Università degli Studi di Catania

Alessandro Pluchino

Metastability, Nonextensivity and Glassy Dynamics in a Class of Long Range Hamiltonian Models

Dottorato di Ricerca in Fisica - XVII Ciclo

Discussione Tesi per il conseguimento del titolo

1 Febbraio 2005

Tutor: Prof.A.Rapisarda

E-mail: alessandro.pluchino@ct.infn.it - Group web page: www.ct.infn.it/~cactus

Outline del talk

- Introduzione: Termodinamica e Dinamica del modello HMF
- Calore specifico negativo & Stati Quasi-Stazionari Metastabili
- Dinamica lenta, Diffusione anomala & PDF non gaussiana
- Ruolo delle condizioni iniziali sulla dinamica dei QSS
- Correlazioni, Frustrazione dinamica, Power Law Relaxation & Aging
- Links con la q-statistica generalizzata (non estensiva) di Tsallis
- Weak ergodicity breaking e interpretazione del QSS regime come fase Spin-Glass
- Stati Quasistazionari sotto il punto critico: esempi di Metastabilità in altri Sistemi Complessi.

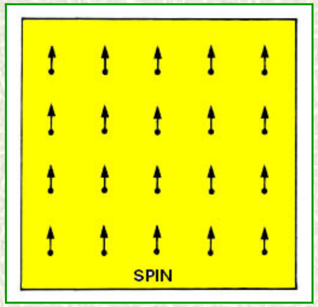
Il modello HMF

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

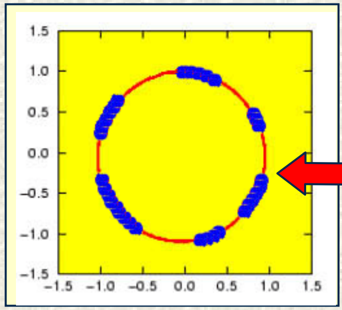
$$H = K + V = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} [1 - \cos(\vartheta_i - \vartheta_j)]$$

Antoni and Ruffo PRE 52 (1995) 2361

L'HMF può essere visto come un semplice reticolo di spin accoppiati…



…o come un sistema di particelle interagenti in moto su un cerchio unitario.



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.

Termodinamica all'Equilibrio

Prendendo come parametro d'ordine il modulo M della magnetizzazione:

$$\vec{M} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\vec{S}_i$$

…essendo il singolo spin (rotatore) definito come:

$$\vec{S}_i = (\cos\vartheta_i, \sin\vartheta_i)$$

la soluzione in ensemble canonico del modello mostra una transizione di fase del secondo ordine, dove si passa da una fase Condensata (ferromagnetica) ad una fase Omogenea (paramagnetica) in funzione della Densità di Energia U (o della temperatura T):

Curva calorica

$$U = \frac{H}{N} = \frac{\partial(\beta F)}{\partial\beta} = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2}\left(1 - M^2\right)$$

Antoni and Ruffo, PRE 52 (1995) 2361

$$F = free\,energy\,density$$

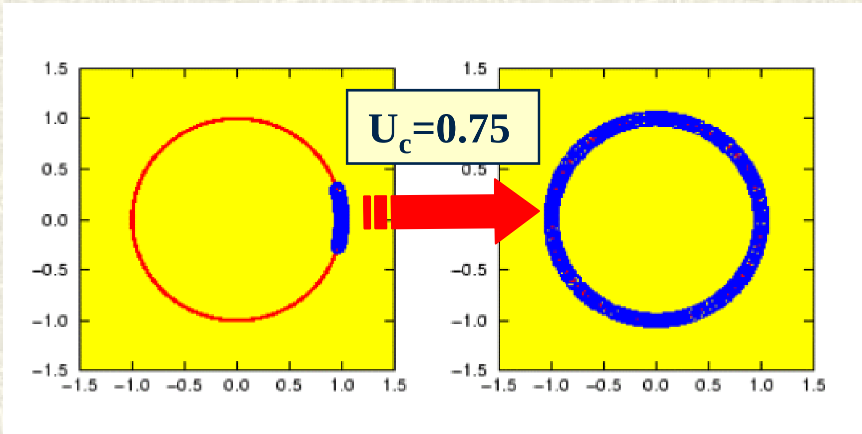
$$\beta = \frac{1}{T} \quad (k_B = 1)$$

$$T = temperature$$

M ~ 1

$U < U_c$

Fase Condensata



M ~ 0

$U > U_c$

Fase Omogenea

Termodinamica all'Equilibrio

Infatti la funzione di partizione canonica del modello:

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

può essere risolta esattamente utilizzando una trasformazione di Hubbard-Stratonovich (H-S) e il metodo della steepest-descent (o metodo di Laplace).

Innanzitutto la Z si fattorizza in un contributo cinetico ed uno potenziale:

$$Z_K = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^{N} dp_k \, e^{-\frac{\beta}{2}\sum_i p_i^2} = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}}$$

$$Z_V = C \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{k=1}^{N} d\theta_k \, e^{-\frac{\beta}{2N}\sum_{ij}\cos(\theta_i - \theta_j)} = C \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{k=1}^{N} d\theta_k \, e^{-\frac{\beta}{2N}\left|\sum_i \vec{S}_i\right|^2}$$

...con: $C = e^{-\frac{\beta N}{2}}$

Applicando quindi una trasformazione H-S in 2-D alla Z_V si linearizza l'esponente nell'integrale:

$$Z_V = \frac{C}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{k=1}^{N} d\theta_k \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{v} \, e^{-\vec{v}^2 + \sum_i \vec{S}_i \cdot [\vec{v}(2\beta/N)^{1/2}]}$$

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:

Termodinamica all'Equilibrio

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

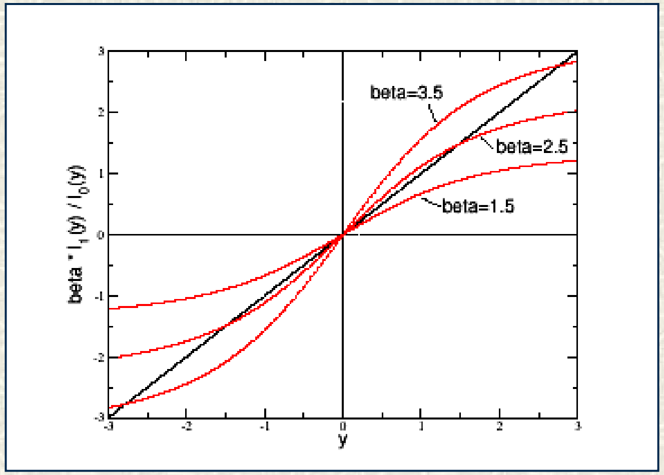
...dove I_o è la funzione di Bessel modificata di ordine zero.

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 l'equazione in campo medio per i punti stazionari:

$$w = \frac{I_1}{I_0}(\beta w)$$

...dove si è posto: $\vec{w} = \vec{v}/\beta$ **con:** $\vec{v} = (v\cos\theta, v\sin\theta)$

La funzione a secondo membro, che come vedremo coincide con la magnetizzazione del sistema, ha un andamento qualitativamente uguale a quello di una tangente iperbolica cosicchè l'equazione è risolubile graficamente. Si può così veder che essa ammette soluzioni diverse da zero (di modulo fissato e fase variabile) solo per β > 2, cioè per T < Tc = 0.5, valore che rappresenta dunque la temperatura critica per il modello HMF.



Termodinamica all’Equilibrio

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.

Da qui è possibile verificare che la magnetizzazione coincide con la w:

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

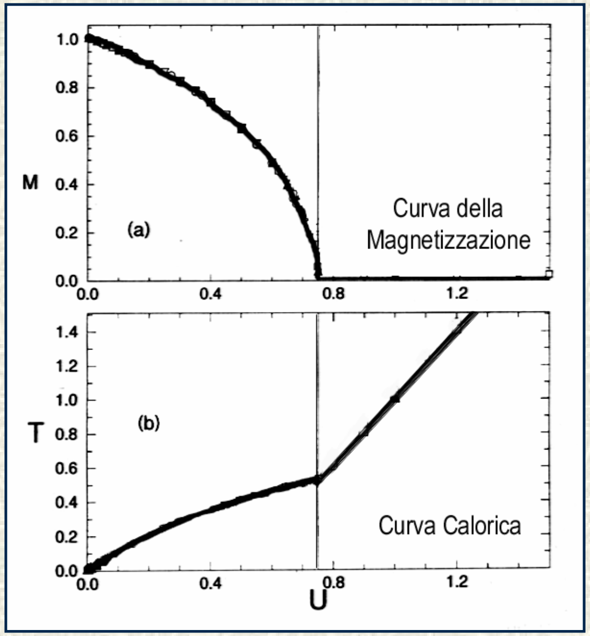
ed è anche possibile ricavare la curva calorica presentata in apertura. Infatti si ha:

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

la quale, poiché w = M, diventa appunto:

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

e si trova: $U_c = 0.75$

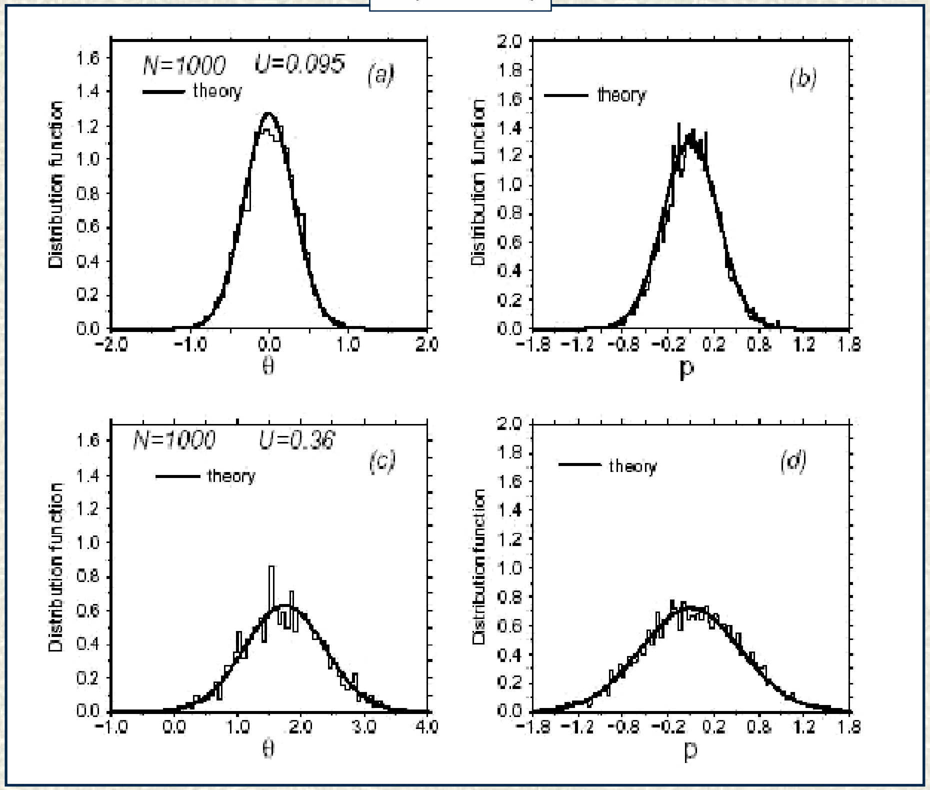


Termodinamica all'Equilibrio

Equazione di Vlasov

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

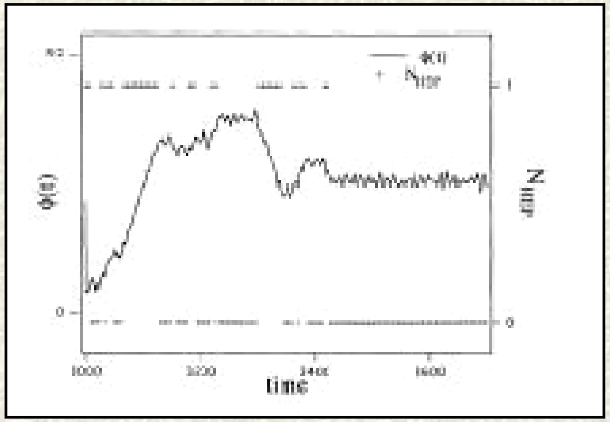
$$f(\theta, p, t)$$

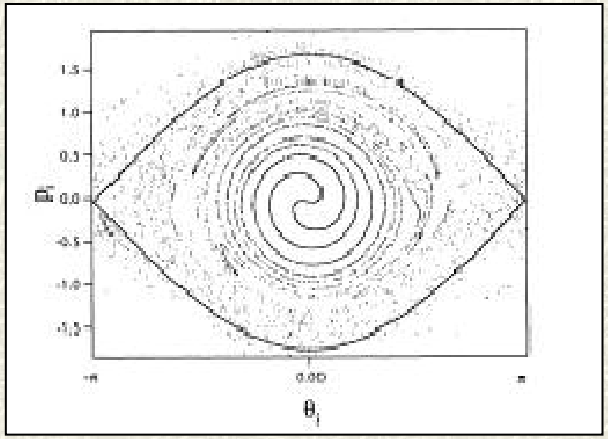


Parametro d'ordine

$$\overrightarrow{M} = (M_x, M_y) = Me^{i\phi}$$

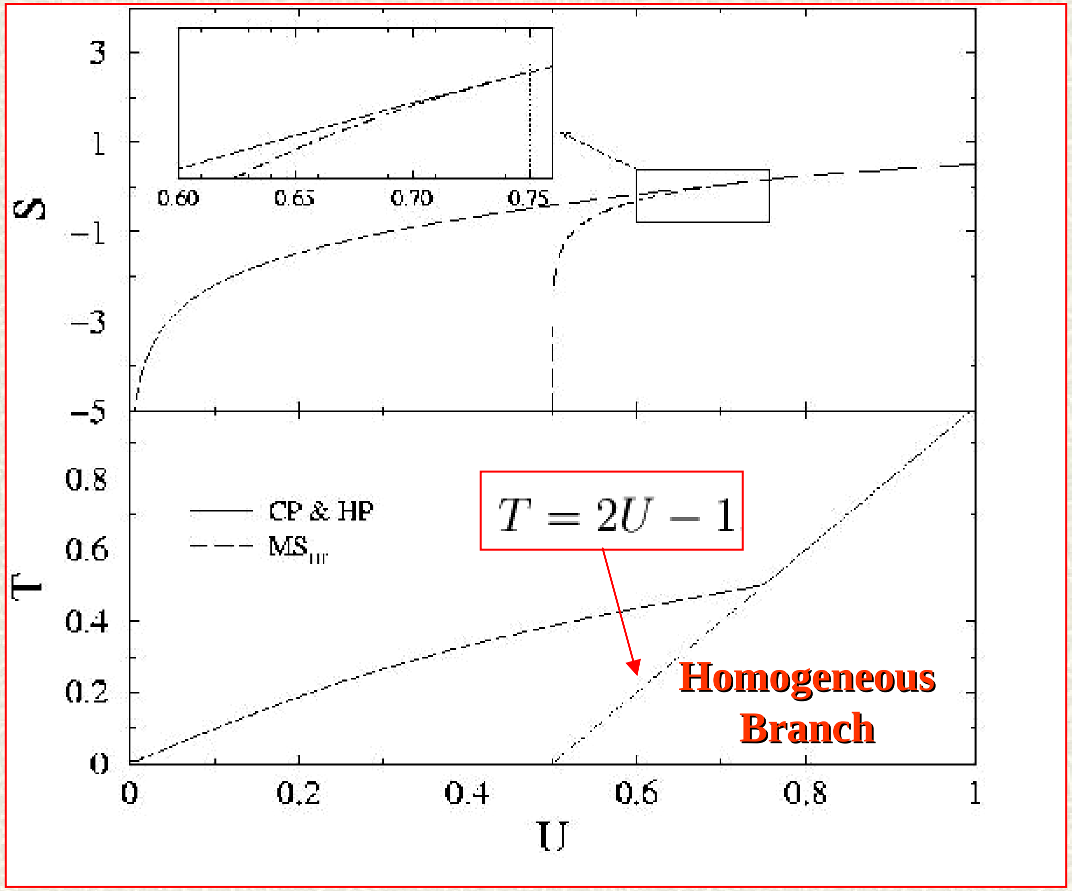
$$M_x = M\cos\Phi,\ M_y = M\sin\Phi$$





Termodinamica all'Equilibrio

Soluzione in Ensemble Microcanonico



Funzione di Partizione Microcanonica

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

Densità nelo Spazio delle Fasi

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

Entropia

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

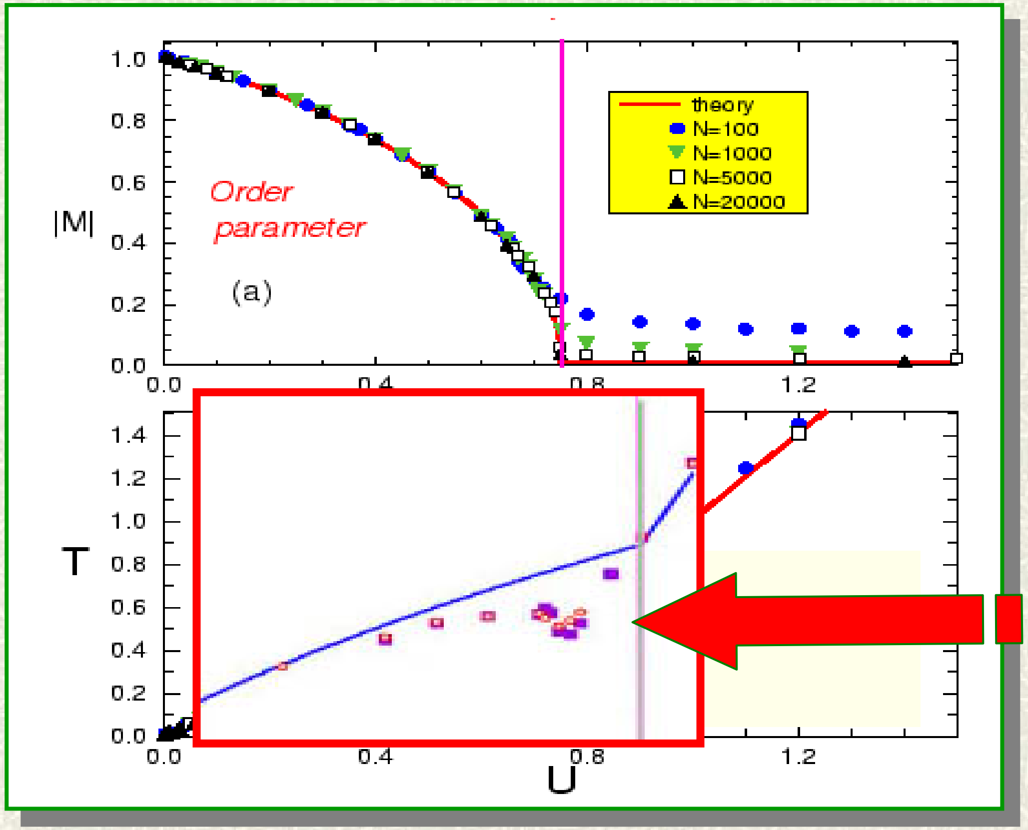
Dinamica

Equazioni del moto

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \theta_i}{\partial t} = p_i \\ \dfrac{\partial p_i}{\partial t} = -M_x \sin\theta_i + M_y \cos\theta_i \end{cases} \Rightarrow \ddot{\theta}_i = M \sin(\Phi - \theta_i)$$

$$\vec{M} = (M_x, M_y) = M e^{i\phi}$$

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…

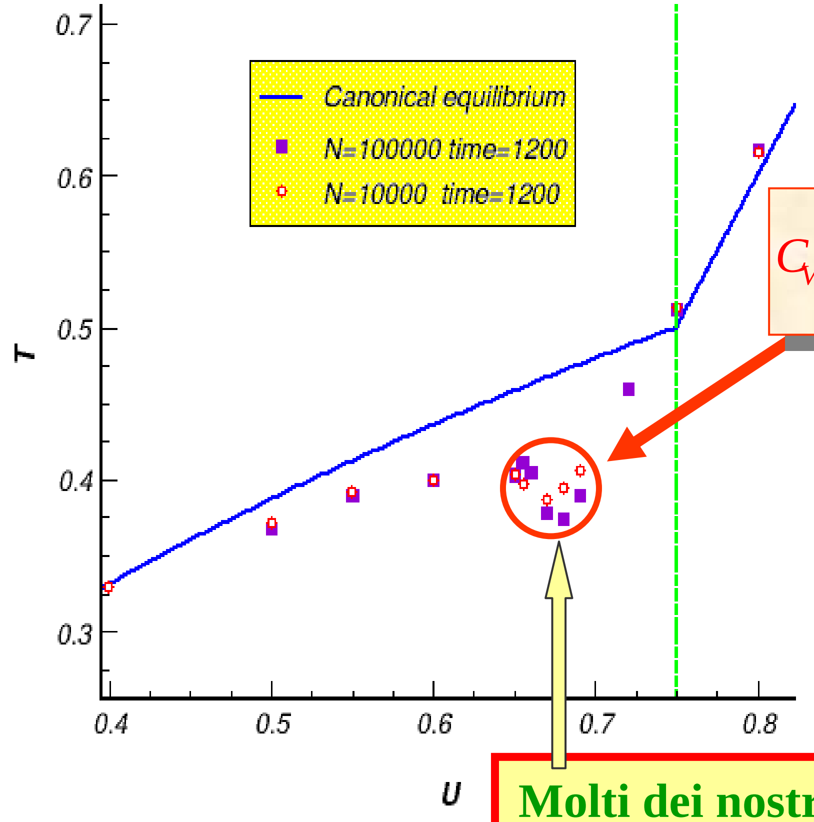
ma…

Quando il sistema viene fatto partire da **condizioni iniziali molto 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).

Outline del talk

- Introduzione: Termodinamica e Dinamica del modello HMF
- Calore specifico negativo & Stati Quasi-Stazionari Metastabili
- Dinamica lenta, Diffusione anomala & PDF non gaussiana
- Ruolo delle condizioni iniziali sulla dinamica dei QSS
- Correlazioni, Frustrazione dinamica, Power Law Relaxation & Aging
- Links con la q-statistica generalizzata (non estensiva) di Tsallis
- Weak ergodicity breaking e interpretazione del QSS regime come fase Spin-Glass
- Stati Quasistazionari sotto il punto critico: esempi di Metastabilità in altri Sistemi Complessi.

Calore specifico negativo



$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V < 0$$

Molti dei nostri risultati si riferiranno al caso U=0.69

In tale regione il calore specifico diventa negativo.

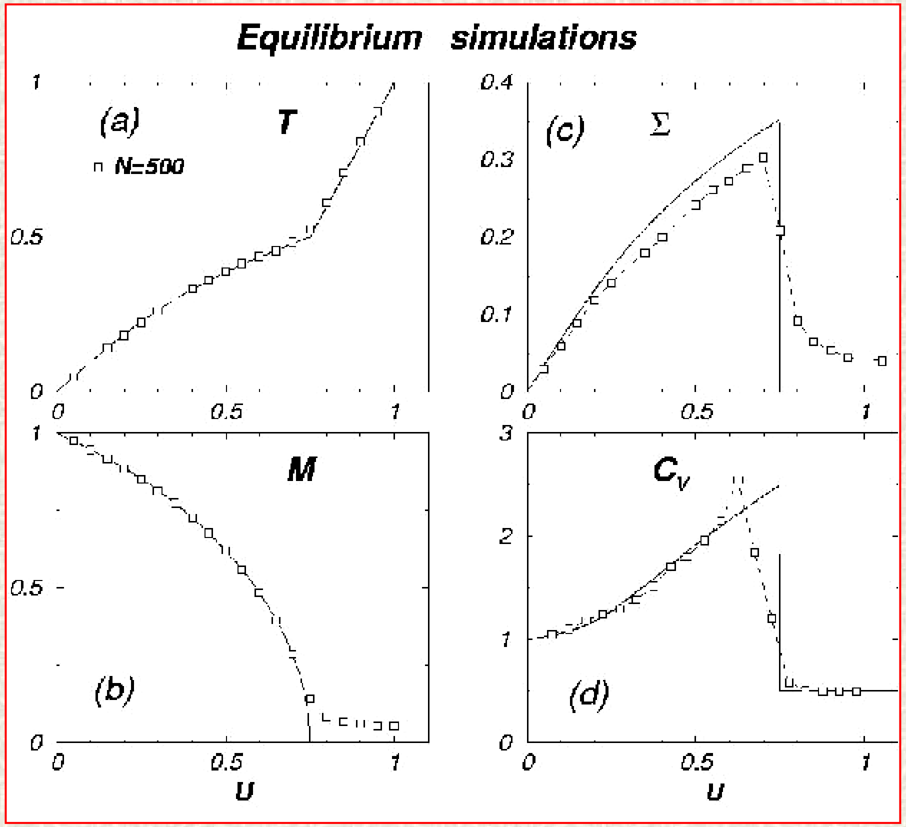
Infatti la temperatura decresce, incrementando la densità di energia..

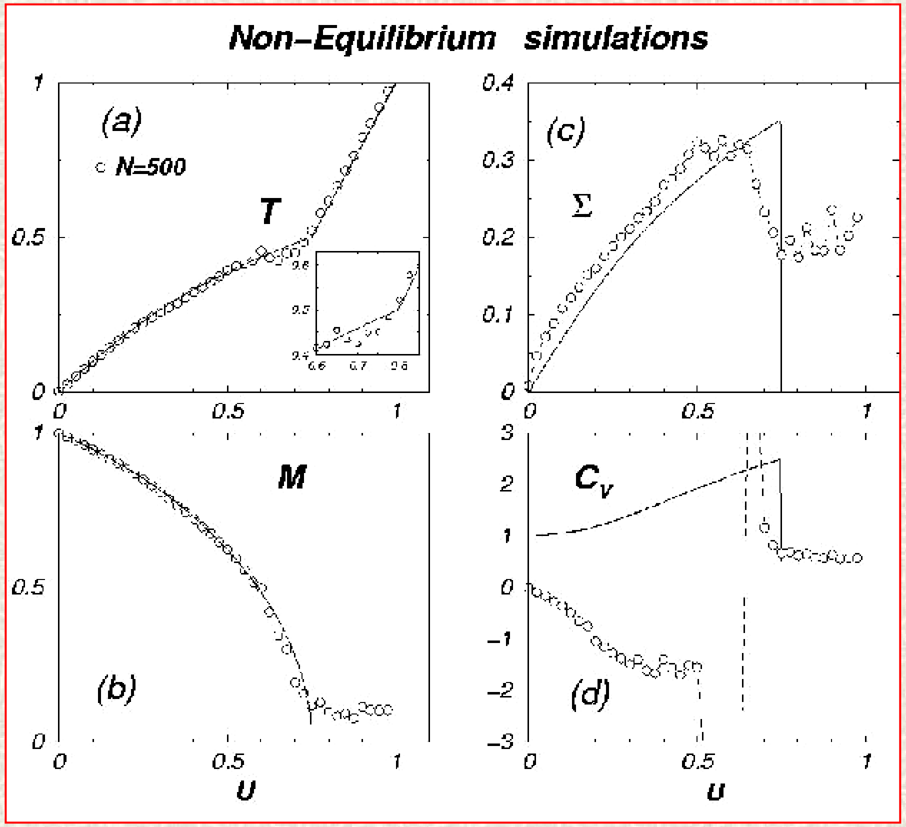
Questo fenomeno è stato osservato nelle reazioni di multiframmentazione nucleare e nei clusters atomici, ma anche in oggetti stellari auto-gravitanti, cioè in sistemi non-estensivi.

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

Calore specifico negativo





Calore Specifico

$$C_V = \frac{1}{2}\left[1 - 2\left(\frac{\Sigma}{T}\right)^2\right]^{-1}$$

Fluttuazioni di Energia Cinetica

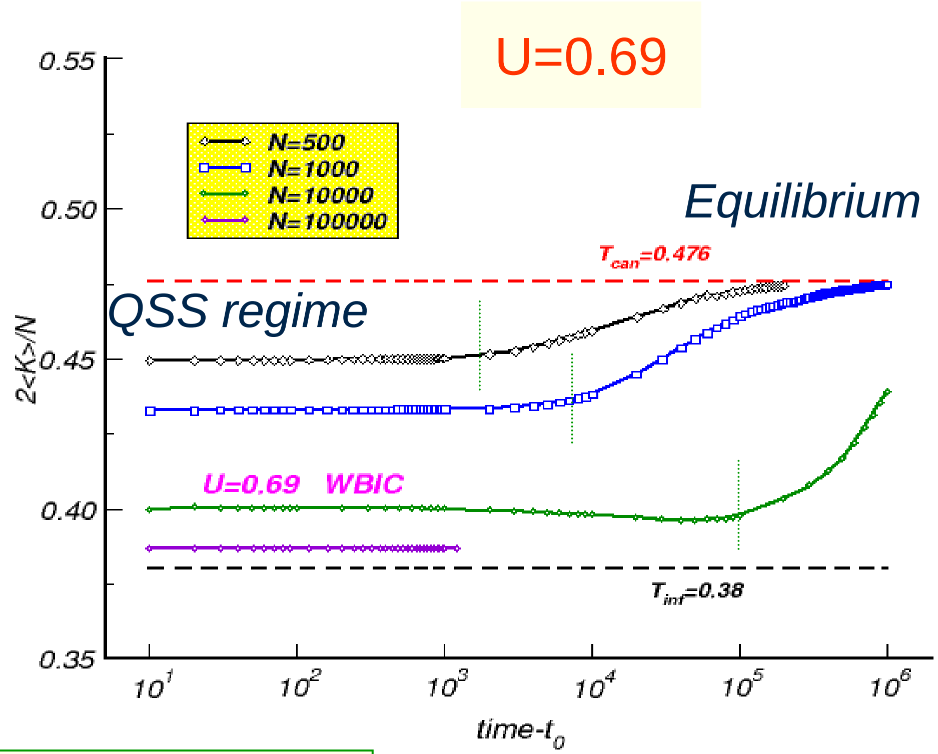
$$\Sigma = \frac{\sigma_K}{\sqrt{N}} = \frac{\sqrt{\langle K^2\rangle - \langle K\rangle^2}}{\sqrt{N}}$$

Stati metastabili (QSS)

Partendo da condizioni iniziali lontane dall' equilibrio, il sistema rimane intrappolato per un tempo molto lungo in *STATI QUASI-STAZIONARI* (QSS) METASTABILI dove la temperatura, definita come:

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

è minore di quella prevista all'equilibrio (Teq=0.476).



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

$$M_{QSS} \sim N^{-1/6}$$

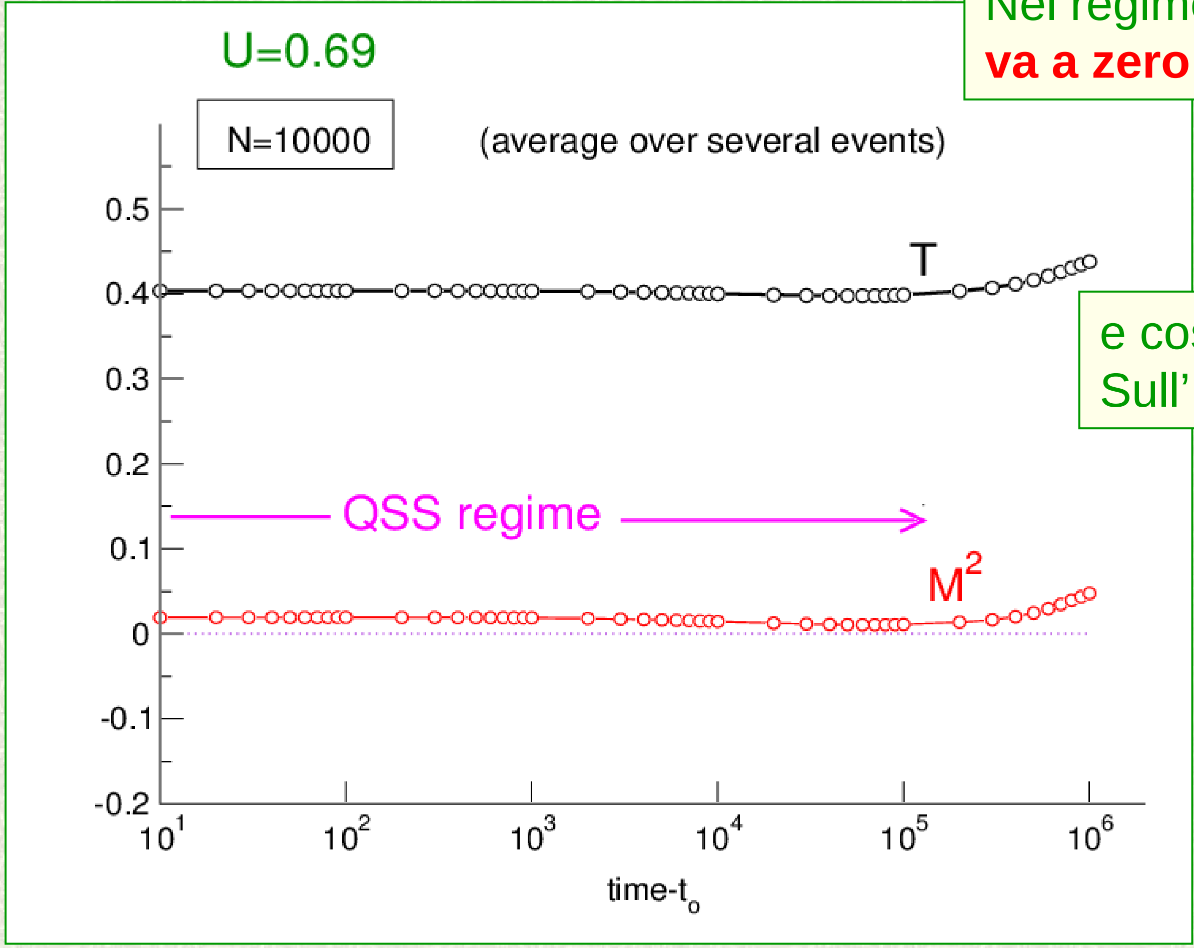
e così fà anche **la forza F_i** agente Sull' i-esimo spin, essendo:

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

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

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!

Dinamica 'lenta'



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

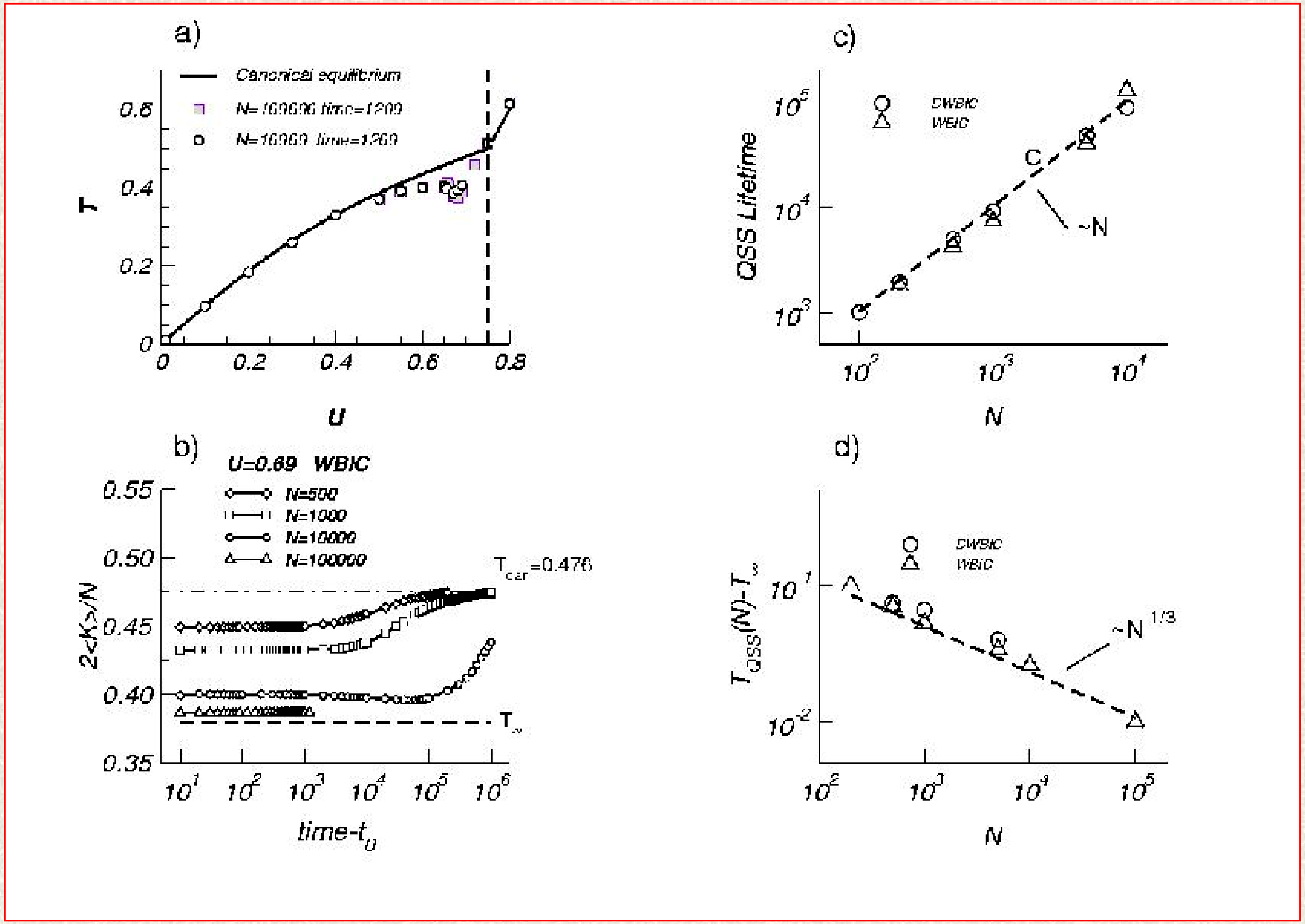
$$M_{QSS} \sim N^{-1/6}$$

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

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

Perciò la dinamica QSS diventa sempre più lenta incrementando N.
Per $N \to \infty$ il sistema rimane praticamente congelato nel regime QSS

Stati metastabili (QSS)



Ordine dei limiti

Le nostre 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…

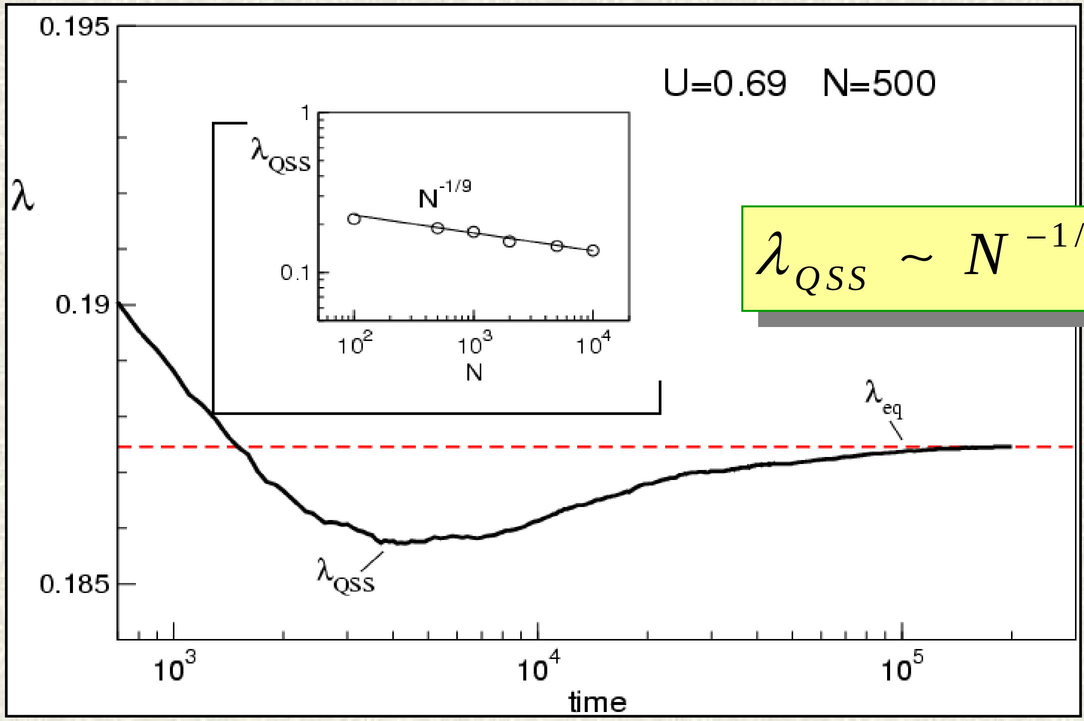
In generale, cioè, i due limiti non commutano:

$$N \to \infty \; t \to \infty \quad \neq \quad t \to \infty \; N \to \infty$$

Boltzmann-Gibbs equilibrium

QSS

L'esp.di Lyapunov va a zero



$$\lambda_{QSS} \sim N^{-1/9}$$

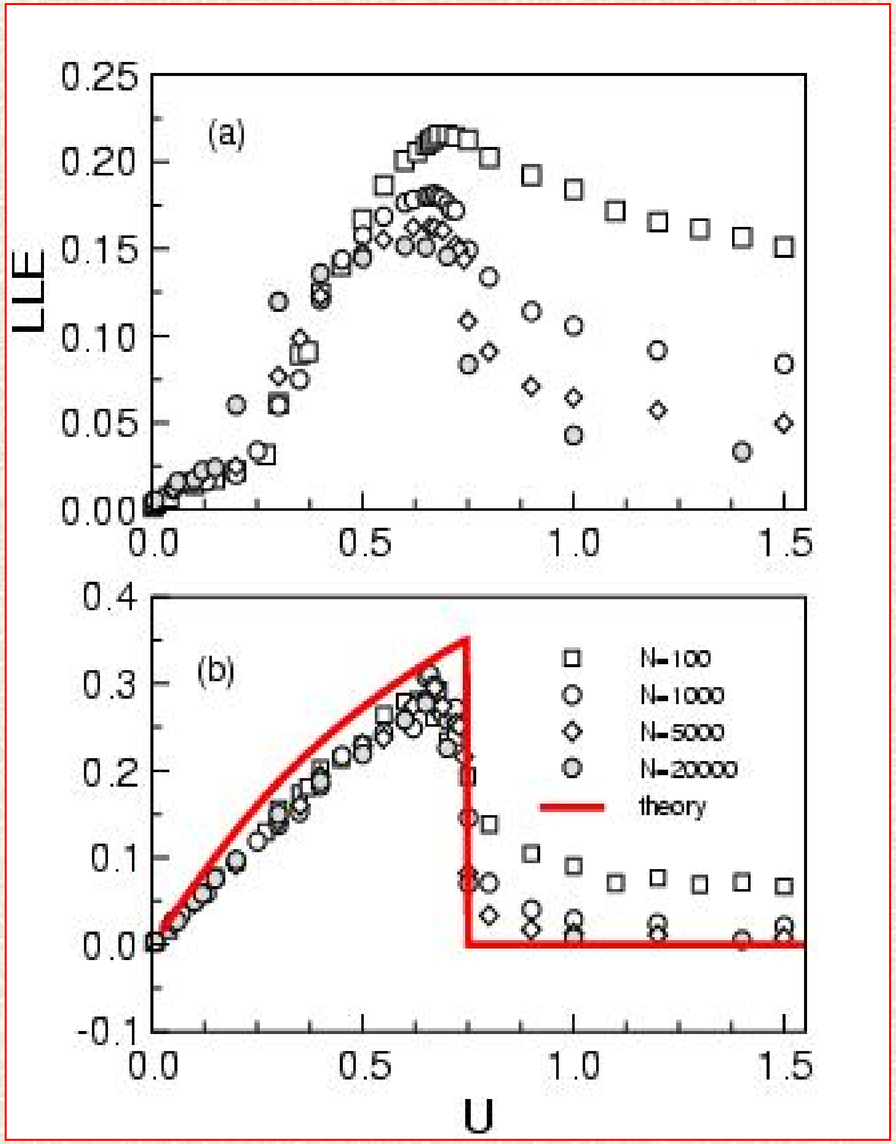
Nel regime QSS l' esponente massimale di Lyapunov tende a zero quando la size N del sistema tende all'infinito, rivelando così una situazione di "weak mixing".

Questo scaling può essere ottenuto dalla relazione…

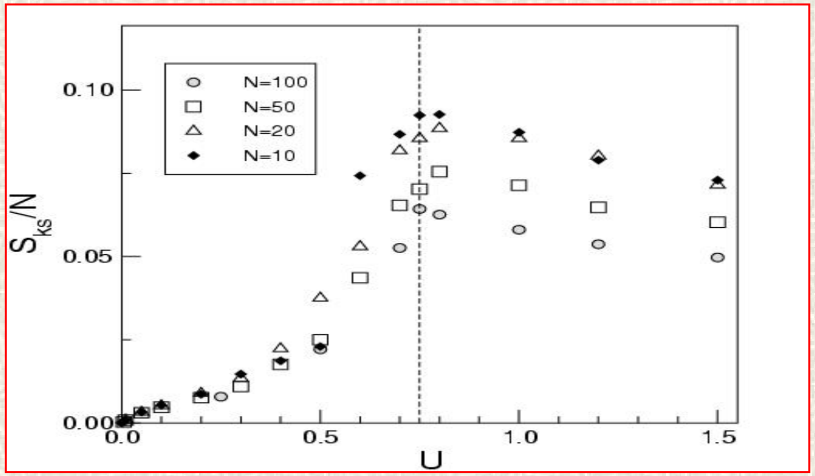
$$\lambda \propto M^{2/3} \propto \left(N^{-1/3}\right)^{1/3} = N^{-1/9}$$

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

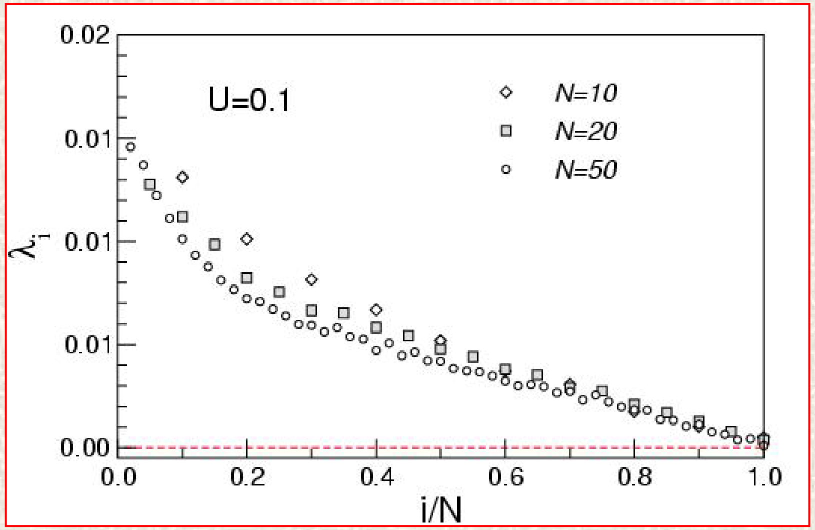
L'esp.di Lyapunov all'equilibrio



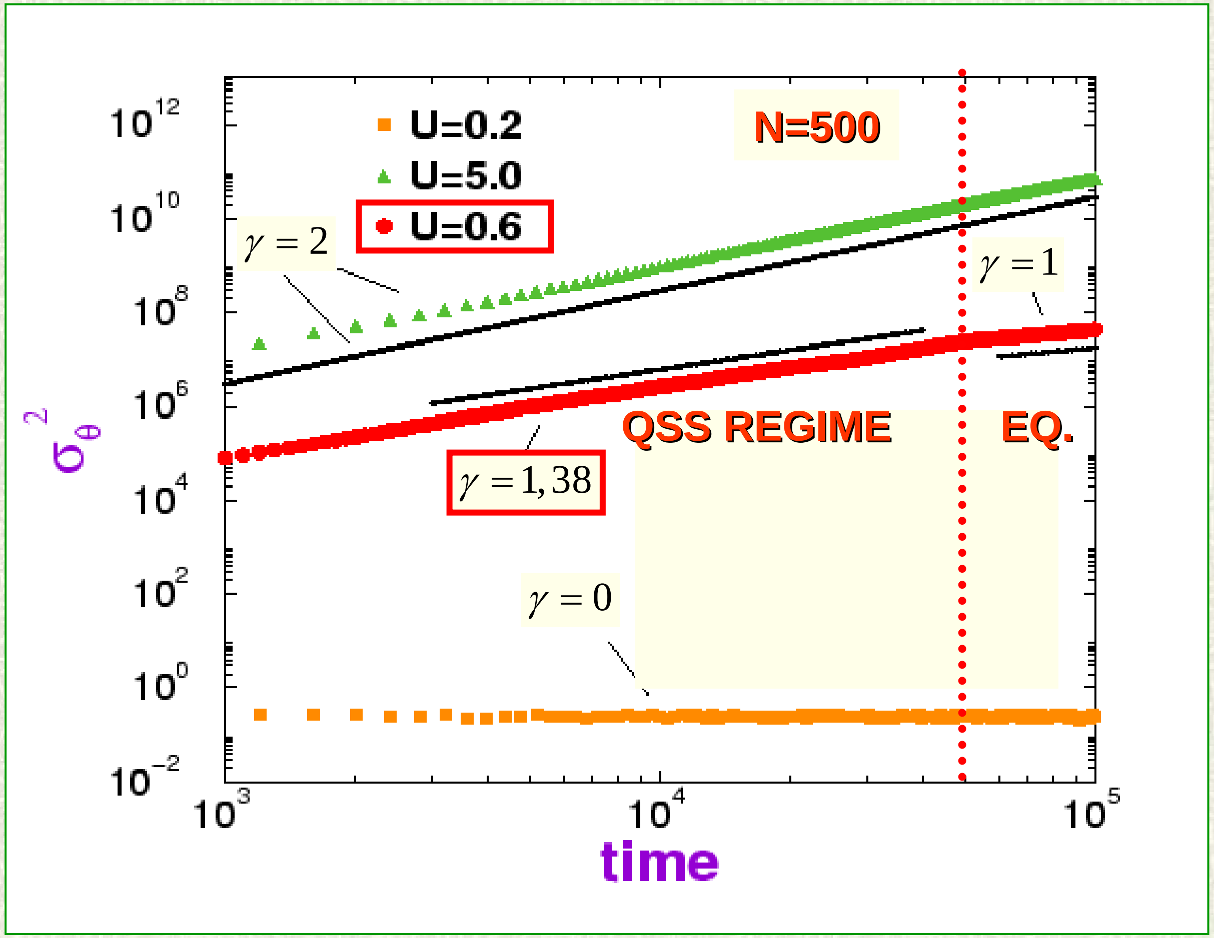
Entropia di Kolmogorov-Sinai



Spettro di Esponenti di Lyapunov pos.



Diffusione Anomala



Latora, Rapisarda and Ruffo, PRL 83 (1999) 2104

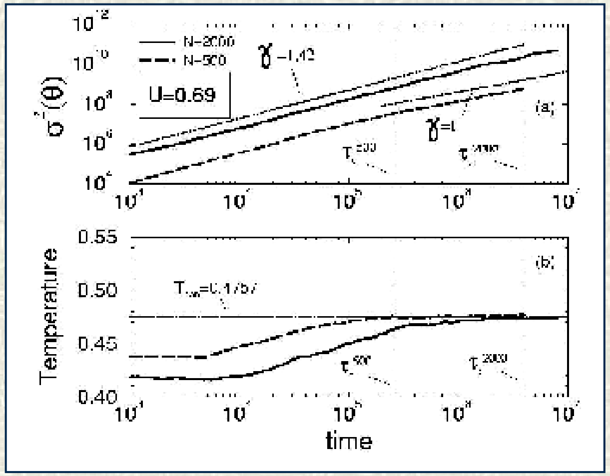
Mean Square Displacement

$$\sigma^2(t) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}[\theta_j(t) - \theta_j(0)]^2 \propto t^\gamma$$

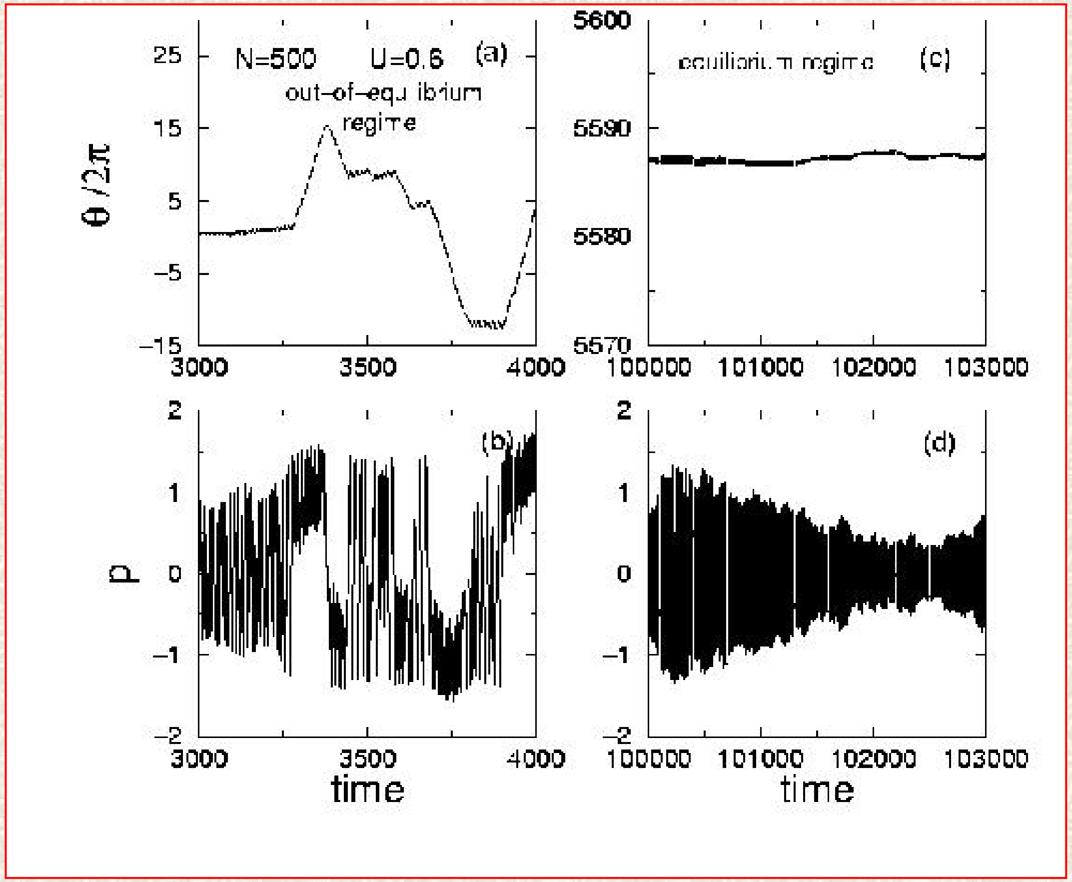
$\gamma = 1$	**Diffusione Normale**
$\gamma \neq 1$	**Diffusione Anomala**

Regime QSS:
superdiffusione (γ=1.38).

Equilibrio:
diffusione normale (γ=1).

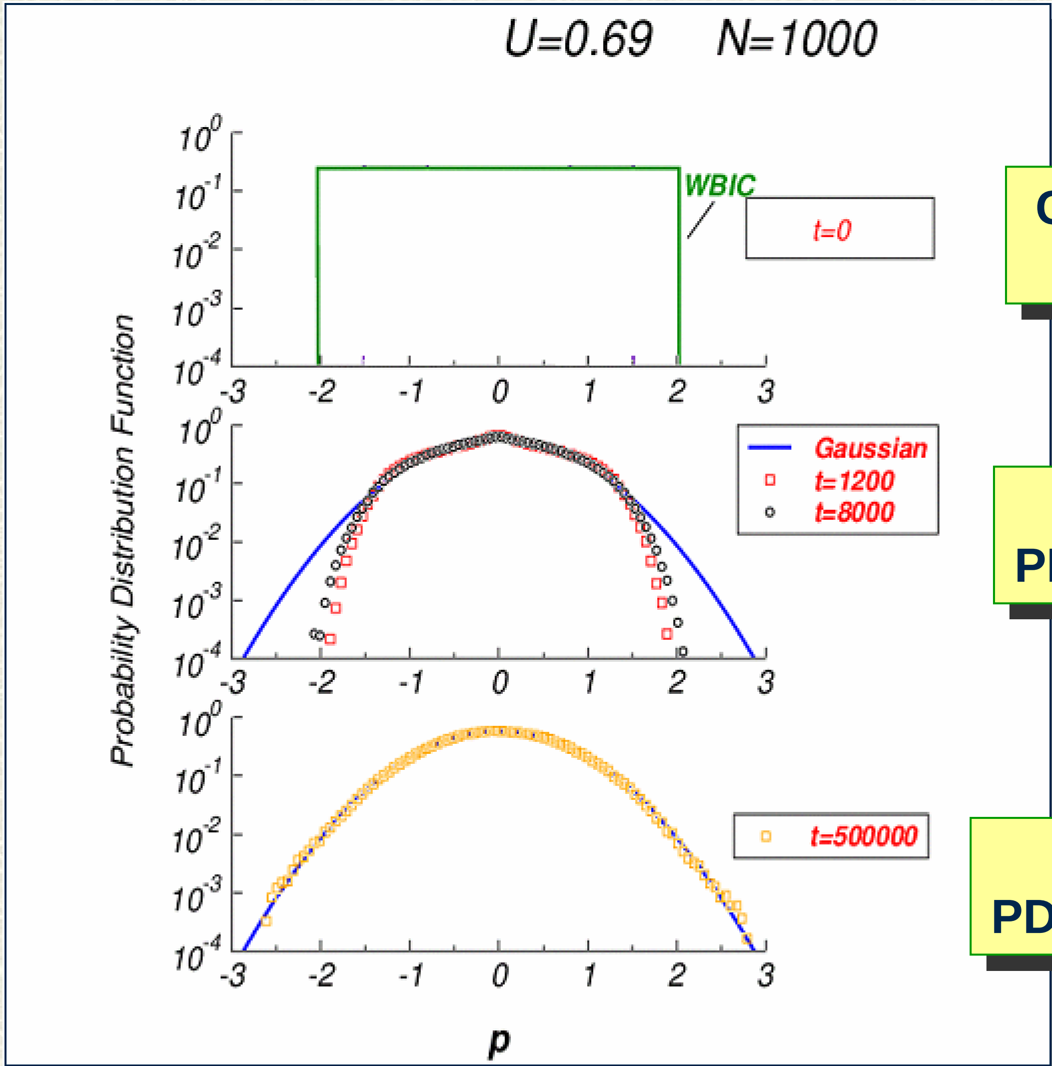


Diffusione Anomala



Latora, Rapisarda and Ruffo, PRL 83 (1999) 2104

PDF non gaussiana delle velocità



Condizioni iniziali Water Bag

Regime QSS: PDF non gaussiana

Equilibrio: PDF gaussiana (MB)