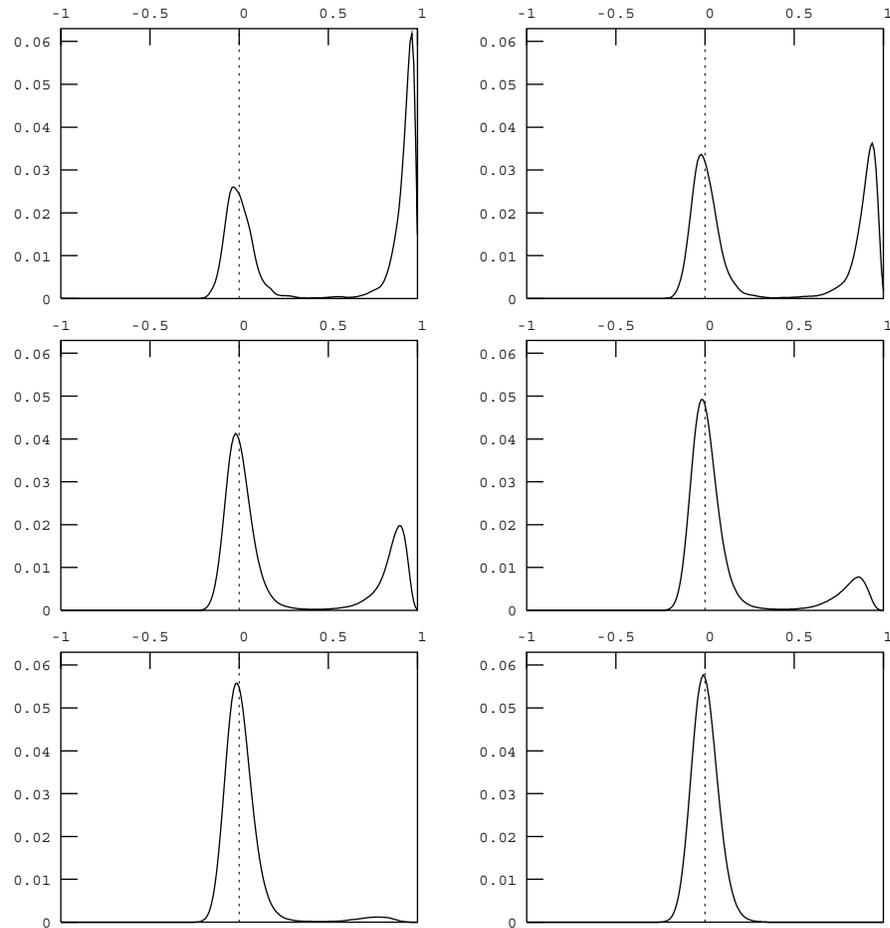


Figura 4.14: Distribuzione di probabilità $P(q)$ dell'overlap per un sistema di 192 spin a temperatura $T = 0.36, 0.45, 0.54, 0.63, 0.72$ e 0.9 .

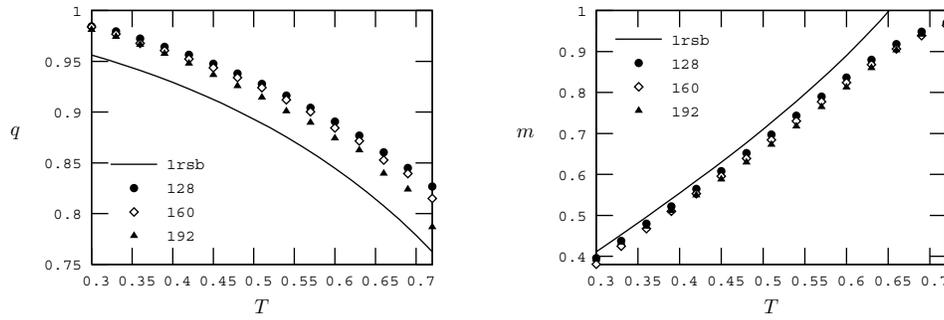


Figura 4.15: Parametri d'ordine q_1 (a sinistra) ed m a destra estrapolati dalla $P(q)$ relativa a tre campioni di volume $V = 128, 160$ e 192 .

I grafici in Figura 4.16, per finire, mostrano rispettivamente le misure del parametro d'ordine d'equilibrio $\overline{\langle q \rangle}$ e della suscettività di vetro di spin χ_{SG} . Entrambi confermano l'esistenza di una transizione di fase a temperatura $T \sim 0.65$ già dibattuta. Gli errori dovuti alle fluttuazioni sul disordine sono stati omessi dalla prima delle Figure 4.16 per facilitare la leggibilità del grafico. A differenza dei risultati presentati in precedenza, nel caso di $\overline{\langle q \rangle}$ questi hanno tuttavia un'entità non trascurabile (fino al 4% per il reticolo a 192 spin a $T = 0.3$). Ciò giustifica in qualche modo la presenza di una parziale sovrapposizione delle curve corrispondenti ai tre volumi più grandi nella fase di bassa temperatura.

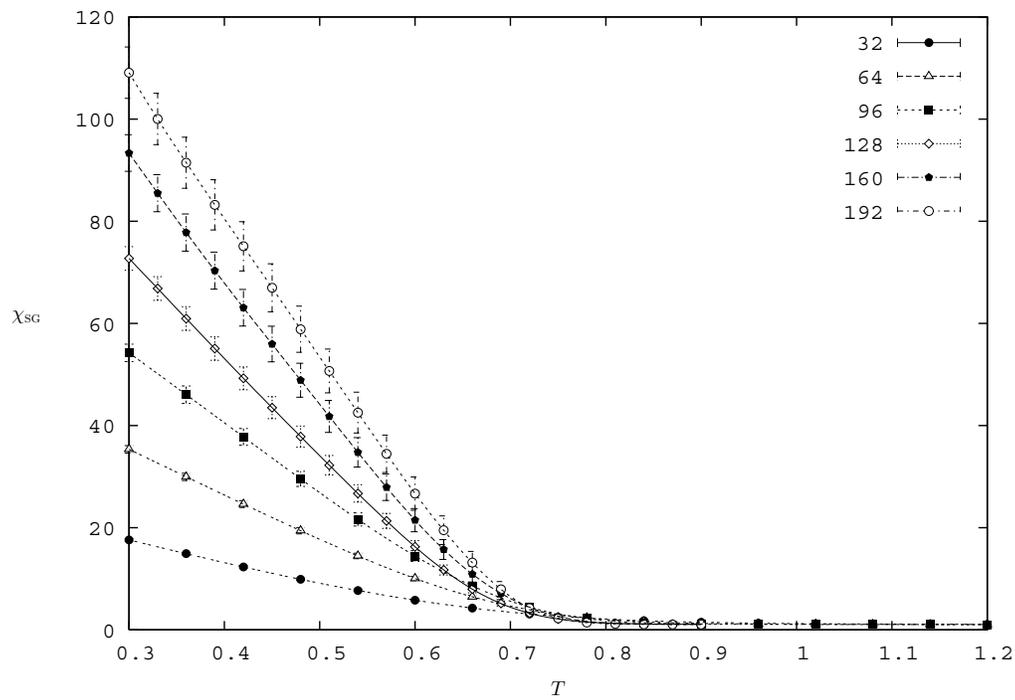
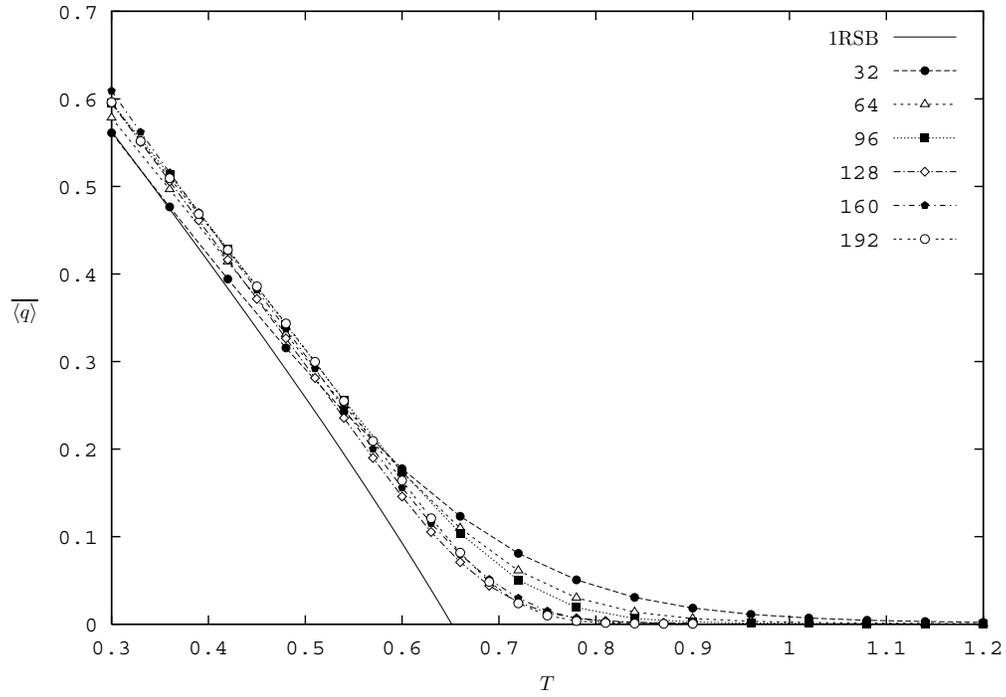


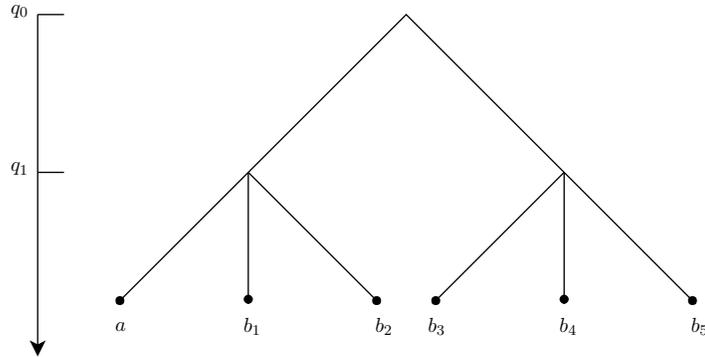
Figura 4.16: Parametro d'ordine d'equilibrio \overline{q} (in alto) e suscettività di vetro di spin (in basso) per sei reticoli di volume differente.

4.7 Comportamento Dinamico

In questa sezione descriveremo i risultati ricavati dallo studio della dinamica all'equilibrio di sistemi con volume finito ($V = 32, 64 \dots 192$). Seguendo Billoire e Marinari [74] si è concentrata la ricerca sulla quantità:

$$q(0, t) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^V S_i(0) S_i(t) \quad (4.16)$$

corrispondente al parametro di auto-sovrapposizione del sistema. L'orografia dello spazio delle fasi, come descritto dalla soluzione 1RSB, può fornire una previsione qualitativa abbastanza verosimile dell'andamento della quantità (4.16). In base a quanto previsto dallo schema 1RSB, infatti, nella fase di bassa temperatura gli stati sono suddivisi in due famiglie tali che gli stati appartenenti alla stessa famiglia abbiano overlap q_1 , mentre gli stati appartenenti a famiglie diverse abbiano overlap $q_0 = 0$ in assenza di un campo magnetico esterno. Chiamando quindi a lo stato in cui il sistema si trova



all'istante $t = 0$ e $b_1, b_2 \dots b_t$ gli stati che esso visita durante la dinamica, l'auto-overlap (4.16) potrà essere espresso nella forma:

$$\begin{aligned} q_J(0, t) &= \frac{1}{V} \sum_i S_i(0) S_i(t) = \frac{1}{V} \sum_i S_i^a S_i^{b_t} = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} q_n^J(t) [\theta(t - t_{n-1}) - \theta(t - t_n)] \end{aligned}$$

dove:

$$q_n^J(t) = \begin{cases} q_0^J & \text{con } \overline{q_1^J} = q_1 \\ q_1^J & \overline{q_0^J} = q_0 = 0 \end{cases}$$

I parametri $t_1, t_2 \dots$ rappresentano gli istanti di tempo in corrispondenza dei quali il sistema effettua una transizione “di famiglia”, cioè si sposta da uno stato b_t ad uno stato b_{t+1} tale che:

$$q_{b_t b_{t+1}} = 0$$

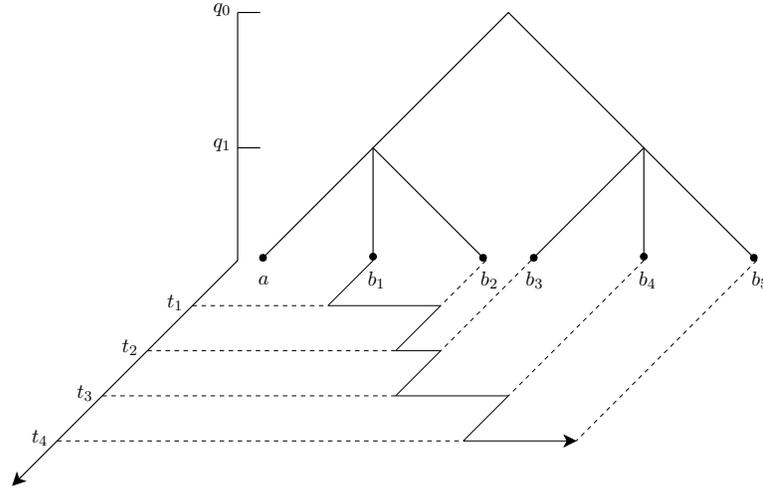


Figura 4.17: Rappresentazione schematica della dinamica in uno spazio delle fasi 1RSB. La funzione di auto-overlap $q(0, t)$ è in grado di apprezzare unicamente le transizioni fra stati appartenenti a famiglie diverse come quella che nel grafico avviene all'istante t_2 .

La natura discontinua della fase 1RSB, dunque, rende più difficile la lettura della dinamica. La quantità $q(0, t)$ non rispecchia in modo esaustivo la deriva del sistema fra gli stati $b_1, b_2 \dots$ dello spazio delle fasi, in quanto non permette di distinguere una transizione fra stati di una stessa famiglia, ma unicamente transizioni tra stati di famiglie diverse (Figura 4.17). L'osservazione di un singolo campione alla volta non rende ragione del comportamento dinamico del sistema e non si presta ad essere usata come strumento per l'estrazione di una scala di tempo. Tuttavia se si prendono in considerazione diversi campioni, effettuando la media sul disordine delle $q_J(0, t)$, si ha che:

$$\overline{q_J(0, t)} = \frac{1}{N_S} \sum_{J=1}^{N_S} \frac{1}{V} \sum_{i=1}^V S_i(0) S_i(t) = \frac{N_0(t)}{N_S} \overline{q_0^J(t)} + \frac{N_1(t)}{N_S} \overline{q_1^J(t)} \quad (4.17)$$

in cui $N_0(t)$ e $N_1(t)$ rappresentano il numero di campioni che all'istante t esibiscono un auto-overlap mediamente uguale ai parametri q_0 e q_1 della soluzione 1RSB. Per tempi lunghi la (4.17) fornisce:

$$\overline{q_J(0, t)} \sim m q_0 + (1 - m) q_1 = \overline{q} \quad (4.18)$$

Affinchè la (4.18) sia verificata, è necessario che la distribuzione della $q_J(0, t)$:

$$P(q(0, t)) = \frac{1}{N_S} \sum_{J=1}^{N_S} \delta(q(0, t) - q_J(0, t)) \quad (4.19)$$

riproduca in tempi lunghi la stessa distribuzione di probabilità della quantità a due repliche $q = \frac{1}{V} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta$ accumulata durante la fase di termalizzazione. Quest'ultima

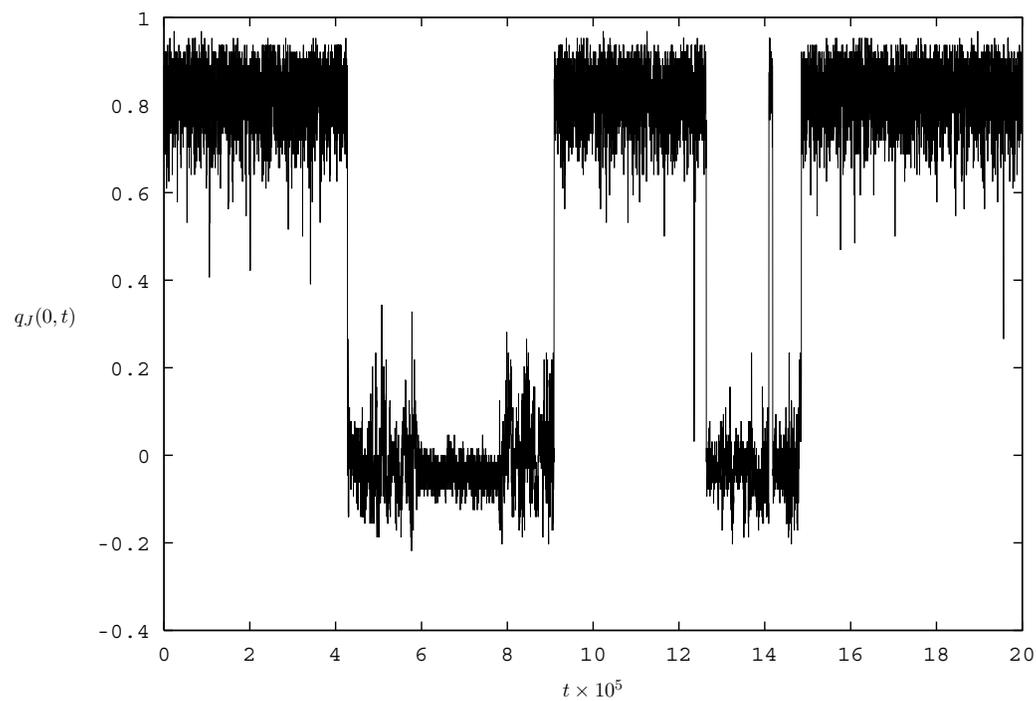


Figura 4.18: Tipico andamento in funzione del tempo della quantità $q_J(0, t)$ relativa ad un singolo campione. La curva è limitata da due livelli corrispondenti (in media) ai parametri q_1 e $q_0 = 0$ della soluzione 1RSB. Il salto da un livello a l'altro avviene in corrispondenza di una transizione del sistema fra stati appartenenti a famiglie diverse.

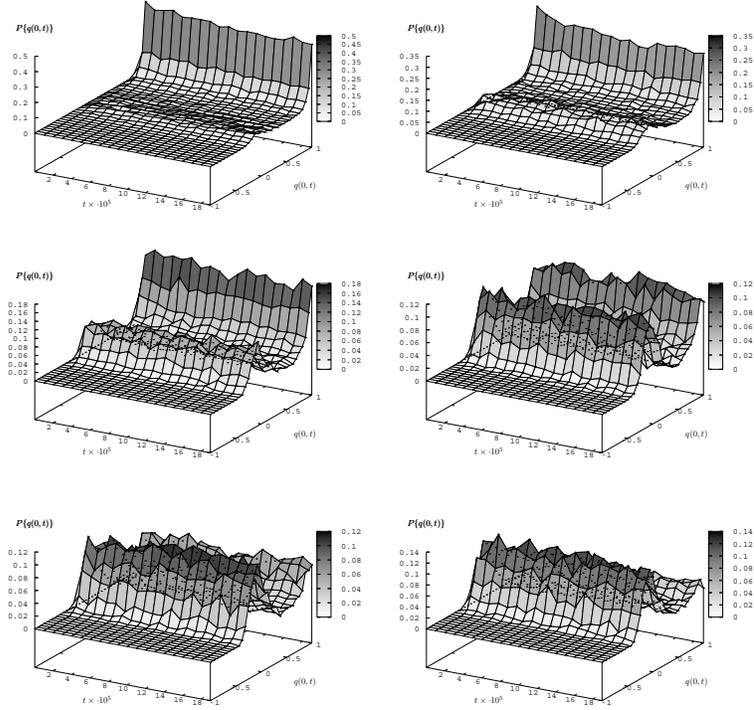


Figura 4.19: Distribuzione di probabilità $P(q(0,t))$ dell'auto-overlap per un sistema di 32 spin a temperatura $T = 0.3$ in funzione del tempo.

considerazione costituisce un elemento di importanza cruciale rispetto all'affidabilità generale dell'intero lavoro numerico: mentre la distribuzione di probabilità (4.15) è ricavata attraverso la media di $T_{MC} \times N_S$ (con $T_{MC} = 2 \cdot 10^5$) osservazioni della quantità $\delta(q - q'_{\alpha\beta})$, la (4.19) è frutto della media di soli N_S termini.

È indispensabile dunque un minuzioso controllo della struttura indotta dalla (4.19), in modo tale da assicurarsi che la statistica generata dal campionamento del disordine possa riprodurre nel modo più accurato possibile l'effettiva distribuzione di probabilità $P(q)$ del sistema all'equilibrio. Ovviamente affinché questo avvenga è di primaria importanza che alla fine della prima fase di simulazione i campioni siano ben termalizzati, di modo che lo spazio delle configurazioni che essi si troveranno ad attraversare durante la dinamica sia effettivamente quello rappresentato in Figura 4.17 e non piuttosto un paesaggio dotato di una morfologia ancora incompleta. A tale scopo può essere utile un esame della distribuzione di probabilità $P(q(0,t))$ in funzione del tempo (Figura 4.19). Confrontando l'auto-overlap $q(0,t)$ con la quantità \overline{q} di natura statica si può definire infine la quantità connessa:

$$q_c(0,t) = \overline{q(0,t) - \langle q \rangle}$$

Quando detto in precedenza circa il valore asintotico di $q(0, t)$, fa sì che $q_c(0, t) \rightarrow 0$ per tempi $t \gg 0$, proprietà questa che rende il parametro connesso $q_c(0, t)$ particolarmente indicato per l'estrapolazione di un tempo caratteristico τ attraverso il quale analizzare il comportamento di scala del modello.

4.8 $q_c(0, t)$ e la scala di tempo di correlazione τ

I grafici in Figura 4.20 mostrano l'andamento in funzione del tempo della quantità connessa $q_c(0, t)$, misurata sui campioni a disposizione in corrispondenza delle tre temperature $T = 0.42, 0.48$ e 0.54 . Come si vede quando ci si avvicina alla temperatura critica ($T_c \simeq 0.65$) i dati diventano più confusi. Del resto alle temperature più basse la dinamica è straordinariamente lenta e risulta difficile apprezzare il decadimento delle curve sperimentali entro gli intervalli di tempo considerati.

L'estrapolazione della scala di tempo τ può essere effettuata calcolando dai dati in Figura 4.20 il tempo necessario affinché l'auto-overlap $q_c(0, t)$ si riduca ad una frazione $x < 1$ del proprio valore iniziale. Quest'ultima operazione è stata preceduta da un'interpolazione delle curve $q_c(0, t)$ con splines cubiche naturali, in modo da disporre di una funzione continua della variabile t che non risentisse del campionamento introdotto nella fase di misura. D'altra parte, visto il profilo discontinuo della $q_J(0, t)$ relativa ad un singolo campione (vedi Figura 4.18), risulta inevitabile che la curva $q_c(0, t)$ ottenuta attraverso la media sul disordine presenti un comportamento regolare nel complesso, ma ricco di irregolarità e piccole variazioni nei dettagli. Per questo motivo l'equazione:

$$q_c(0, \tau_x) = xq_c(0, 0)$$

da cui si ricava la scala di tempo τ_x presenterà in generale un numero $m \geq 1$ di soluzioni. Ipotizzando che tali soluzioni $\tau_x^1, \tau_x^2 \dots \tau_x^m$ siano distribuite in modo sostanzialmente simmetrico attorno alla vera soluzione τ_x , corrispondente al caso in cui $N_S \rightarrow \infty$, si potrà ricavare una stima di τ_x attraverso la media:

$$\tau_x \simeq \overline{\tau_x} = \frac{1}{m} \sum_i \tau_x^i$$

Gli errori introdotti attraverso questa procedura possono essere valutati contemporaneamente a quelli dovuti alle fluttuazioni sui campioni (generalmente più grandi) per mezzo del metodo *jackknife*. Suddividendo in campioni corrispondenti ad ogni volume in 20 blocchi *jackknife* e procedendo nel modo descritto nel §3.6, sono stati ottenuti i grafici in Figura 4.21 corrispondenti rispettivamente ai casi $\{T = 0.42, x = 3/4\}$, $\{T = 0.48, x = 2/3\}$ e $\{T = 0.54, x = 1/3\}$.

Come si vede dai grafici, il profilo in scala logaritmica presenta un andamento sostanzialmente lineare. Fittando i dati con il modello:

$$\tau_x = A \exp(V^\varepsilon)$$

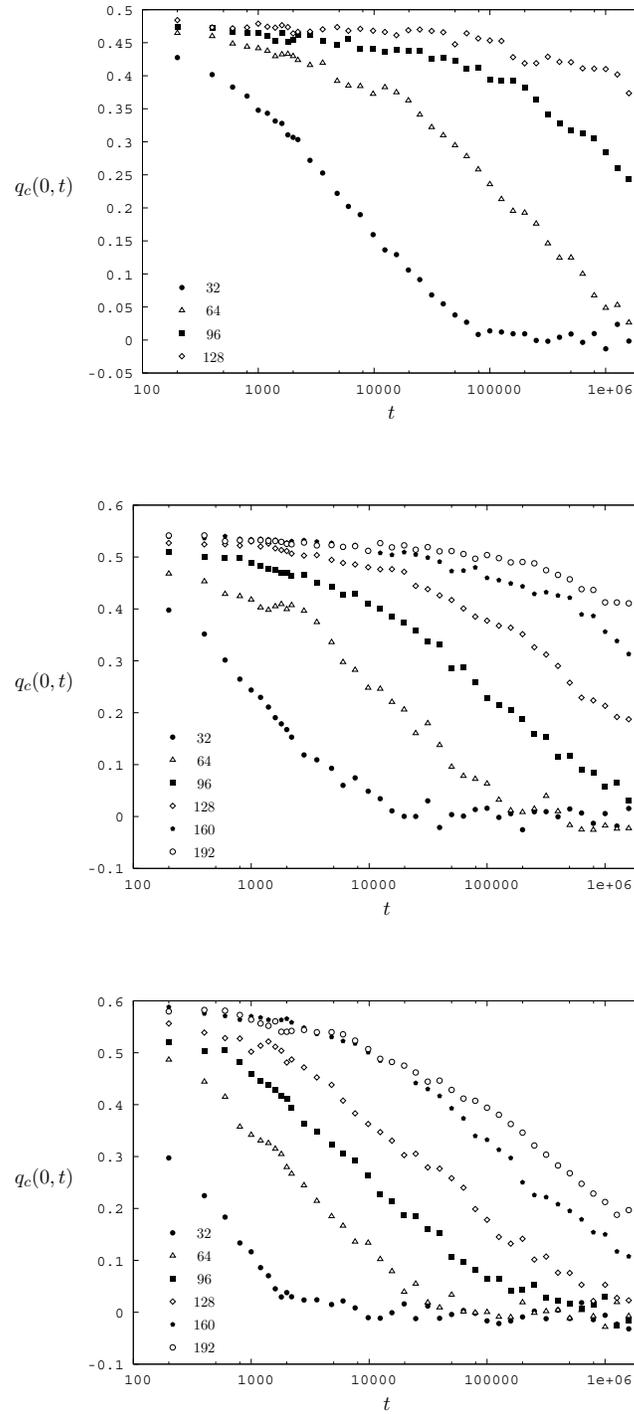


Figura 4.20: Auto-overlap connesso $q_c(0, t)$ in funzione del tempo in corrispondenza delle temperature $T = 0.42, 0.48$ e 0.54 .

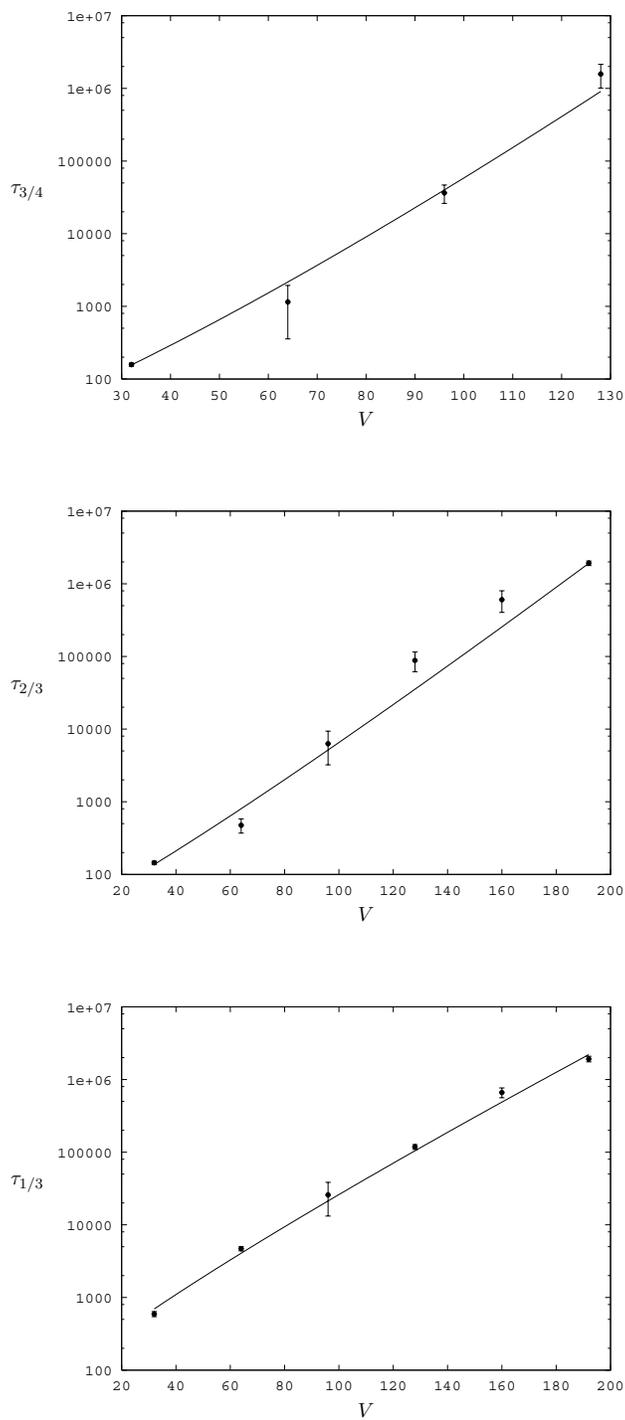


Figura 4.21: Scala di tempo τ_x estrapolata dalle curve $q_c(0, t)$ per le temperature $T = 0.42, 0.48$ e 0.54 in corrispondenza dei rapporti $x = \frac{3}{4}, \frac{2}{3}$ e $\frac{1}{3}$ rispettivamente.

sono stati ricavati i seguenti valori:

$$\tau_{3/4} = 1.19 \pm 0.08 \quad (4.20a)$$

$$\tau_{2/3} = 1.10 \pm 0.02 \quad (4.20b)$$

$$\tau_{1/3} = 0.879 \pm 0.002 \quad (4.20c)$$

compatibili con il risultato $\varepsilon \sim 1$ di Ioffe e Lopatin [44], discusso nel Capitolo 2. È importante notare che la stima numerica dell'esponente ε costituisce un problema estremamente delicato ed inevitabilmente più arduo rispetto a quello del calcolo degli esponenti critici, poichè al posto di un comune andamento a potenza, in questo caso è necessario fittare l'esponenziale di un andamento a potenza. Se l'intervallo di variabilità di τ comprende ad esempio cinque ordini di grandezza (più che accettabili per un fit a potenza) il suo logaritmo occupa appena metà decade, privando in tal modo il fit di un adeguato supporto numerico.

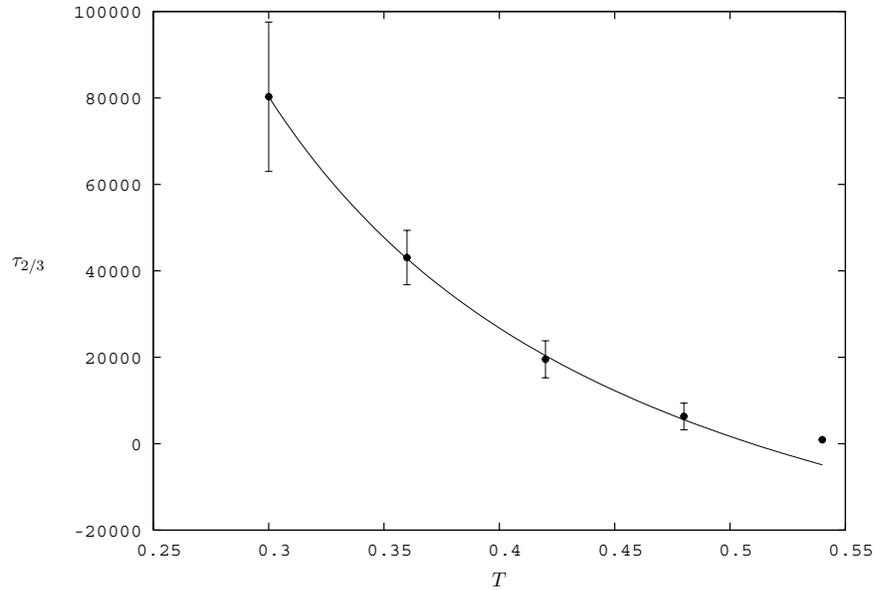


Figura 4.22

In Figura 4.22 è raffigurato, infine, l'andamento del tempo $\tau_{2/3}$ ricavato in un sistema di 96 spin in funzione della temperatura. L'andamento dei punti sperimentali obbedisce in modo soddisfacente ad una legge di Arrhenius della forma $\exp(\frac{A}{T})$ con $A = 0.37 \sim T_c - T$.

4.9 Conclusioni

Quanto esposto nei paragrafi precedenti costituisce il resoconto dello studio numerico del modello di campo medio di un vetro di spin a $p = 3$ interazioni. La prima parte del lavoro riporta i risultati relativi alle principali grandezze termodinamiche del sistema all'equilibrio: densità di energia, calore specifico, parametro d'ordine di equilibrio e distribuzione di probabilità dell'overlap. Tali risultati sanciscono una soddisfacente conferma delle previsioni analitiche discusse nel Capitolo 1 in virtù delle quali, in corrispondenza della temperatura $T \simeq 0.65$, il sistema presenta una transizione di fase del second'ordine con variazione continua delle grandezze termodinamiche e rottura discontinua della simmetria di replica. Lo schema di rottura 1RSB, in particolare, si manifesta in modo eloquente anche durante l'evoluzione dinamica dei campioni all'equilibrio (vedi Figura 4.18), in occasione della quale il sistema si presenta intrappolato fra due livelli di auto-overlap corrispondenti (in media) ai parametri $q_0 = 0$ e q_1 che nell'ambito della soluzione analitica contraddistinguono le due famiglie di stati dell'albero ultrametrico.

Lo studio dei parametri OPF mostra con chiarezza la presenza di fluttuazioni dei parametri d'ordine nella fase di bassa temperatura e conferma quanto già notato in precedenza circa la peculiarità del rapporto di Binder nei sistemi dotati di una fase di bassa temperatura 1RSB.

Dallo studio del comportamento di scala dei tempi di rilassamento dell'auto-overlap, presentato nella seconda parte del Capitolo 4, si è potuto mettere in luce l'esistenza di una dipendenza lineare della quantità $\log \tau$ dal volume V del sistema simulato, in accordo con quanto predetto da Ioffe e Lopatin per mezzo dell'approccio dinamico discusso nel Capitolo 2. D'altra parte, una valutazione accurata dell'esponente di scala ε , costituisce un'impresa ancor più ardua che nel caso dei sistemi in cui la simmetria di replica è rotta in modo continuo nella fase di bassa temperatura. La natura discontinua della transizione impedisce ad esempio di valutare la scala di tempo campione per campione durante il corso della simulazione, introducendo in tal modo la necessità di fare appello a tecniche di valutazione più sofisticate della semplice osservazione diretta che espongono i dati numerici al rischio contaminazione da parte di eventuali errori sistematici.

Oltretutto, la possibilità di riprodurre la distribuzione degli stati nello spazio delle fasi unicamente attraverso la statistica dei campioni (4.17), impone l'osservazione di un numero elevato di realizzazioni del disordine rendendo l'analisi dei reticoli più voluminosi un impegno estremamente dispendioso dal punto di vista computazionale.

Misurando l'auto-overlap, infine, si possono apprezzare solamente le transizioni del sistema tra famiglie diverse di stati, mentre le transizioni fra stati di una stessa famiglia, associate verosimilmente all'esistenza di scale di tempo più brevi, risultano inevitabilmente escluse da questa descrizione. Questo problema riflette in qualche modo il limite *ab initio* della teoria di Lopatin e Ioffe di riprodurre solo i processi in cui sono coinvolte le barriere energetiche più alte (le stesse che separano gli stati meno sovrapposti). Una rappresentazione esaustiva del paesaggio delle fasi che riproduca con la stessa chiarezza

i processi dinamici lenti e quelli più veloci costituisce tutt'ora un problema aperto sia sul piano analitico che su quello computazionale.

Ringraziamenti

Il lavoro che ha condotto alla realizzazione di questa tesi non sarebbe stato possibile senza l'aiuto dei miei insegnanti e dei miei amici. Se i primi, Enzo Marinari ed Alain Billoire, mi hanno sostenuto, ispirato e dato fiducia durante quest'ultimo anno di università, lo stesso hanno fatto i secondi. Senza l'aiuto di entrambi queste pagine sarebbero rimaste vuote. Un ringraziamento particolare va ai miei *fratelli* di *@ntidoto*: Zoom, Zio Ciccio, Panda, Celo, Pancillotto e Franko. Insieme abbiamo costruito la cosa più bella che io abbia mai realizzato nella mia vita. Se per un po' le nostre strade resteranno divise, ciò che mi permetterà di andare avanti sarà unicamente il desiderio di riunirle e continuare il mio cammino insieme a loro. Ringrazio i Gemini Paradox - Mizio, Walter, Francesco, Valentino e Gigi (che per me rimmarrà sempre uno del gruppo) per aver suonato insieme a me la colonna sonora di questi anni. Nicola e Alessio, per avermi insegnato che i problemi della fisica sono più gradevoli se dibattuti davanti ad un piatto di pappardelle al cinghiale ed un buon bicchiere di Falesco. I gloriosi Scamuffi di Colli Aniene, con i quali ho condiviso indimenticabili domeniche di calcio spettacolo. Il Ciccio e tutti i vecchi amici senza i quali la strada che mi ha portato dove sono ora sarebbe stata diversa è più difficile.

L'intero lavoro di tesi è dedicato infine ai miei genitori e a mio fratello Andrea. Grazie a loro ho imparato l'analogia fra il "sostenere" e il "sopportare", ma soprattutto ho capito che, come avviene nei vetri di spin, tutto ciò che accade è frutto di conflitti e cooperazione e che tutto ciò che siamo è perchè lo siamo insieme.

Tesine

1. Nobel lecture of J. Franck and G. Hertz about the transformation of kinetic energy of free electrons into excitation energy of atoms by impacts, in the light of Bohr's theory of atoms.

Relatore: Maria Grazia Ianniello

2. Datazione con il metodo del radiocarbonio dell'ultima transizione glaciale-interglaciale

Relatore: Marisa Alessio

Bibliografia

- [1] K. H. Fischer, *Theory of spin glasses: susceptibility and specific heat in a magnetic field*, Solid State Communn. **18**, 1515 (1976).
- [2] V. Cannella e J. H. Mydosh, *Magnetic ordering in gold-iron alloys.*, Phys. Rev. B **6**, 4220 (1972).
- [3] L. E. Wenger and P. H. Keesom, *Calorimetric investigation of a spin-glass alloy: CuMn*, Phys. Rev. B **13**, 4053 (1976).
- [4] P.W. Anderson, B. I. Halperin e C.M. Varma, *Anomalous low-temperature thermal properties of glasses and spin-glasses*, Phil. Mag. **25**, 1 (1972).
- [5] S. Nagata, P. H. Keesom e H. R. Harrison *Low-dc-field susceptibility of CuMn spin glass*, Phys. Rev. B **19**, 1633 (1979).
- [6] S. F. Edwards e P. W. Anderson, *Theory of spin glasses*, J. Phys. F **5**, 965 (1975).
- [7] K. Jonason, E. Vincent, J. Hammann, J. P. Bouchaud and P. Nordblad, *Memory and chaos effects in spin glasses*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3243 (1998), cond-mat/9806134.
- [8] G. Parisi, *Infinite number of order parameters for spin-glasses*, Phys. Rev. Lett. **43**, 1754 (1979).
- [9] G. Parisi, *The order parameter for spin glasses: a function on the interval 0 – 1*, J. Phys. A **13**, 1101 (1980).
- [10] G. Parisi, *A sequence of approximated solutions to the S-K model for spin glasses*, J. Phys. A **13**, L115 (1980).
- [11] G. Parisi, *Magnetic properties of spin glasses in a new mean field theory*, J. Phys. A **13**, 1887 (1980).
- [12] A. Crisanti e H.J. Sommers, *The spherical p-spin interaction spin glass model: the statics*, Z. Phys. B **87**, 341 (1992).
- [13] A. Crisanti, H. Horner e H.J. Sommers, *The spherical p-spin interaction spin glass model: the dynamics*, Z. Phys. B **92**, 257 (1993).

- [14] A. Crisanti e H.J. Sommers, *Thouless-Anderson-Palmer approach to the spherical p -spin spin glass model*, J. Phys. I France **5**, 805 (1995), [cond-mat/9406051](#).
- [15] L. F. Cugliandolo e J. Kurchan, *Analytical solution of the off-equilibrium dynamics of a long range spin-glass model*, Phys. Rev. Lett. **71**, 173 (1993), [cond-mat/9303036](#).
- [16] B. Derrida, *Random energy model: limit of a family of disordered models*, Phys. Rev. Lett. **45**, 79 (1980).
- [17] B. Derrida, *Random energy model: an exactly solvable model of disordered systems*, Phys. Rev. B **24**, 2613 (1981).
- [18] D.J. Gross e M. Mezard, *The simplest spin-glass*, Nucl. Phys. **B240**, 431 (1984).
- [19] E. Gardner, *Spin glasses with p -spin interaction*, Nucl. Phys. B **257**, 747 (1985).
- [20] J. R. L. de Almeida e D. J. Thouless, *Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model*, J. Phys. A **11**, 983 (1978).
- [21] G. Parisi, *Glasses, replicas and all that*, Lectures given at the les Houches 2002 summer school (2002), [cond-mat/0301157](#).
- [22] A. Cavagna, J. P. Garrahan e I. Giardina, *Quenched complexity of the mean-field p -spin spherical model with external magnetic field*, J. Phys. A **32**, 711 (1999), [cond-mat/9807222](#).
- [23] A. Cavagna, I. Giardina, M. Mezard e G. Parisi, *On the formal equivalence of the TAP and thermodynamic methods in the SK model*, J. Phys. A **36**, 1175 (2003), [cond-mat/0210665](#).
- [24] A. Crisanti, L. Leuzzi, G. Parisi e T. Rizzo *Complexity of the Sherrington-Kirkpatrick model in the annealed approximation*, Phys. Rev. B **68**, 174401 (2003), [cond-mat/0307082](#).
- [25] A. Crisanti, L. Leuzzi, G. Parisi e T. Rizzo *Spin-glass complexity*, Phys. Rev. Lett. **92**, 127203 (2004), [cond-mat/0307543](#).
- [26] A. Crisanti, L. Leuzzi e T. Rizzo *Complexity in mean-field spin-glass models: Ising p -spin* (2004), [cond-mat/0406649](#).
- [27] D. J. Thouless, P. W. Anderson and R. G. Palmer, *Solution of 'solvable model of a spin glass'*, Phil. Mag. **35**, 593 (1977).
- [28] R. Monasson, *The structural glass transition and the entropy of the metastable states*, Phys. Rev. Lett. **75**, 2847 (1995), [cond-mat/9503166](#).

- [29] H. Rieger, *The number of solutions of the Thouless-Anderson-Palmer equations for p-spin interaction spin glasses*, Phys. Rev. B **46**, 14655 (1992), cond-mat/9208015.
- [30] A. J. Bray e M. A. Moore, *Metastable state in spin glasses*, J. Phys. C **13**, L469 (1980).
- [31] A. Montanari e F. Ricci-Tersenghi, *On the nature of the low-temperature phase in discontinuous mean-field spin glasses*, Eur. Phys. J. B **33**, 339 (2003), cond-mat/0301591.
- [32] H. Sompolinsky e A. Zippelius, *Relaxational dynamics of the Edwards-Anderson model and the mean-field theory of spin-glasses*, Phys. Rev. B **25**, 6860 (1982).
- [33] C. De Dominicis, *Dynamics as a substitute for replicas in systems with quenched random impurities*, Phys. Rev. B **18**, 4913 (1978).
- [34] C. De Dominicis e L. Peliti, *Field-theory renormalization and critical dynamics above T_c : helium, antiferromagnets and liquid-gas systems*, Phys. Rev. B **18**, 353 (1978).
- [35] A. Billoire, L. Giomi e E. Marinari, *Correlation time scales of the mean field 3-spin spin glass model* (in preparazione).
- [36] T. R. Kirkpatrick e D. Thirumalai, *Dynamics of the structural glass transition and the p-spin interaction spin-glass model*, Phys. Rev. Lett. **58**, 2091 (1987).
- [37] T. R. Kirkpatrick e D. Thirumalai, *p-spin interaction spin-glass models: connections with the structural problem*, Phys. Rev. B **36**, 5388 (1987).
- [38] P. C. Martin, E. D. Siggia e H. A. Rose, *Statistical dynamics of classical systems*, Phys. Rev. A **8**, 423 (1973).
- [39] A. Cavagna, I. Giardina e G. Parisi, *Structure of metastable states in spin glasses by means of a three replica potential*, J. Phys. A **30**, 4449 (1997), cond-mat/9702069.
- [40] L.B. Ioffe e D. Sherrington, *Distribution of barriers in spin glasses*, Phys. Rev. B **57**, 7666 (1998), cond-mat/9709270.
- [41] L.B. Ioffe, *Quasiequilibrium states of spin glasses*, Phys. Rev. B **38**, 5181 (1988).
- [42] L. B. Ioffe e A. V. Lopatin *Istantons in the Langevin dynamics: an application to spin glasses*, Phys. Rev. B **60**, 6412 (1999), cond-mat/9904219.
- [43] L. F. Cugliandolo e P. Le Doussal, *Large time nonequilibrium dynamics of a particle in a random potential*, Phys. Rev. E **53**, 1525 (1996), cond-mat/95051121.
- [44] L. B. Ioffe e A. V. Lopatin, *Barriers in the p-spin interacting spin-glass model: the dynamical approach*, Phys. Rev. Lett. **84**, 4208 (2000), cond-mat/9907135.

- [45] G. Parisi, *La fisica al giorno d'oggi*, URL <http://chimera.roma1.infn.it/GIORGIO/indexhome.htm>.
- [46] M. E. J. Newman e G. T. Barkema, *Monte Carlo methods in statistical physics* (Oxford University Press, New York, 2002).
- [47] E. Marinari, G. Parisi e J. J. Ruiz-Lorenzo, *Numerical simulation of spin glass systems*, in *Spin glass and random field*, edited by A. P. Young (World-Scientific, Singapore, 1998), p. 59, `cond-mat/9701016`.
- [48] A. D. Sokal, *Monte Carlo methods for the self-avoiding walk*, in *Monte Carlo and molecular dynamics simulations in polymer science*, edited by K. Binder (Oxford University Press, New York, 1995), `hep-lat/9405016`.
- [49] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, *Equations of state calculations by fast computing machine*, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [50] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery, *Numerical recipes: the art of scientific computing* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002), URL <http://www.nr.com>.
- [51] K. Binder e A. P. Young, *Spin glasses: experimental facts, theoretical concepts, and open questions*, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986).
- [52] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, *Theory of dynamic critical phenomena*, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
- [53] F. Ritort, *Numerical methods in glassy systems*, Lecture given at the Trieste 1997 summer school on *Statistical physics of frustrated systems* (1997), URL http://www.ictp.trieste.it/~pub_off/sci-abs/smr1003/index.html.
- [54] E. Marinari, *Optimized Monte Carlo methods*, in *Advances in computer simulations*, edited by J. Kertesz e I. Kondor (Springer-Verlag, Berlino, 1998), Lectures given at the Budapest 1996 Physics Summer School, p. 50, `cond-mat/9612010`.
- [55] R. H. Swendsen e J. S. Wang, *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [56] U. Wolf, *Collective Monte Carlo updating for spin systems*, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [57] U. H. E. Hansmann e Y. Okamoto, *Monte Carlo simulations in generalized ensemble: multicanonical algorithm versus simulated tempering*, Phys. Rev. E **54**, 5863 (1996).

- [58] U. H. E. Hansmann e Y. Okamoto, *Generalized-ensemble Monte Carlo method for systems with rough energy landscape*, Phys. Rev E **56**, 2228 (1997), cond-mat/9710306.
- [59] U. H. E. Hansmann, *Generalized ensembles: a new way of simulating proteins*, Physica A **254**, 15 (1998).
- [60] A. P. Lyubartsev, A. A. Martsinovski, S. V. Shevkunov e P. N. Vorontsov-Velyaminov, *New approach to Monte Carlo calculation of the free energy: method of expanded ensembles*, J. Chem. Phys. **96**, 1776 (1992).
- [61] W. Janke, *Multicanonical Monte Carlo simulations*, Physica A **254**, 164 (1998).
- [62] K. Hukushima e K. Nemoto, *Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulation*, J. Phys. Soc. Japan **65**, 1604 (1996), cond-mat/95051121.
- [63] E. Marinari e G. Parisi, *Simulated tempering: a new Monte Carlo scheme*, Europhys. Lett. **19**, 451 (1992), hep-lat/9205018.
- [64] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt e M. P. Vecchi, *Optimization by simulated annealing*, Science **220**, 671 (1983).
- [65] Jun S. Liu, *Monte Carlo strategies in Scientific Computing* (Springer-Verlag, New York, 2001).
- [66] G. Iori, E. Marinari e G. Parisi, *Random self-interacting chains: a mechanism for protein folding*, J. Phys. A **24**, 5349 (1991).
- [67] K.K. Bhattacharya e J.P. Sethna, *Multicanonical methods vs. molecular dynamics vs. Monte Carlo: comparison for Leonard-Jones glasses*, Phys. Rev. E **57**, 2553 (1998), cond-mat/9707013.
- [68] E. Elfron, *Computers and the theory of statistics: thinking the unthinkable*, SIAM Review **21**, 460 (1979).
- [69] H. Flyvbjerg, *Error estimates on averages of correlated data*, in *Advances in computer simulations* (Springer, Budapest, 1997), vol. 501 of *Lecture note in physics*, p. 88.
- [70] N. D. Mackenzie e A. P. Young, *Lack of ergodicity in infinite-range Ising spin-glass*, Phys. Rev. Lett. **49**, 301 (1982).
- [71] N. D. Mackenzie e A. P. Young, *Statics and dynamics of the infinite-range Ising spin glass model*, J. Phys. C **16**, 5321 (1983).
- [72] H. Sompolinsky, *Time-dependent order parameters in spin-glasses*, Phys. Rev. Lett. **47**, 935 (1981).

- [73] S. Kirkpatrick e A. P. Young, *Low-temperature behavior of the infinite-range Ising spin-glass: exact statistical mechanics for small samples*, Phys. Rev. B **25**, 440 (1982).
- [74] A. Billoire e E. Marinari, *Correlation timescales in the Sherrington-Kirkpatrick model*, J. Phys. A **34**, L727 (2001), cond-mat/01011177.
- [75] D. Vertechi e M. Virasoro, *Energy barriers in SK spin glass models*, J. Phys. (France) **50**, 2325 (1989).
- [76] M. Picco, F. Ritort and M. Sales, *Order parameter fluctuations (OPF) in spin glasses: Monte Carlo simulations and exact results for small sizes*, Eur. J. Phys. B **19**, 565 (2001), cond-mat/0009292.
- [77] R. N. Bhatt e A. P. Young, *Numerical studies of Ising spin glasses in two, three, and four dimensions*, Phys. Rev. B **37**, 5606 (1988).
- [78] E. Marinari, C. Naitza, F. Zuliani, G. Parisi e M. Picco, *A general method to determine replica symmetry breaking transitions*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1698 (1998), cond-mat/9802309.
- [79] F. Guerra, *About the overlap distribution in mean field spin glass models*, Int. J. Mod. Phys. B **10**, 1675 (1996), URL <http://romagtc.roma1.infn.it/papers/lavori/umezawa.ps>.
- [80] F. Ritort and M. Sales, *A conjectured scenario for order parameter fluctuations in spin glasses*, J. Phys. A **33**, 6505 (2000), cond-mat/0003336.
- [81] K. Hukushima e H. Kawamura, *Replica-symmetry-breaking transition in finite-size simulations*, Phys. Rev. E **62**, 3360 (2000), cond-mat/0003226.