

Riepilogo sulla Meccanica Statistica Classica di Boltzmann-Gibbs (BG)





 $\langle f \rangle \equiv \frac{\int d^{3N} p \, d^{3N} q \, f(p,q) \, \rho(p,q)}{\int d^{3N} p \, d^{3N} q \, \rho(p,q)}$

Ensemble Canonico (T,V,N fissati)





Funzione di Partizione: Densità di Ensemble:

$$Q_N(V,T) \equiv \int \frac{d^{3N} p \, d^{3N} q}{N! h^{3N}} \, e^{-\beta \mathcal{H}(p,q)}$$
$$\rho(p,q) = e^{-\mathcal{H}(p,q)/kT}$$

Energia Libera:

 $A(V,T) = -\beta^{-1}\log Q_N(V,T)$

Funzione di
Partizione: $\mathcal{Z}(z,V,T) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N(V,T)$ Densità di
Ensemble: $\rho(p,q,N) = \frac{z^N}{N!h^{3N}}e^{-\beta PV - \beta \mathcal{H}(p,q)}$

Energia Libera:

$$A(\overline{N},V,T) = kT\overline{N}\log z - kT\log \mathcal{Z}(z,V,T)$$

Ensemble Microcanonico (E,V,N fissati; equiprobabilità dei microstati)

Funzione di Partizione:

Densità di Ensemble:

 $\Gamma(E) \equiv \int_{E < \mathcal{H}(p,q) < E + \Delta} d^{3N} p \, d^{3N} q$ $\rho(p,q) = \text{ costante}$

Entropia: $S(E, V) \equiv k \log \Gamma(E)$

L'Hamiltonian Mean Field (HMF) model è un modello XY a rotatori planari (equivalenti a pendoli rigidi accoppiati, di massa e modulo unitari) con interazione a range infinito, definito dalla seguente hamiltoniana classica nelle N coppie di variabili canoniche $\{\theta_i, p_i\}$: N gradi di libertà



M. Antoni

$$H = K + V = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$$



Antoni and Ruffo PRE 52 (1995) 2361



1 grado di libertà

Se m=g=L=1:
$$H = \frac{p_{\theta}^{2}}{2} + (1 - \cos \theta)$$

L'Hamiltonian Mean Field (HMF) model è un modello XY a rotatori planari (equivalenti a pendoli rigidi accoppiati, di massa e modulo unitari) con interazione a range infinito, definito dalla seguente hamiltoniana classica nelle N coppie di variabili canoniche $\{\theta_i, p_i\}$: N gradi di libertà

8

M. Antoni

$$H = K + V = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$$



Antoni and Ruffo PRE 52 (1995) 2361



L'Hamiltonian Mean Field (HMF) model è un modello XY a rotatori planari (equivalenti a pendoli rigidi accoppiati, di massa e modulo unitari) con interazione a range infinito, definito dalla seguente hamiltoniana classica nelle N coppie di variabili canoniche $\{\theta_i, p_i\}$: N gradi di libertà



 $H = K + V = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$





Generalizzando il pendolo rigido, il modello HMF può essere visto come un sistema di particelle completamente interagenti (mean field) in moto senza collisioni su un cerchio unitario...



L'Hamiltonian Mean Field (HMF) model è un modello XY a rotatori planari (equivalenti a pendoli rigidi accoppiati, di massa e modulo unitari) con interazione a range infinito, definito dalla seguente hamiltoniana classica nelle N coppie di variabili canoniche $\{\theta_i, p_i\}$: N gradi di libertà



M. Antoni

$$H = K + V = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$$





Generalizzando il pendolo rigido, il modello HMF può essere visto come un sistema di particelle completamente interagenti (mean field) in moto senza collisioni su un cerchio unitario...

...oppure, facendo corrispondere ad ogni particella la punta di una freccia, può essere interpretato anche come un reticolo di spin accoppiati.



L'importanza di HMF sta nel fatto che il suo comportamento sembra essere paradigmatico di una ampia classe di sistemi con interazioni a lungo range, come per esempio sistemi nucleari o astrofisici (self-gravitating systems), e riveste un interesse particolare per lo studio della multiframmentazione e dei clusters atomici.

L'Hamiltonian Mean Field (HMF) model è un modello XY a rotatori planari (equivalenti a pendoli rigidi accoppiati, di massa e modulo unitari) con interazione a range infinito, definito dalla seguente hamiltoniana classica nelle N coppie di variabili canoniche $\{\theta_i, p_i\}$: N gradi di libertà



 $H = K + V = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$





L'Hamiltonian Mean Field (HMF) model è un modello XY a rotatori planari (equivalenti a pendoli rigidi accoppiati, di massa e modulo unitari) con interazione a range infinito, definito dalla seguente hamiltoniana classica nelle N coppie di variabili canoniche $\{\theta_i, p_i\}$: N gradi di libertà



 $H = K + V = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$





L.Boltzmann



hmf-unitcircle.nlogo



hmf-muspace.nlogo





hmf-unitcircle.nlogo

hmf-muspace.nlogo



Prendiamo come parametro d'ordine il modulo M della Magnetizzazione così definita:





Prendiamo come parametro d'ordine il modulo M della Magnetizzazione così definita:





Prendiamo come parametro d'ordine il modulo M della Magnetizzazione così definita:





Prendiamo come parametro d'ordine il modulo M della Magnetizzazione così definita:





Prendiamo come parametro d'ordine il modulo M della Magnetizzazione così definita:



Per risolvere il modello HMF in Ensemble Canonico conviene ovviamente lavorare nello spazio Γ di Gibbs, che in questo caso ha N gradi di libertà e dunque 2N dimensioni:



Partiamo dalla funzione di partizione canonica del modello:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^{N} dp_k \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{k=1}^{N} d\theta_k e^{-\beta H}$$

$$\beta = \frac{1}{T} (k_B = 1) \qquad H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$$

T = temperatura



Partiamo dalla funzione di partizione canonica del modello:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^{N} dp_k \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{k=1}^{N} d\theta_k e^{-\beta H} \qquad \qquad \beta = \frac{1}{T} (k_B = 1) \qquad \qquad H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)] \qquad \qquad T = \text{temperatura}$$

$$Z_{K} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^{N} dp_{k} e^{-\frac{\beta}{2}\sum_{i} p_{i}^{2}} = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}}$$
$$Z_{V} = C \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{k=1}^{N} d\theta_{k} e^{-\frac{\beta}{2N}\sum_{ij}\cos(\theta_{i}-\theta_{j})} = C \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{k=1}^{N} d\theta_{k} e^{-\frac{\beta}{2N}\sum_{ij}\bar{S}_{i}}$$
$$\dots \text{con: } C = e^{-\frac{\beta}{2N}}$$

Applicando una trasformazione di Hubbard-Stratonovich (H-S) in 2D alla Z_V si linearizza l'esponente del termine esponenziale nell'integrale:

$$Z_{V} = \frac{C}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{k=1}^{N} d\theta_{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{v} \, e^{-\vec{v}^{2} + \sum_{i} \vec{S}_{i} \cdot [\vec{v} (2\beta/N)^{1/2}]}$$

con: $\vec{v} = (v \cos \theta, v \sin \theta)$

da cui, scambiando l'ordine di integrazione, integrando sugli angoli e sfruttando la sostituzione di variabile $\vec{v} \rightarrow \vec{v}(N/2\beta)$, otterremo:

$$Z_{V} = \frac{NC}{2\pi\beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{v} \, e^{N\left[-\frac{\vec{v}^{2}}{2\beta} + \ln 2\pi I_{o}(\vec{v})\right]}$$

...dove I_k è la funzione di Bessel modificata di ordine k.

Per stimare questo integrale, essendo interessati al limite termodinamico, si può far uso del metodo della steepest-descent. Quest'ultimo richiede che la funzione in parentesi quadre, che chiameremo f(v), abbia un massimo. Per trovarlo basta porre a zero la derivata prima di *f* ottenendo così un'equazione autoconsistente in campo medio per i punti stazionari:

$$w = \frac{I_1}{I_0} (\beta w) \quad ... \text{ dove si è posto: } \vec{w} = \vec{v} / \beta$$

Si può verificare che la *w* coincide con la magnetizzazione M del sistema e che la funzione a secondo membro ha un andamento qualitativamente uguale a quello di una tangente iperbolica, cosicché l'equazione è risolubile graficamente. Si può così vedere che essa ammette soluzioni diverse da zero (quindi con M > 0) solo per β > 2, cioè per T < 0.5, valore che rappresenta dunque la temperatura critica Tc per il modello HMF.

$$M = \frac{1}{N} < \sum_{i=1}^{n} S_i > = \frac{1}{I_0} (v) = \frac{1}{\beta} = w$$

$$y = \frac{I_1}{I_0} (\beta w)$$
beta=3.5
beta=2.5
beta=1.5
beta=1.5

W

 $\rightarrow 1 \xrightarrow{N} \rightarrow I \qquad \gamma$

Termodinamica all'Equilibrio in Ensemble Canonico

Dopo aver verificato che il punto stazionario appena trovato è un massimo per la funzione f (si trova infatti che gli autovalori della matrice hessiana sono entrambi negativi) si può applicare il metodo della steepest-descent alla funzione di partizione totale Z per ricavare la densità di energia libera F:

$$-\beta F = \lim_{N \to \infty} \frac{\ln Z}{N} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\pi}{\beta}\right) - \frac{\beta}{2} + \left[-\beta \frac{\vec{w}^2}{2} + \ln 2\pi I_o(\beta |\vec{w}|)\right]_O$$

dove l'ultimo termine va calcolato nel punto di massimo.

Dalla densità di energia libera è anche possibile ricavare la relazione che lega la densità di energia U alle variabili T ed M, cioè la cosiddetta curva calorica. Infatti si ha:

$$U = <\frac{H}{N} > = \frac{\partial(\beta F)}{\partial\beta} = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2} + \frac{w^2}{2} - w\frac{I_o}{I_1}(\beta w)$$

la quale, poiché w = M, ci dà la curva calorica:

 $U = \frac{T}{2} + \frac{1}{2}(1 - M^2)$

da cui, sostituendo $T=T_c=0.5$ e M=0, si ricava la densità di energia critica: $U_c=0.75$

$$\vec{M} = \frac{1}{N} < \sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i > = \frac{I_1}{I_0}(v) = \frac{v}{\beta} = w$$



Termodinamica all'Equilibrio in Ensemble Canonico

Dopo aver verificato che il punto stazionario appena trovato è un massimo per la funzione f (si trova infatti che gli autovalori della matrice hessiana sono entrambi negativi) si può applicare il metodo della steepest-descent alla funzione di partizione totale Z per ricavare la densità di energia libera F:

$$-\beta F = \lim_{N \to \infty} \frac{\ln Z}{N} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\pi}{\beta}\right) - \frac{\beta}{2} + \left[-\beta \frac{\vec{w}^2}{2} + \ln 2\pi I_o(\beta |\vec{w}|)\right]_o$$

dove l'ultimo termine va calcolato nel punto di massimo.

Dalla densità di energia libera è anche possibile ricavare la relazione che lega la densità di energia U alle variabili T ed M, cioè la cosiddetta curva calorica. Infatti si ha:

$$U = <\frac{H}{N} > = \frac{\partial(\beta F)}{\partial\beta} = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2} + \frac{w^2}{2} - w\frac{I_o}{I_1}(\beta w)$$

la quale, poiché w = M, ci dà la curva calorica:

U =	T	$\frac{1}{-1}$ (1 – M	$(1 - M^2)$
	2	$\frac{1}{2}^{(1-M)}$	

da cui, sostituendo $T=T_c=0.5$ e M=0, si ricava la densità di energia critica: $U_c=0.75$



Meccanica statistica e Termodinamica all'Equilibrio in Ensemble Microcanonico: equivalenza degli Ensemble

Funzione di Partizione Canonica

$$Z(\beta, N) = \int_0^\infty dE \ \omega(E, N) \ \mathrm{e}^{-\beta E}$$

Densità nello Spazio delle Fasi: Funzione di Partizione Microcanonica

$$\omega(E,N) = \int d^N p_i d^N \theta_i \,\,\delta(E-H)$$



Entropia $S(U) = \min_{\beta>0} \max_{y} \left[\beta U + \frac{1}{2} \ln(\frac{2\pi}{\beta}) - \frac{\beta}{2} + \ln(2\pi I_0(y)) - \frac{y^2}{2\beta}\right]$

Meccanica statistica e Termodinamica all'Equilibrio in Ensemble Microcanonico: equivalenza degli Ensemble



Entropia $S(U) = \min_{\beta>0} \max_{y} \left[\beta U + \frac{1}{2} \ln(\frac{2\pi}{\beta}) - \frac{\beta}{2} + \ln(2\pi I_0(y)) - \frac{y^2}{2\beta}\right]$

Dinamica del Modello HMF (simulazioni)





Le equazioni del moto che si ricavano dall'Hamiltoniana del modello HMF possono essere integrate numericamente ad energia costante usando un algoritmo simplettico del 4° ordine. Yoshida , Physica A 150 (1990) 262

Si trova così un buon accordo tra le soluzioni canoniche esatte e le simulazioni microcanoniche all' equilibrio per varie size N del sistema...

Nota: dinamicamente la temperatura viene calcolata per mezzo della sua relazione con l'energia cinetica media $\langle K \rangle$ dei rotatori (teorema di equipartizione): $T - 2 \langle K \rangle$

Anomalie dinamiche e inequivalenza degli Ensemble



1.0 theory 0.8 N=100 N=1000 N=5000 0.6 Order N=2000 M parametei n 4 (a) 0.2 0.0 0.0 ng 1.2 1.4 1.2 1.0 т 0.8 0.6 0.4 0.2 0.0 U.8 1.2 0.4 0.0

Le equazioni del moto che si ricavano dall'Hamiltoniana del modello HMF possono essere integrate numericamente ad energia costante usando un algoritmo simplettico del 4° ordine. Yoshida , Physica A 150 (1990) 262

Si trova così un buon accordo tra le soluzioni canoniche esatte e le simulazioni microcanoniche all' equilibrio per varie size N del sistema...

ma...

Quando il sistema viene fatto partire da condizioni iniziali sufficientemente lontane dall'equilibrio, si osservano molte anomalie dinamiche. In particolare ci concentreremo su un range di energie situate subito sotto il punto critico (0.5 < U < 0.75).

Condizioni iniziali lontane dall' equilibrio: «esplosione cinetica» iniziale



Distribuzione uniforme delle velocità



Tutti gli angoli = 0

M(t=0)=1

$$H = K + V = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)] \quad \blacksquare \quad U = \frac{T}{2} + \frac{1}{2} (1 - M^2)$$

A t=0 tutta l'energia è di tipo cinetico!

La prima anomalia: Calore specifico negativo



In tale regione il calore specifico diventa negativo. Infatti la temperatura decresce, incrementando la densità di energia..

Questo fenomeno è stato osservato nelle reazioni di multiframmentazione nucleare e nei clusters atomici, ma anche in oggetti stellari auto-gravitanti, cioè in sistemi nonestensivi.

Vedi per esempio:

•Thirring, Zeit. Physik 235 (1970) 339

Lynden-Bell, Physica A 263 (1999) 293

•D.H.E.Gross, *Microcanonical Thermodynamics: Phase transitions in Small systems*, World Scientific (2001).

■M. D'Agostino et al, Phys. Lett. B 473 (2000) 279

Schmidt et al, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 1191

Partendo da condizioni iniziali lontane dall'equilibrio con U=0.69, il sistema rimane intrappolato per un certo tempo in *STATI QUASI-STAZIONARI* (QSS) **METASTABILI** dove la temperatura, sempre calcolata come:

 $T = \frac{2 < K >}{N}$

rimane minore di quella prevista dalla curva calorica all'equilibrio ($T_{eq}=0.476$).





Partendo da condizioni iniziali lontane dall'equilibrio con U=0.69, il sistema rimane intrappolato per un certo tempo in *STATI QUASI-STAZIONARI* (QSS) **METASTABILI** dove la temperatura, sempre calcolata come:

 $T = \frac{2 < K >}{N}$

rimane minore di quella prevista dalla curva calorica all'equilibrio ($T_{eq}=0.476$).





Partendo da condizioni iniziali lontane dall'equilibrio con U=0.69, il sistema rimane intrappolato per un certo tempo in *STATI QUASI-STAZIONARI* (QSS) **METASTABILI** dove la temperatura, sempre calcolata come:

 $T = \frac{2 < K >}{N}$

rimane minore di quella prevista dalla curva calorica all'equilibrio ($T_{eq}=0.476$).

e così fà anche la forza F_i agente sull' i-esimo spin, essendo:

$$F_i = -M_x \sin \theta_i + M_y \cos \theta_i$$

Quindi maggiore è N, maggiore è il tempo di vita di questi stati metastabili...



Partendo da condizioni iniziali lontane dall'equilibrio con U=0.69, il sistema rimane intrappolato per un certo tempo in *STATI QUASI-STAZIONARI* (QSS) **METASTABILI** dove la temperatura, sempre calcolata come:

 $T = \frac{2 < K >}{N}$

rimane minore di quella prevista dalla curva calorica all'equilibrio ($T_{eq}=0.476$).



Nel regime QSS la magnetizzazione va a zero con la size N del sistema:



Alla fine, per $N \rightarrow \infty$, la temperatura dei QSS tende al valore limite T_{QSS}= 0.38 e il sistema non raggiunge MAI il regime di equilibrio!



Ordine dei limiti

Le simulazioni mostrano chiaramente che, andando verso il limite termodinamico, diventa cruciale l'ordine in cui vengono presi i due limiti per N infinito e per t infinito...

In generale, cioè, i due limiti non commutano (come invece dovrebbe teoricamente accadere):



Entropia e correlazioni nel μ -space



A.Vlasov (1908-75)

Equazione di Vlasov

$$\frac{\partial f}{\partial t} + p \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\partial V}{\partial \theta} \frac{\partial f}{\partial p} = 0$$

Eq. del trasporto di Boltzmann in assenza di collisioni (introdotta per lo studio di sistemi con correlazioni a lungo raggio, come i plasmi)



Entropia e correlazioni nel μ -space



L'esponente max. di Lyapunov tende a zero nei QSS



Questo scaling può essere ottenuto dalla relazione...

$$\lambda \propto M^{2/3} \propto \left(N^{-1/3}\right)^{1/3} = N^{-1/9}$$

See Latora, Rapisarda, Tsallis Physica A 305 (2002) 129

Distribuzione di probabilità delle velocità non Gaussiana nei QSS



Correlazioni delle velocità



Tutti gli indizi conducono verso verso una Meccanica Statistica generalizzata....



