

Statistical Mechanics of Disordered Systems

Autore: Agnello Elisabetta

anno: 2025/2026

github . com / elisabettagnello

Indice

1	Lezione 1	1
1.1	Introduzione al Corso	1
1.2	Il Modello di Hopfield	1
1.2.1	Memoria Associativa e Punti Fissi	2
1.2.2	La Regola di Apprendimento di Hebb	3
1.2.3	Connessione con la Meccanica Statistica	3
1.2.4	Diagramma di Fase del Modello di Hopfield	4
1.3	Problemi di Soddisfacimento di Vincoli (CSP)	5
1.3.1	Il problema XORSAT	5
2	Lezione 2	9
2.1	Derivazione dell'Entropia di Shannon	9
2.2	Divergenza di Kullback-Leibler (DKL)	11
2.3	Somma di Variabili Aleatorie Indipendenti	12
2.3.1	Legge dei Grandi Numeri	12
2.3.2	Teorema Centrale del Limite(TLC)	12
2.3.3	Teoria delle Grandi Deviazioni	12
2.4	Probabilità di una Sequenza Empirica	15
3	Lezione 3	17
3.1	Funzione di Cramer per una Variabile Binaria	17
3.2	Introduzione alle Variabili Correlate	19
3.2.1	Entropia e Informazione Mutua	20
3.3	Il Modello di Ising	22
3.3.1	Il Modello di Ising Unidimensionale (1D)	22
3.3.2	Funzioni di Correlazione Spaziale	25
4	Lezione 4	27
4.1	Il Metodo della Matrice di Trasferimento	27
4.1.1	Teorema di Fluttuazione-Dissipazione	30
4.1.2	Autovettori e il Loro Significato Fisico	30
4.1.3	Funzione di Correlazione	31
5	Lezione 5	33
5.1	Metodo della Matrice di Trasferimento 1D	33
5.1.1	Modello di Ising su una Striscia (2D)	33
5.1.2	Modello con Campo Alternato (Staggered) DA RIVEDERE	34
5.2	Modello di Curie-Weiss	35

6	Lezione 6	39
6.1	Modello di Curie-Weiss	39
6.1.1	Transizione del Primo Ordine	40
6.1.2	Transizione del Secondo Ordine	41
6.2	Stati Stabili, Metastabili e Instabili	42
6.3	Ciclo di Isteresi e Punti Spinodali	44
6.3.1	Criticità nei Punti Spinodali	45
6.3.2	Caratterizzazione Analitica dei Punti Spinodali	45
6.4	Punti Critici in una Transizione del Secondo Ordine	45
6.5	Criticità nel Modello XY	46
6.6	Modello 3-Spin - da rivedere	47
6.7	Modello di Potts	48
7	Lezione 7	49
7.1	Ergodicità e Dinamica dei Sistemi	49
7.1.1	Barriere Energetiche ed Entropiche	49
7.1.2	Modello a 3-Spin	50
7.1.3	Modello di Potts	50
7.1.4	Nucleazione in Sistemi a Taglia Finita	51
7.2	Sistemi Disordinati	52
7.2.1	La Frustrazione	52
7.2.2	Media Annealed e Quenched	53

Lezione 1

Data: 01/10/2025

1.1 Introduzione al Corso

Questo corso si propone di illustrare cosa cambia in alcuni modelli fondamentali, che magari abbiamo già incontrato, quando vengono resi più complessi. Essendo un corso di meccanica statistica, il nostro punto di partenza sarà il **modello di Ising**, che rivedremo e risolveremo di nuovo per introdurre tecniche non convenzionali come la fisica del disordine. Su questo modello base andremo poi a costruire modelli più complicati, introducendo elementi di disordine.

Affronteremo concetti come le transizioni di fase, la rottura spontanea di simmetria, la metastabilità e la rottura dell'ergodicità, analizzandoli separatamente, poiché nei modelli che studieremo questi fenomeni possono avvenire in momenti e per motivi diversi. Partendo dal modello di Ising, introdurremo il disordine passando al modello di "random field", per poi dedicare l'intera seconda metà del corso agli **spin glass**.

Il corso si concentrerà sugli aspetti tecnici; impareremo a fare i conti con il metodo delle repliche e il metodo della cavità. L'obiettivo finale è quello di essere in grado di risolvere i sistemi più complicati che oggi sappiamo trattare: i sistemi disordinati su grafi arbitrari (grafi random), che hanno innumerevoli applicazioni.

1.2 Il Modello di Hopfield

Il modello di Hopfield rappresenta un esempio affascinante di applicazione della meccanica statistica a un campo completamente diverso, quello delle neuroscienze. Il modello è stato introdotto da John Hopfield, un fisico che si è interessato ai processi cognitivi dal punto di vista biologico, nel tentativo di modellizzare il meccanismo di propagazione dell'informazione all'interno del cervello nel modo più semplice possibile.

Modellizzazione del Neurone

Il primo passo consiste nel semplificare al massimo il comportamento di un neurone. L'attività di un neurone è caratterizzata fondamentalmente da due stati: uno stato in cui è a riposo ("dormiente") e uno stato in cui si attiva e rilascia un potenziale d'azione ("spara"). Per modellizzare questo comportamento, discretizziamo il sistema sia nello spazio (considerando N neuroni) sia nel tempo e associamo lo stato del neurone i al

tempo t a una variabile di spin, S_i^t , che può assumere due valori. Per convenzione, usiamo i valori ± 1 :

$$S_i^t \in \{-1, 1\} \quad (1.1)$$

dove $S_i^t = +1$ rappresenta lo stato in cui il neurone "spara" e $S_i^t = -1$ quello in cui "non spara".

Dinamica della Rete

Un neurone decide se sparare o meno in base ai segnali che riceve dagli altri neuroni a cui è connesso. In un modello a campo medio (fully connected), in cui ogni neurone interagisce con tutti gli altri, il segnale totale ricevuto dal neurone i al tempo t è dato dalla somma pesata degli stati di tutti gli altri neuroni:

$$\text{Segnale}_i^t = \sum_{j \neq i} J_{ij} S_j^t \quad (1.2)$$

I termini J_{ij} sono i **pesi sinaptici** e rappresentano l'intensità e la natura della connessione tra il neurone j e il neurone i . Queste connessioni possono essere di due tipi:

- **Eccitatorie** ($J_{ij} > 0$): se il neurone j spara, induce il neurone i a sparare.
- **Inibitorie** ($J_{ij} < 0$): se il neurone j spara, induce il neurone i a non sparare, depolarizzandolo.

La dinamica del sistema è definita da una semplice regola di aggiornamento. Lo stato del neurone i al tempo successivo, $t + 1$, è determinato dal segno del segnale totale che riceve. Se il segnale supera una soglia (che per semplicità poniamo a zero), il neurone sparerà; altrimenti, non sparerà. Matematicamente:

$$S_i^{t+1} = \text{sign} \left(\sum_{j \neq i} J_{ij} S_j^t \right) \quad (1.3)$$

Questa è una dinamica deterministica e parallela: dato uno stato iniziale della rete S^0 , l'evoluzione del sistema è completamente definita.

1.2.1 Memoria Associativa e Punti Fissi

L'evoluzione di uno stato S della rete può essere vista come una traiettoria nello spazio delle configurazioni: $S^0 \rightarrow S^1 \rightarrow S^2 \rightarrow \dots \rightarrow S^*$.

Uno stato S^* è un **punto fisso** della dinamica se, una volta raggiunto, il sistema non evolve più, ovvero viene mappato in se stesso dalla regola di aggiornamento.

Questo processo può essere interpretato, dal punto di vista neurofisiologico, come il **recupero di un ricordo**. Lo stato iniziale S^0 può essere pensato come l'input sensoriale che il cervello riceve. La successiva dinamica interna porta il sistema a convergere verso un punto fisso S^* , che rappresenta il concetto o il ricordo associato a quell'input. Questo è il motivo per cui il modello è detto di **memoria associativa**: stati iniziali diversi, purché sufficientemente simili a un ricordo immagazzinato, convergono allo stesso punto fisso.

1.2.2 La Regola di Apprendimento di Hebb

La domanda fondamentale è: come devono essere scelti i pesi sinaptici J_{ij} affinché i punti fissi della dinamica corrispondano a specifici ricordi che vogliamo immagazzinare?. Le connessioni sinaptiche nel cervello non sono fisse, ma si alterano quando impariamo. Hopfield propose di utilizzare la **regola di Hebb**, un principio neuroscientifico secondo cui "neuroni che si attivano insieme, si collegano" (**neurons that fire together, wire together**).

Supponiamo di voler memorizzare P "pattern" o ricordi, $\underline{\xi}^\mu$, con $\mu = 1, \dots, P$. Ogni pattern è un vettore di N componenti, dove N è il numero di neuroni (o spin), e $\xi_i^\mu \in \{-1, 1\}$. La regola di Hebb prescrive di definire i pesi sinaptici come segue:

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^P \xi_i^\mu \xi_j^\mu \quad (1.4)$$

Questa formula ha un'interpretazione biologica intuitiva: se, per un dato ricordo μ , due neuroni i e j sono coerenti (cioè ξ_i^μ e ξ_j^μ hanno lo stesso segno), il loro contributo al peso J_{ij} è positivo, rafforzando la loro connessione. Se invece sono incoerenti, il contributo è negativo, creando una connessione inibitoria. Questo processo può essere visto come il risultato di un **processo di apprendimento**: presentando ripetutamente i pattern alla rete, le connessioni sinaptiche si adattano per codificare queste memorie, **favorendo i neuroni coerenti**.

1.2.3 Connessione con la Meccanica Statistica

La dinamica di Hopfield ha una profonda connessione con la meccanica statistica. La regola di aggiornamento è equivalente a una dinamica a temperatura zero (gradient descent) che minimizza un'energia, o **Hamiltoniana**. Consideriamo un'Hamiltoniana della forma:

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j \quad (1.5)$$

L'energia che coinvolge un singolo spin S_i può essere scritta come:

$$H_i = -S_i \left(\sum_{j \neq i} J_{ij} S_j \right) \quad (1.6)$$

La quantità tra parentesi è il **campo locale** sentito dallo spin S_i :

$$h_i = \sum_{j \neq i} J_{ij} S_j \quad (1.7)$$

Per minimizzare l'energia, lo spin S_i tenderà ad allinearsi con il suo campo locale, ovvero $S_i = \text{sign}(h_i)$. Questa è esattamente la dinamica di Hopfield.

Di conseguenza, **i punti fissi della dinamica corrispondono ai minimi locali dell'Hamiltoniana H** .

Questa equivalenza permette di studiare le proprietà della rete, come la sua capacità di memorizzazione, utilizzando gli strumenti della meccanica statistica. Invece di analizzare la dinamica, si studiano le proprietà termodinamiche del sistema descritto da H alla distribuzione di Gibbs-Boltzmann $P_{GB}(S) \propto e^{-\beta H}$, dove $\beta = 1/T$.

1.2.4 Diagramma di Fase del Modello di Hopfield

Si studia il modello nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$) e mantenendo costante il rapporto $\alpha = P/N$, detto **carico della rete**. Il diagramma di fase nel piano (α, T) rivela tre regioni principali:

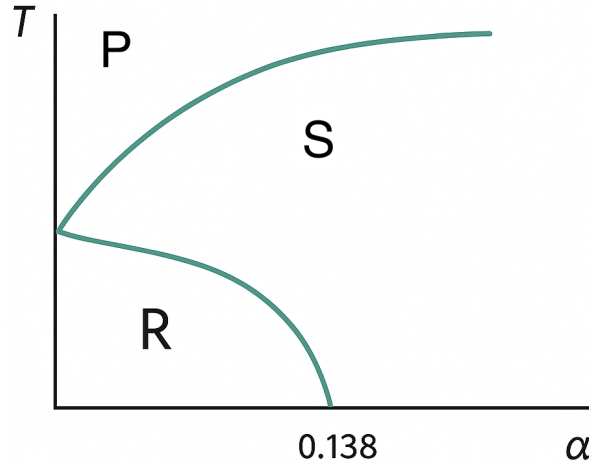


Figura 1.1: Diagramma di fase qualitativo del modello di Hopfield.

Per caratterizzare le fasi, si usano parametri d'ordine come la sovrapposizione con una memoria m^μ e l'overlap tra repliche q :

$$m^\mu = \frac{1}{N} \sum_i S_i \xi_i^\mu \quad (1.8)$$

$$q = \frac{1}{N} \sum_i S_i^{(1)} S_i^{(2)} \quad (1.9)$$

- **Fase Paramagnetica (P):** Ad alta temperatura, l'agitazione termica domina e gli spin sono orientati casualmente. Non c'è correlazione né con le memorie ($m = 0$) né tra configurazioni diverse ($q = 0$).
- **Fase di Recupero (R - Retrieval):** A bassa temperatura e per un basso carico di rete ($\alpha < \alpha_c$), il sistema può recuperare le memorie. In questa fase, esistono stati termodinamicamente stabili in cui la sovrapposizione con una delle memorie è non nulla ($m \neq 0$). Il valore critico del carico a $T = 0$ è $\alpha_c \approx 0.138$. Una rete di N neuroni può memorizzare in modo affidabile al massimo circa il 14% di N pattern.
- **Fase di Spin Glass (S):** Se il carico della rete supera la soglia critica ($\alpha > \alpha_c$), il sistema entra in una fase di spin glass. La sovrapposizione con le memorie è nulla ($m = 0$), ma l'overlap tra repliche è non nullo ($q \neq 0$). Il paesaggio energetico diventa estremamente complesso, con un numero esponenziale di minimi locali ("stati spuri") che non corrispondono a nessuna delle memorie originali. La dinamica si blocca in questi stati spuri e il recupero fallisce.

1.3 Problemi di Soddisfacimento di Vincoli (CSP)

Un'altra area in cui le tecniche della meccanica statistica dei sistemi disordinati si sono rivelate fondamentali è lo studio dei **Constraint Satisfaction Problems** (CSP) in computer science.

Un CSP è un problema di ottimizzazione combinatoria in cui si deve trovare una configurazione di variabili discrete che soddisfi un insieme di vincoli. Consideriamo un sistema con:

- N variabili binarie, $S_i \in \{-1, 1\}$.
- M vincoli (o clausole).

La difficoltà del problema è tipicamente misurata dal rapporto $\alpha = M/N$, ovvero il numero medio di vincoli per variabile. All'aumentare di α , ci si aspetta una transizione da un regime in cui il problema è facilmente **soddisfacibile** (SAT) a uno in cui è **insoddisfacibile** (UNSAT). Nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$), questa transizione diventa una **transizione di fase netta** (sharp transition), dove la probabilità che un'istanza random sia soddisfacibile passa da 1 a 0 in un punto critico α_s .

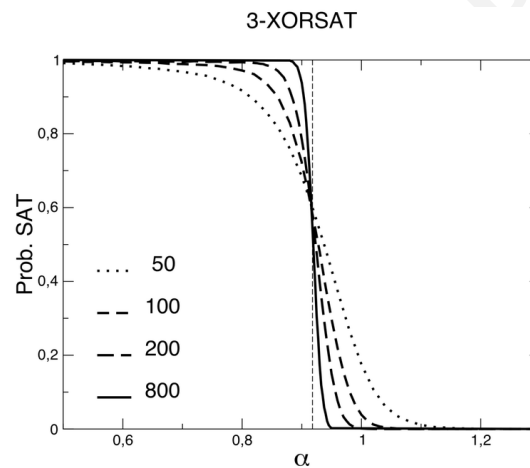


Figura 1.2: Transizione di fase SAT/UNSAT.

Tuttavia, l'analisi ha rivelato una struttura più complessa. Per molti problemi, esiste una regione intermedia **SAT-HARD**, dove le soluzioni esistono ma sono estremamente difficili da trovare per gli algoritmi di ricerca locale. Gli algoritmi tipicamente riescono a trovare soluzioni fino a una soglia $\alpha_d < \alpha_s$, ma falliscono nella regione $[\alpha_d, \alpha_s]$. La fisica statistica ha fornito una spiegazione per questo fenomeno, collegandolo a un cambiamento nella struttura dello spazio delle soluzioni.

1.3.1 Il problema XORSAT

Un problema apparentemente semplice che mostra questa struttura complessa è XOR-SAT. In termini di computer science, il problema è definito come segue:

- N variabili booleane $x_i \in \{\text{True}, \text{False}\}$ (o $\{0, 1\}$).
- M clausole, ognuna delle quali coinvolge 3 variabili scelte a caso (i, j, k) .

- Ogni clausola impone un vincolo di **OR esclusivo (XOR)**: $x_i \oplus x_j \oplus x_k = c_a$, dove c_a è 0 o 1.

Se le variabili sono in $\{0, 1\}$, il vincolo si scrive come $(x_i + x_j + x_k) \pmod{2} = c_a$.

Si tratta quindi di risolvere un sistema di M equazioni lineari modulo 2 in N incognite. Questo problema può essere risolto in tempo polinomiale (cubico, $O(N^3)$) con l'eliminazione gaussiana, che è un algoritmo globale. Tuttavia, gli algoritmi *locali*, che usano solo informazioni locali, falliscono nel trovare soluzioni nella fase HARD.

Mappatura su un Modello di Spin

Per studiare questo problema con la meccanica statistica, mappiamo le variabili booleane x_i su variabili di spin S_i tramite la trasformazione $S_i = (-1)^{x_i}$.

Con questa mappatura, il prodotto di tre spin è legato alla somma delle variabili booleane:

$$S_i S_j S_k = (-1)^{x_i + x_j + x_k} \quad (1.10)$$

Per semplicità, consideriamo il caso in cui tutte le clausole devono essere soddisfatte con risultato 0, cioè $(x_i + x_j + x_k) \pmod{2} = 0$.

Questo corrisponde a richiedere $S_i S_j S_k = 1$ per ogni clausola (i, j, k) .

Una configurazione è una soluzione se soddisfa tutti gli M vincoli: $\sum_{(i,j,k)} S_i S_j S_k = M$.

Possiamo definire un'Hamiltoniana tale che il suo stato fondamentale (energia minima) corrisponda alle soluzioni del problema:

$$H = M - \sum_{(i,j,k)} S_i S_j S_k \quad (1.11)$$

Lo stato fondamentale ha energia $H = 0$ e si raggiunge quando tutti i vincoli sono soddisfatti. Il disordine in questo modello non risiede negli accoppiamenti (che sono tutti uguali a -1), ma nella struttura del **grafo** di interazione, che è random poiché le triplette (i, j, k) sono scelte a caso.

La Transizione di Fase e la Struttura delle Soluzioni

Un calcolo semplice suggerisce che il numero di soluzioni dovrebbe essere 2^{N-M} , poiché ogni equazione lineare indipendente dimezza lo spazio delle soluzioni.

L'entropia (il logaritmo del numero di soluzioni) per spin sarebbe

$$S = \frac{1}{N} \log_2(2^{N-M}) = (1 - \alpha) \log_2(1) \quad (1.12)$$

implicando che le soluzioni scompaiano solo per $\alpha_s = 1$.

Tuttavia, sperimentalmente e teoricamente si trova che la soglia di soddisfacibilità è $\alpha_s \approx 0.918$. La discrepanza nasce dal fatto che il calcolo precedente assume che tutti i vincoli siano linearmente indipendenti, il che cessa di essere vero quando iniziano a formarsi dipendenze lineari. Ad un certo punto, si forma un sottoinsieme di variabili, chiamato **core**, che riceve un numero di vincoli così alto che diventa localmente insoddisfacibile, rendendo l'intero problema UNSAT anche se $\alpha < 1$.

La transizione verso la fase HARD a $\alpha_d < \alpha_s$ è spiegata da un cambiamento topologico nello spazio delle soluzioni.

- **Fase EASY-SAT** ($\alpha < \alpha_d$): Lo spazio delle soluzioni è un unico grande "cluster" connesso. È facile muoversi da una soluzione all'altra con piccole modifiche, e gli algoritmi locali possono esplorare questo spazio in modo efficiente.
- **Fase HARD-SAT** ($\alpha_d < \alpha < \alpha_s$): Lo spazio delle soluzioni, pur contenendo ancora un numero esponenziale di configurazioni, si frammenta in molti cluster piccoli e isolati. Si verifica una **rottura di ergodicità**. Questa clusterizzazione crea barriere energetiche che intrappolano gli algoritmi di ricerca locale in minimi locali di energia che non sono soluzioni, impedendo loro di raggiungere le vere soluzioni a energia zero.

Questa transizione topologica, invisibile a livello dell'entropia totale (che rimane una funzione regolare di α), è il vero ostacolo per gli algoritmi.

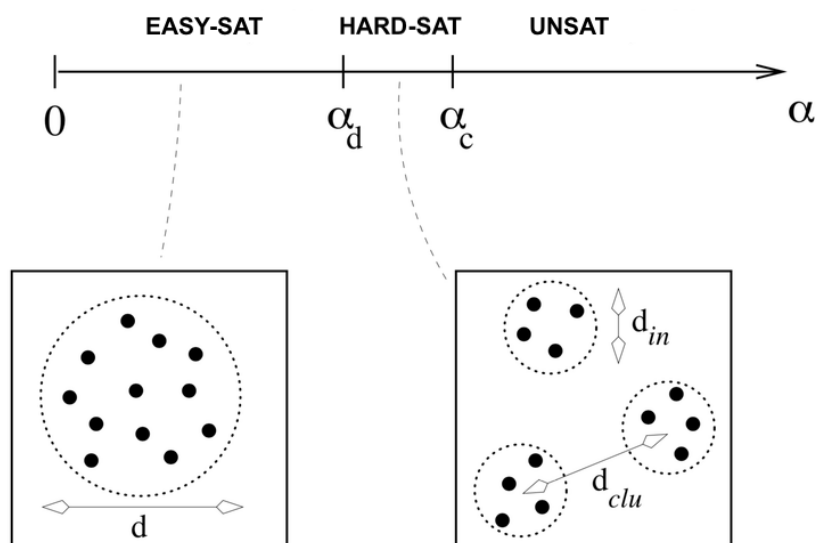


Figura 1.3: Rappresentazione del cambiamento topologico nello spazio delle soluzioni.

github . com / elisabettagnello

Lezione 2

Data: 02/10/2025

2.1 Derivazione dell'Entropia di Shannon

Per dedurre l'espressione dell'entropia di Shannon, consideriamo il seguente esperimento mentale. Supponiamo di dover trasmettere una sequenza di N bit. Lo spazio delle possibili configurazioni ha una dimensione di 2^N . Per specificare una di queste 2^N "parole", è necessario trasmettere tutti gli N bit.

Ora, supponiamo di poter classificare queste 2^N configurazioni in base al valore di un'osservabile, come la magnetizzazione media o l'energia. Sia X tale osservabile, che può assumere l valori distinti: $X \in \{x_1, x_2, \dots, x_l\}$. Se consideriamo una misura uniforme sullo spazio delle 2^N configurazioni, X si comporta come una variabile aleatoria, assumendo i suoi valori con diverse probabilità.

Definiamo la probabilità p_i come la probabilità che la variabile aleatoria X assuma il valore x_i :

$$p_i = P[X = x_i] \quad (2.1)$$

Queste probabilità definiranno l'entropia della variabile X .

Consideriamo uno scenario di trasmissione di informazione da un trasmettitore a un ricevitore. Invece di trasmettere tutti gli N bit della configurazione, comunichiamo al ricevitore solo il valore x_i che l'osservabile X assume su quella specifica configurazione. Questa informazione riduce l'incertezza del ricevitore.

Dopo aver comunicato che $X = x_i$, il numero di configurazioni possibili non è più 2^N , ma si riduce al numero di configurazioni compatibili con questa condizione, che è $2^N p_i$. Di conseguenza, il numero di bit necessari per identificare univocamente la configurazione passa da N a $N + \log_2(p_i)$. Poiché $p_i \leq 1$, il termine $\log_2(p_i)$ è negativo (o nullo), indicando una riduzione del numero di bit da trasmettere. Assegnare un valore alla variabile aleatoria riduce l'incertezza di una quantità pari a $-\log_2(p_i)$.

L'incertezza media associata alla non conoscenza della variabile aleatoria X si ottiene calcolando il valore di aspettazione di questa quantità su tutti i possibili valori di X . L'incertezza associata al valore x_i è $-\log_2(p_i)$, e questo valore si presenta con probabilità p_i . L'incertezza media, o entropia di X , è quindi la somma pesata:

$$H_X = - \sum_{i=1}^l p_i \log_2(p_i) \quad (2.2)$$

Questa quantità può essere interpretata in due modi equivalenti: come il contenuto medio di informazione che si ottiene scoprendo il valore della variabile aleatoria, o come l'incertezza media sulla variabile prima di conoscerne il valore.

Proprietà dell'Entropia

- **Positività:** Per variabili con un numero discreto e finito di valori, l'entropia è sempre non negativa, $H_X \geq 0$. È legata a un conteggio di configurazioni.
- **Caso Certo:** Se la variabile X è certa, assume un solo valore con probabilità $p_i = 1$ e tutti gli altri con probabilità zero. In questo caso, l'entropia è nulla, $H_X = 0$.
- **Massima Entropia:** L'entropia è massima quando tutti i valori possibili sono equiprobabili. Se X può assumere l valori, il massimo si ha per $p_i = 1/l$ per ogni i , e vale $H_X = \log_2(l)$.
- **Variabili Continue:** Per le variabili continue, l'entropia di Shannon non è più necessariamente positiva e perde l'interpretazione diretta di conteggio. In questi casi, concetti come l'informazione mutua, che si basano su differenze di entropie, sono più robusti.
- **Subadditività:** Date due variabili aleatorie X e Y , che possono essere correlate, l'entropia congiunta è subadditiva:

$$H_{X,Y} \leq H_X + H_Y \quad (2.3)$$

L'uguaglianza vale se e solo se le variabili sono statisticamente indipendenti, ovvero se la loro distribuzione congiunta si fattorizza: $P(x, y) = P(x)P(y)$. La correlazione riduce l'incertezza totale perché la conoscenza di una variabile fornisce informazione sull'altra.

Esempio: Variabile di Bernoulli

Consideriamo una variabile di Bernoulli che può assumere due valori (e.g., 0 e 1) con probabilità q e $1 - q$ rispettivamente. La sua entropia è data da:

$$H_X = -q \log_2(q) - (1 - q) \log_2(1 - q) \quad (2.4)$$

Questa funzione è nulla per $q = 0$ e $q = 1$ (eventi certi) e raggiunge il suo massimo, $\log_2(2) = 1$, per $q = 1/2$ (massima incertezza).

2.2 Divergenza di Kullback-Leibler (DKL)

La divergenza di Kullback-Leibler (DKL), o entropia relativa, è una misura della "distanza" tra due distribuzioni di probabilità, $p(x)$ e $q(x)$. Date due distribuzioni, la DKL di q rispetto a p è definita come:

$$D_{KL}(q||p) = \sum_x q(x) \log \left(\frac{q(x)}{p(x)} \right) \quad (2.5)$$

Questa espressione può essere interpretata come il valore di aspettazione, calcolato sulla distribuzione q , del logaritmo del rapporto tra le due distribuzioni.

Proprietà della DKL

- **Non-negatività:** $D_{KL}(q||p) \geq 0$. L'uguaglianza $D_{KL}(q||p) = 0$ si verifica se e solo se $q(x) = p(x)$ per ogni x .

Dimostrazione: Utilizziamo la disuguaglianza $\ln(A) \leq A - 1$ per $A > 0$, dove l'uguaglianza vale solo per $A = 1$.

$$\begin{aligned} -D_{KL}(q||p) &= -\sum_x q(x) \log \left(\frac{q(x)}{p(x)} \right) = \sum_x q(x) \log \left(\frac{p(x)}{q(x)} \right) \\ &\leq \sum_x q(x) \left(\frac{p(x)}{q(x)} - 1 \right) \\ &= \sum_x p(x) - \sum_x q(x) = 1 - 1 = 0 \end{aligned}$$

Poiché $-D_{KL}(q||p) \leq 0$, segue che $D_{KL}(q||p) \geq 0$. L'uguaglianza si ha quando l'argomento del logaritmo, $p(x)/q(x)$, è uguale a 1 per ogni x , cioè quando le distribuzioni coincidono.

- **Asimmetria:** In generale, $D_{KL}(q||p) \neq D_{KL}(p||q)$. Per questo non è una vera e propria distanza metrica.
- **Convessità:** La DKL è una funzione convessa nel suo primo argomento, q .

2.3 Somma di Variabili Aleatorie Indipendenti

Consideriamo una sequenza di N variabili aleatorie x_1, x_2, \dots, x_N che sono indipendenti e identicamente distribuite (i.i.d.). Assumiamo che abbiano momento primo (media μ) e secondo (varianza σ^2) finiti. Siamo interessati a caratterizzare la variabile somma:

$$S_N = \sum_{i=1}^N x_i \quad (2.6)$$

Esistono tre livelli di descrizione per il comportamento di S_N per N grande.

2.3.1 Legge dei Grandi Numeri

Questo è il primo e più semplice livello di informazione. Ci dice che, per N molto grande, la somma S_N si concentra attorno al suo valore atteso.

$$S_N \approx N\mu \quad (2.7)$$

O, in modo equivalente, la media campionaria S_N/N converge alla media teorica μ .

2.3.2 Teorema Centrale del Limite(TLC)

Il TLC fornisce un'informazione più dettagliata, descrivendo le fluttuazioni di S_N . Queste fluttuazioni sono di ordine \sqrt{N} e sono note come "piccole deviazioni".

$$S_N \approx N\mu + \sqrt{N\sigma^2}Z \quad (2.8)$$

Il teorema afferma che la variabile standardizzata converge in distribuzione a una variabile Gaussiana con media nulla e varianza unitaria:

$$\frac{S_N - N\mu}{\sqrt{N\sigma^2}} \rightarrow Z \sim \mathcal{N}(0, 1) \quad (2.9)$$

Questo significa che S_N è approssimativamente distribuita come una Gaussiana con media $N\mu$ e varianza $N\sigma^2$.

2.3.3 Teoria delle Grandi Deviazioni

Il terzo livello si occupa di eventi rari, le "grandi deviazioni". Siamo interessati alla probabilità che la somma S_N assuma un valore che si discosta dal suo valore medio di una quantità di ordine N , non \sqrt{N} . Vogliamo calcolare la probabilità di un evento del tipo $S_N = \lambda N$, con $\lambda \neq \mu$. È ragionevole aspettarsi che questa probabilità sia esponenzialmente piccola in N . Perché un evento così raro accada, è necessario che molte delle variabili x_i assumano valori atipici. Se ogni variabile lo fa con una probabilità leggermente inferiore a 1, la probabilità congiunta per N variabili sarà una potenza di N . La teoria postula che:

$$P(S_N = \lambda N) \sim e^{-NI(\lambda)} \quad (2.10)$$

dove $I(\lambda)$ è la **funzione di Cramér** o funzione di rate. Il compito della teoria è calcolare $I(\lambda)$ a partire dalla distribuzione $p(x)$ della singola variabile.

Calcolo di $I(\lambda)$ con il Metodo del Punto di Sella

La probabilità può essere scritta in forma integrale:

$$P(S_N = \lambda N) = \int \prod_{i=1}^N dp(x_i) \delta\left(\sum_i x_i - \lambda N\right) \quad (2.11)$$

Usando la rappresentazione integrale della delta di Dirac, si ottiene:

$$P(S_N = \lambda N) \propto \int \prod_{i=1}^N dp(x_i) \int dq e^{-iq\lambda N + iq \sum_i x_i} \quad (2.12)$$

$$\propto \int dq e^{-iq\lambda N} \left[\int dp(x) e^{iqx} \right]^N \quad (2.13)$$

$$\propto \int_{-i\infty}^{+i\infty} dh e^{-h\lambda N} \left[\int dp(x) e^{hx} \right]^N \quad (2.14)$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo effettuato una rotazione nel piano complesso $h = iq$. Definiamo la **funzione generatrice dei cumulanti** scalata, $R(h)$:

$$R(h) = \log \mathbb{E}_x[e^{hx}] = \log \left(\int dp(x) e^{hx} \right) \quad (2.15)$$

L'integrale (2.14) diventa:

$$P(S_N = \lambda N) \propto \int_{-i\infty}^{+i\infty} dh e^{N(R(h) - \lambda h)} \quad (2.16)$$

Per N grande, questo integrale può essere valutato con il metodo del punto di sella. L'integrale è dominato dal valore di h che rende stazionario l'esponente. Stiamo integrando lungo l'asse immaginario, ma possiamo deformare il cammino di integrazione nel piano complesso per passare attraverso un punto di sella sull'asse reale. Tale punto, h^* , annulla le oscillazioni dell'integrando. Il punto di sella h^* è determinato dalla condizione:

$$\left. \frac{d}{dh} (R(h) - \lambda h) \right|_{h=h^*} = 0 \quad \implies \quad R'(h^*) = \lambda \quad (2.17)$$

Lungo l'asse reale, questo punto corrisponde a un **minimo** dell'esponente (poiché $R''(h) \geq 0$), ma è un **massimo** lungo il cammino di integrazione deformato, dominando così il valore dell'integrale. L'approssimazione del punto di sella fornisce:

$$P(S_N = \lambda N) \sim \exp[N(R(h^*) - \lambda h^*)] \quad (2.18)$$

Confrontando con la forma $e^{-NI(\lambda)}$, identifichiamo la funzione di Cramér:

$$I(\lambda) = \lambda h^*(\lambda) - R(h^*(\lambda)) \quad (2.19)$$

dove $h^*(\lambda)$ è la soluzione di $R'(h) = \lambda$. Questa espressione è una **trasformata di Legendre** della funzione $R(h)$. Può anche essere scritta come:

$$I(\lambda) = \max_h (h\lambda - R(h)) \quad (2.20)$$

Interpretazione fisica: La derivata $R'(h)$ è il valore medio di x calcolato con una distribuzione "deformata" o "tiltata" $p(x)e^{hx}$:

$$R'(h) = \frac{\int dp(x)xe^{hx}}{\int dp(x)e^{hx}} = \langle x \rangle_h \quad (2.21)$$

La condizione del punto di sella $R'(h^*) = \lambda$ significa che stiamo scegliendo un h^* tale da deformare la distribuzione originale in modo che il suo nuovo valore medio sia esattamente λ , l'evento raro che vogliamo osservare. In questo modo, l'evento raro diventa tipico sotto la nuova misura. Il termine λh^* in $I(\lambda)$ sottrae "l'aiuto" che abbiamo introdotto artificialmente per rendere l'evento probabile.

Proprietà di $I(\lambda)$ e Connessione con il TLC

- $R(h)$ e $I(\lambda)$ sono una la trasformata di Legendre dell'altra.
- La derivata seconda $R''(h) = \langle x^2 \rangle_h - \langle x \rangle_h^2 \geq 0$, quindi $R(h)$ è convessa.
- Attraverso le proprietà della trasformata di Legendre, si può mostrare che anche $I(\lambda)$ è sempre convessa: $I''(\lambda) = 1/R''(h^*) \geq 0$.
- La funzione $I(\lambda)$ ha un unico minimo globale in $\lambda = \mu$ (il valore medio), dove $I(\mu) = 0$. Per tutti gli altri valori $\lambda \neq \mu$, $I(\lambda) > 0$.

Vicino al suo minimo μ , possiamo approssimare $I(\lambda)$ con una parabola:

$$I(\lambda) \approx \frac{(\lambda - \mu)^2}{2\sigma^2} \quad (2.22)$$

Sostituendo questa approssimazione nella formula delle grandi deviazioni, si ottiene:

$$P(S_N = \lambda N) \sim e^{-N \frac{(\lambda - \mu)^2}{2\sigma^2}} = \exp \left\{ -\frac{(N\lambda - N\mu)^2}{2N\sigma^2} \right\} \quad (2.23)$$

Questa è esattamente la forma di una distribuzione Gaussiana per la variabile S_N con media $N\mu$ e varianza $N\sigma^2$, **recuperando così il Teorema del Limite Centrale come approssimazione locale della teoria delle grandi deviazioni.**

2.4 Probabilità di una Sequenza Empirica

Consideriamo ora un problema più generale. Invece di guardare solo alla somma delle variabili x_i , analizziamo l'intera sequenza di N osservazioni. Supponiamo che la variabile X possa assumere l valori discreti $\{x_1, \dots, x_l\}$ con probabilità teoriche $\{p_1, \dots, p_l\}$. Dopo N estrazioni, non osserveremo esattamente Np_j occorrenze del valore x_j , ma piuttosto un numero Nq_j , dove q_j è la **frequenza empirica**:

$$q_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbb{I}[x_i = x_j] \quad (2.24)$$

Vogliamo calcolare la probabilità di osservare una specifica sequenza di frequenze empiriche $\{q_1, \dots, q_l\}$ dato che le variabili sono generate dalla distribuzione teorica $\{p_1, \dots, p_l\}$. La probabilità di una specifica sequenza con Nq_j occorrenze di x_j per ogni j è data da:

$$\prod_{j=1}^l p_j^{Nq_j}$$

Il numero di sequenze diverse che corrispondono allo stesso insieme di frequenze empiriche $\{q_j\}$ è dato dal coefficiente multinomiale:

$$\frac{N!}{\prod_{j=1}^l (Nq_j)!}$$

La probabilità totale è quindi:

$$P(\{q_j\}|\{p_j\}) = \frac{N!}{\prod_{j=1}^l (Nq_j)!} \prod_{j=1}^l p_j^{Nq_j} \quad (2.25)$$

Utilizzando l'approssimazione di Stirling per i fattoriali per N grande, si può dimostrare che questa probabilità segue un principio di grandi deviazioni:

$$P(\{q_j\}|\{p_j\}) \sim \exp \left\{ -N \sum_j q_j \log \left(\frac{q_j}{p_j} \right) \right\} \quad (2.26)$$

$$= \exp \{ -ND_{KL}(q||p) \} \quad (2.27)$$

Questo risultato fondamentale mostra che la probabilità di osservare una distribuzione empirica q quando la vera distribuzione è p , è esponenzialmente piccola in N con una rate function data esattamente dalla divergenza di Kullback-Leibler tra le due distribuzioni. Questo principio è alla base di molti metodi moderni di inferenza statistica e machine learning, dove si cerca di minimizzare la divergenza tra un modello generativo e la distribuzione dei dati osservati.

github . com / elisabettagnello

Lezione 3

Data: 08/10/2025

3.1 Funzione di Cramer per una Variabile Binaria

Consideriamo una variabile binaria x che può assumere i valori $+1$ e -1 con probabilità $1/2$.

$$x = \begin{cases} +1 & \text{con } p = 1/2 \\ -1 & \text{con } p = 1/2 \end{cases} \quad (3.1)$$

La funzione di Cramer $I(\lambda)$, che caratterizza le grandi deviazioni della somma di N di tali variabili, può essere calcolata. L'espressione iniziale che si ottiene tramite la trasformata di Legendre è:

$$I(\lambda) = \lambda \operatorname{arctanh}(\lambda) - \log(\cosh(\operatorname{arctanh}(\lambda))) \quad (3.2)$$

Sfruttando le proprietà delle funzioni iperboliche, questa espressione può essere riscritta in una forma molto più simmetrica e interpretabile:

$$I(\lambda) = \frac{1+\lambda}{2} \log(1+\lambda) + \frac{1-\lambda}{2} \log(1-\lambda) \quad (3.3)$$

Questa forma può essere ulteriormente espressa in relazione a una quantità di tipo entropico. Possiamo scrivere:

$$I(\lambda) = \log(2) - S(\lambda) \quad (3.4)$$

dove $S(\lambda)$ è l'entropia di una variabile di Bernoulli che assume due valori con probabilità $p_1 = \frac{1+\lambda}{2}$ e $p_2 = \frac{1-\lambda}{2}$:

$$S(\lambda) = -\frac{1+\lambda}{2} \log\left(\frac{1+\lambda}{2}\right) - \frac{1-\lambda}{2} \log\left(\frac{1-\lambda}{2}\right) \quad (3.5)$$

È ragionevole che la funzione di Cramer sia legata all'opposto dell'entropia: dove l'entropia è grande (massima incertezza, $\lambda = 0$), la funzione di Cramer è piccola (minima), indicando che il valore medio è il più probabile. Viceversa, dove l'entropia è piccola (vicino a $\lambda = \pm 1$), la funzione di Cramer è grande, indicando che le deviazioni estreme sono improbabili.

Il grafico di $I(\lambda)$ in funzione di λ è una curva convessa, con un minimo in $\lambda = 0$ dove vale zero. Ai bordi del dominio, per $\lambda \rightarrow \pm 1$, la funzione tende a $\log(2)$.

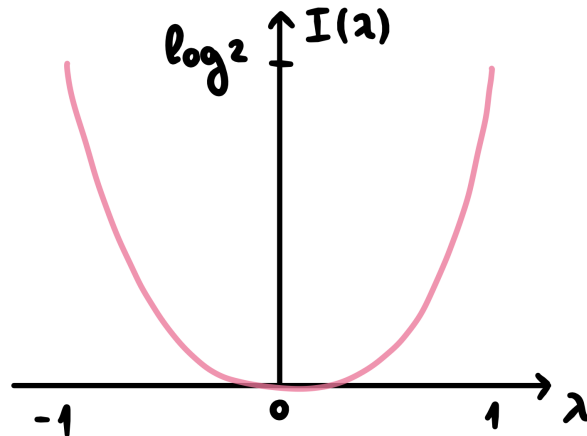


Figura 3.1: $I(\lambda)$ in funzione di λ

Nell'intorno di $\lambda = 0$, la funzione può essere approssimata da una parabola $I(\lambda) \approx \lambda^2/2$. Questo risultato è coerente con il Teorema del Limite Centrale: la somma di variabili con valore di aspettazione nullo e varianza unitaria tende a una distribuzione gaussiana.

La convessità della funzione di Cramer è una proprietà cruciale per le somme di variabili indipendenti. Essa garantisce l'esistenza di un unico minimo, e quindi di un unico valore più probabile (tipico) per la media campionaria. Allontanandosi da questo valore, la probabilità di osservare una certa media decade esponenzialmente in N . Questa caratteristica fondamentale viene a mancare quando si considerano variabili correlate, che è l'argomento che affronteremo ora. Il mondo non è fatto di variabili indipendenti, e la principale conseguenza della correlazione è la possibile perdita di convessità, che porta alla comparsa di più minimi per la funzione di Cramer.

3.2 Introduzione alle Variabili Correlate

Per descrivere un sistema di due variabili correlate, X e Y , è necessario utilizzare la **distribuzione di probabilità congiunta**, $P_{X,Y}(x,y)$. Per semplicità di notazione, la indicheremo come $P(x,y)$.

A partire dalla distribuzione congiunta, si possono definire altre due distribuzioni fondamentali.

Le **distribuzioni marginali** si ottengono "integrando via" (o sommando, nel caso discreto) le altre variabili. Forniscono la distribuzione di probabilità di una singola variabile, indipendentemente dal valore delle altre.

$$P_X(x) = \sum_y P(x,y) \quad (3.6)$$

$$P_Y(y) = \sum_x P(x,y) \quad (3.7)$$

Le **distribuzioni condizionali** descrivono la probabilità di una variabile, dato che un'altra variabile ha assunto un valore specifico. La distribuzione congiunta può essere fattorizzata in due modi equivalenti:

$$P(x,y) = P_{Y|X}(y|x)P_X(x) = P_{X|Y}(x|y)P_Y(y) \quad (3.8)$$

Questo significa che per generare una coppia (x,y) si può prima estrarre x dalla sua marginale $P_X(x)$ e poi, condizionatamente al valore di x ottenuto, estrarre y da $P_{Y|X}(y|x)$, o viceversa.

Uguagliando le due espressioni per la probabilità congiunta, si ottiene immediatamente il **Teorema di Bayes**:

$$P_{X|Y}(x|y) = \frac{P_{Y|X}(y|x)P_X(x)}{P_Y(y)} \quad (3.9)$$

Questa formula, sebbene sia una semplice identità matematica, assume un significato profondo quando si passa dal concetto di **correlazione** a quello di **causalità**. È un principio fondamentale da tenere sempre a mente: **correlazione non implica causalità**. Il fatto che due eventi siano statisticamente correlati non significa che uno sia la causa dell'altro. Esistono innumerevoli esempi di "correlazioni spurie", in cui due serie di dati mostrano andamenti quasi identici pur essendo causalmente slegate.

Il Teorema di Bayes acquista il suo potere inferenziale quando si ipotizza un modello causale, ad esempio che una variabile X (la causa) influenzi una variabile Y (l'effetto). In questo contesto, i termini del teorema assumono un'interpretazione fisica precisa:

- $P_{X|Y}(x|y)$ è la **distribuzione a posteriori**: la probabilità (o la nostra credenza) sulla causa x dopo aver osservato l'effetto y .
- $P_X(x)$ è la **distribuzione a priori** (o *prior*): la nostra conoscenza o aspettativa sulla variabile X prima di effettuare qualsiasi misura su Y .
- $P_{Y|X}(y|x)$ è la **verosimiglianza** (o *likelihood*): questa è la probabilità condizionata "in avanti", che descrive come la causa x produce l'effetto y . Questo termine incapsula il nostro **modello** del processo fisico.
- $P_Y(y)$ è un termine di normalizzazione (l'*evidence*).

L'inferenza bayesiana consiste quindi nell'utilizzare un'osservazione (y) e un modello ($P_{Y|X}(y|x)$) per aggiornare la nostra conoscenza su una causa non osservata (x), passando dalla distribuzione a priori a quella a posteriori.

Se le variabili X e Y sono indipendenti, l'intero formalismo si semplifica notevolmente. La condizione di indipendenza è che la distribuzione congiunta si fattorizzi nel prodotto delle marginali:

$$P(x, y) = P_X(x)P_Y(y) \quad (3.10)$$

Di conseguenza, le distribuzioni condizionali diventano indipendenti dalla variabile condizionante:

$$P_{Y|X}(y|x) = P_Y(y) \quad (3.11)$$

$$P_{X|Y}(x|y) = P_X(x) \quad (3.12)$$

3.2.1 Entropia e Informazione Mutua

A ogni distribuzione di probabilità possiamo associare un'entropia di Shannon, che misura l'incertezza o la quantità di informazione.

- **Entropia Congiunta:** Misura l'incertezza totale della coppia di variabili (X, Y) .

$$H_{X,Y} = - \sum_{x,y} P(x, y) \log P(x, y) \quad (3.13)$$

- **Entropia Condizionale:** Misura l'incertezza media residua su Y quando il valore di X è noto. Si calcola mediando l'entropia di $P_{Y|X}(y|x)$ su tutti i possibili valori di x .

$$H_{Y|X} = - \sum_x P_X(x) \sum_y P_{Y|X}(y|x) \log P_{Y|X}(y|x) \quad (3.14)$$

Queste quantità sono legate dalla **regola della catena** (*chain rule*) per l'entropia:

$$H_{X,Y} = H_X + H_{Y|X} \quad (3.15)$$

L'incertezza totale è la somma dell'incertezza su X più l'incertezza residua su Y una volta noto X .

Per quantificare in modo simmetrico l'informazione condivisa tra due variabili, si introduce l'**Informazione Mutua** (*Mutual Information*), una quantità fondamentale nell'analisi dati e nell'inferenza.

$$I_{X,Y} = \sum_{x,y} P(x, y) \log \frac{P(x, y)}{P_X(x)P_Y(y)} \quad (3.16)$$

Questa quantità è la divergenza di Kullback-Leibler tra la distribuzione congiunta $P(x, y)$ e la distribuzione che le variabili avrebbero se fossero indipendenti, $P_X(x)P_Y(y)$. Quindi, $I_{X,Y} = D_{KL}(P(x, y) || P_X(x)P_Y(y))$.

Proprietà fondamentali:

- $I_{X,Y} \geq 0$.
- $I_{X,Y} = 0$ se e solo se X e Y sono indipendenti.

L'informazione mutua può essere espressa in termini di entropie, rivelandone il significato intuitivo:

$$I_{X,Y} = H_Y - H_{Y|X} = H_X - H_{X|Y} \quad (3.17)$$

Essa rappresenta la **riduzione dell'incertezza** su una variabile (es. H_Y) che si ottiene grazie alla conoscenza dell'altra (misurata dall'incertezza residua $H_{Y|X}$). Se le variabili sono perfettamente correlate (es. $Y = f(X)$), allora $H_{Y|X} = 0$ e $I_{X,Y} = H_Y$: conoscere X rimuove tutta l'incertezza su Y .

Dalla Statistica Classica alla Meccanica Statistica in Alta Dimensione

La statistica classica si occupa tipicamente di sistemi con un numero basso di variabili. Quando il numero di variabili N diventa molto grande ($N \gg 1$), si entra nel campo della *High-Dimensional Statistics*. In questo regime, molti metodi classici falliscono (la cosiddetta "maledizione dell'alta dimensionalità", *curse of dimensionality*), ma emergono nuovi fenomeni collettivi che possono essere studiati con gli strumenti della meccanica statistica.

Per i fisici statistici, l'alta dimensionalità è una "benedizione" (*blessing of dimensionality*), perché nel limite $N \rightarrow \infty$ (limite termodinamico) le fluttuazioni si riducono e le quantità macroscopiche si concentrano attorno ai loro valori medi, rendendo i calcoli analitici possibili e predittivi. L'intuizione geometrica cambia radicalmente: per esempio, una distribuzione gaussiana N -dimensionale, che in bassa dimensione ha la sua massima probabilità nell'origine, in alta dimensione concentra quasi tutta la sua massa su un guscio sferico a distanza \sqrt{N} dall'origine.

3.3 Il Modello di Ising

Il modello di Ising è il modello archetipico per lo studio di un gran numero di variabili binarie interagenti. Fu proposto da Wilhelm Lenz e studiato dal suo dottorando Ernst Ising nel 1923 per descrivere il fenomeno del ferromagnetismo.

Consideriamo un insieme di N variabili binarie $S_i \in \{-1, +1\}$, chiamate **spin**, disposte sui vertici di un grafo $G = (V, E)$. L'energia del sistema, descritta dall'Hamiltoniana, è data da:

$$H(\underline{S}) = -J \sum_{(i,j) \in E} S_i S_j - h \sum_{i \in V} S_i \quad (3.18)$$

dove:

- Il primo termine descrive l'interazione a coppie tra spin connessi da un arco del grafo. J è la **costante di accoppiamento**. Se $J > 0$ (**ferromagnetico**), lo stato di minima energia è quello in cui gli spin sono allineati ($S_i S_j = 1$), favorendo l'ordine.
- Il secondo termine descrive l'interazione degli spin con un **campo magnetico esterno** h . Lo stato di minima energia favorisce l'allineamento degli spin con il campo.

Il comportamento del modello dipende crucialmente dalla **topologia** del grafo (catena 1D, reticolo quadrato 2D, ecc.) e dalla sua **dimensione** D . Per i reticoli regolari, si definiscono due dimensioni critiche:

- **Lower Critical Dimension (LCD)**: È la dimensione minima al di sotto della quale non può esistere una transizione di fase a temperatura finita. Per il modello di Ising, $LCD = 1$.
- **Upper Critical Dimension (UCD)**: È la dimensione al di sopra della quale il comportamento critico del sistema diventa indipendente dalla dimensione e viene descritto correttamente dalla teoria di campo medio. Per il modello di Ising, $UCD = 4$.

3.3.1 Il Modello di Ising Unidimensionale (1D)

Ising, nella sua tesi, risolse il modello su una catena lineare ($D = 1$), trovando che non presenta una transizione di fase a $T > 0$, un risultato deludente che lo portò a concludere erroneamente che il modello non potesse descrivere il ferromagnetismo e ad abbandonare la fisica.

L'Hamiltoniana 1D con interazioni ai primi vicini è:

$$H(\underline{S}) = -J \sum_i S_i S_{i+1} - h \sum_i S_i \quad (3.19)$$

Le **condizioni al contorno** sono importanti:

- **Open Boundary Conditions (OBC)**: La catena è aperta. La somma sulle interazioni va da $i = 1$ a $N - 1$.
- **Closed/Periodic Boundary Conditions (CBC)**: La catena è chiusa ad anello, con $S_{N+1} \equiv S_1$. La somma va da $i = 1$ a N .

Nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$), le due condizioni portano agli stessi risultati per le grandezze intensive.

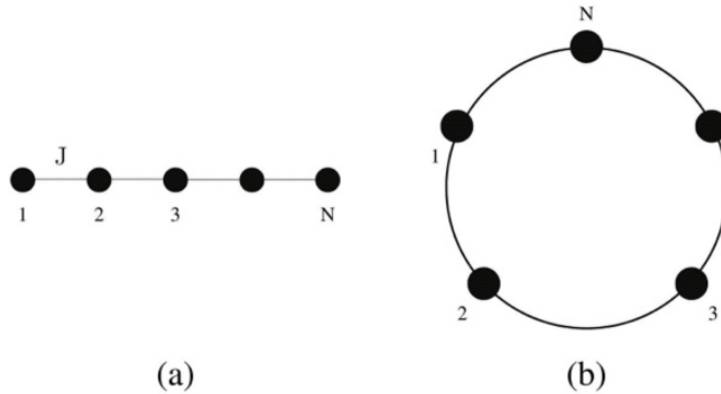


Figura 3.2: Modello di Ising 1D.

Risoluzione del Modello di Ising 1D

Risolvere un modello di meccanica statistica significa calcolare la sua **funzione di partizione** Z nell'insieme canonico.

$$Z = \sum_{\{\underline{S}\}} e^{-\beta H(\underline{S})} \quad (3.20)$$

dove $\beta = 1/T$ (poniamo $k_B = 1$) e la somma è su tutte le 2^N configurazioni di spin.

Da Z si deriva l'**energia libera di Helmholtz** $F = -T \log Z$.

Poiché $Z \propto e^N$ e $F \propto N$, si lavora con l'energia libera intensiva $f = F/N$, che è una quantità di ordine 1 nel limite termodinamico. Tutte le grandezze termodinamiche si ottengono derivando f rispetto ai parametri esterni (β e h):

- **Energia libera intensiva:** $f(\beta, h) = -\frac{1}{N\beta} \log Z$
- **Energia interna:** $\epsilon = \frac{\langle H \rangle}{N} = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta} = f + \beta \frac{\partial f}{\partial \beta}$.
- **Entropia:** $S = \beta^2 \frac{\partial f}{\partial \beta}$.
- **Magnetizzazione:** $m = \frac{\langle \sum_i S_i \rangle}{N} = -\frac{\partial f}{\partial h}$.
- **Suscettività magnetica:** $\chi_m = \frac{\partial m}{\partial h} = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}$.

Calcolo della Funzione di Partizione (con $h=0$)

Consideriamo il caso $h = 0$.

$$Z = \sum_{\{\underline{S}\}} e^{\beta J \sum_i S_i S_{i+1}} = \sum_{\{\underline{S}\}} \prod_i e^{\beta J S_i S_{i+1}} \quad (3.21)$$

Utilizziamo la seguente identità:

$$e^{AS} = \cosh(A)[1 + S \tanh(A)] \quad (3.22)$$

per $S = \pm 1$.

Applicandola a ogni termine del prodotto con $A = \beta J$ e $S = S_i S_{i+1}$, otteniamo:

$$Z = [\cosh(\beta J)]^M \sum_{\{S\}} \prod_i (1 + S_i S_{i+1} \tanh(\beta J)) \quad (3.23)$$

dove M è il numero di interazioni ($M = N - 1$ per OBC, $M = N$ per CBC).

Quando si espande il prodotto e si somma su tutte le configurazioni di spin, sopravvivono solo i termini in cui ogni variabile S_k compare con potenza pari.

- **OBC:** L'unico termine che sopravvive è quello in cui si prende "1" da ogni fattore, poiché qualsiasi altra scelta lascerebbe gli spin ai bordi con potenza dispari. La somma vale quindi 1×2^N .

$$Z_{OBC} = 2^N [\cosh(\beta J)]^{N-1} \quad (3.24)$$

- **CBC:** Sopravvivono due termini: prendere tutti "1" (contributo 1) e prendere tutti i termini con $\tanh(\beta J)$, che formano un ciclo chiuso (contributo $[\tanh(\beta J)]^N$).

$$Z_{CBC} = 2^N [\cosh(\beta J)]^N (1 + [\tanh(\beta J)]^N) \quad (3.25)$$

Nel limite $N \rightarrow \infty$, i risultati per OBC e CBC coincidono. L'energia libera intensiva $f = -\frac{1}{\beta N} \log Z$ è:

$$f = -\frac{1}{\beta} \log(2 \cosh(\beta J)) = -T \log(2) - T \log(\cosh(J/T)) \quad (3.26)$$

L'energia interna intensiva è:

$$\epsilon = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta} = -J \tanh(\beta J) \quad (3.27)$$

Tutte le grandezze sono analitiche per $T > 0$, confermando l'assenza di una transizione di fase a temperatura finita. A $T = 0$, $\epsilon = -J$ (stato fondamentale ordinato), mentre a $T \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow 0$ (stato disordinato).

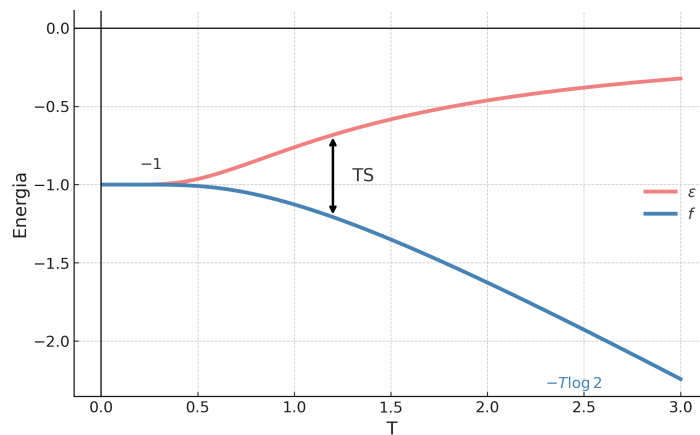


Figura 3.3: Grandezze termodinamiche del modello di Ising 1D in funzione della temperatura.

3.3.2 Funzioni di Correlazione Spaziale

Sebbene non ci sia una transizione di fase, il sistema sviluppa ordine a $T = 0$. Studiamo questo attraverso la **funzione di correlazione spaziale** tra due spin a distanza r :

$$C(r) = \langle S_i S_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} S_i S_{i+r} e^{-\beta H(\underline{S})} \quad (3.28)$$

Per omogeneità (usando CBC), possiamo calcolare $\langle S_0 S_r \rangle$. Con un calcolo analogo a quello per Z , si trova che i termini che sopravvivono nel numeratore sono quelli che formano una catena di "link" tra il sito 0 e il sito r .

$$C(r) = \frac{[\tanh(\beta J)]^r + [\tanh(\beta J)]^{N-r}}{1 + [\tanh(\beta J)]^N} \quad (3.29)$$

Nel limite termodinamico $N \rightarrow \infty$:

$$C(r) = [\tanh(\beta J)]^r \quad (3.30)$$

Questa è la forma di un **decadimento esponenziale**:

$$C(r) = e^{-r/\xi(T)} \quad (3.31)$$

dove la **lunghezza di correlazione** $\xi(T)$ è:

$$\xi(T) = -\frac{1}{\log(\tanh(\beta J))} \quad (3.32)$$

Quando $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$), $\tanh(\beta J) \rightarrow 1$, $\log(\tanh(\beta J)) \rightarrow 0^-$, e quindi $\xi(T) \rightarrow \infty$. La lunghezza di correlazione **diverge a temperatura nulla**. Per $T \ll J$, si ha:

$$\xi(T) \approx \frac{1}{Z} e^{2\beta J} \quad (3.33)$$

Questa divergenza esponenziale significa che, a temperature molto basse, il sistema sviluppa correlazioni su distanze macroscopiche, avvicinandosi allo stato ordinato del ferromagnete. La dinamica di rilassamento verso questo stato diventa infinitamente lenta, un fenomeno noto come "rallentamento critico".

github . com / elisabettagnello

Lezione 4

Data: 09/10/2025

4.1 Il Metodo della Matrice di Trasferimento

In questa lezione continuiamo l'analisi del modello di Ising, introducendo una tecnica risolutiva per sistemi unidimensionali nota come il metodo della **Matrice di Trasferimento**. Questo approccio si rivela estremamente potente, non solo per il calcolo della funzione di partizione, ma anche per ottenere grandezze fisiche come le marginali e le funzioni di correlazione. L'idea fondamentale è quella di "propagare" l'informazione lungo il sistema, costruendo la soluzione un passo (o uno spin) alla volta.

Consideriamo un sistema di spin unidimensionale con condizioni al contorno periodiche (CBC). L'Hamiltoniana del sistema è data da:

$$H(\underline{S}) = -J \sum_i S_i S_{i+1} - h \sum_i S_i \quad (4.1)$$

dove la somma è estesa a tutti gli spin del sistema. La funzione di partizione totale del sistema è:

$$Z = \sum_{\underline{S}} e^{-\beta H(\underline{S})} \quad (4.2)$$

La Funzione di Partizione Parziale

Il cuore del metodo consiste nell'introdurre una **funzione di partizione parziale**, $Z_{i,j}(S_i, S_j)$, definita su un sotto-insieme di spin tra il sito i e il sito j . Questa funzione non è un singolo numero, ma un oggetto che dipende dai valori degli spin ai bordi di questo sotto-insieme, S_i e S_j . Fissati questi due valori, sommiamo su tutte le configurazioni degli spin interni.

$$Z_{i,j}(S_i, S_j) = \sum_{\{s_k\}_{i < k < j}} e^{-\beta H_{i,j}(\{s_k\})} \quad (4.3)$$

Questa funzione contiene molta più informazione rispetto alla funzione di partizione totale definita sulla stessa regione. Infatti, mentre la funzione di partizione complessiva fornisce un unico valore che tiene conto di tutte le configurazioni possibili, la funzione parziale mantiene esplicitamente la dipendenza dagli spin ai bordi.

Poiché ciascuno di essi può assumere due valori, $S_i, S_j \in \{+1, -1\}$, la funzione $Z_{i,j}(S_i, S_j)$ non rappresenta un solo numero ma un insieme di *quattro* valori distinti:

$$Z_{i,j}(S_i, S_j) \longrightarrow \begin{cases} Z_{i,j}(+1, +1), \\ Z_{i,j}(+1, -1), \\ Z_{i,j}(-1, +1), \\ Z_{i,j}(-1, -1). \end{cases}$$

Ciascuno di questi termini corrisponde al contributo statistico della regione compresa tra i e j sotto specifiche condizioni ai bordi. In questo senso, $Z_{i,j}$ può essere interpretata come una *matrice* 2×2 che codifica l'influenza reciproca tra i due spin estremi.

La funzione di partizione totale Z può essere recuperata da quella parziale. Ad esempio, considerando l'intera catena da $i = 1$ a $j = N$ e imponendo la condizione periodica $S_{N+1} = S_1$, si ha:

$$Z = \sum_{S_1} Z_{1,N}(S_1, S_1) \quad (4.4)$$

L'utilità della funzione di partizione parziale risiede nella possibilità di scrivere una relazione ricorsiva. Supponiamo di conoscere $Z_{i,j}(S_i, S_j)$ e di voler calcolare la funzione di partizione per una catena più lunga di uno spin, $Z_{i,j+1}(S_i, S_{j+1})$. Possiamo ottenerla aggiungendo l'interazione dello spin S_j con il nuovo spin S_{j+1} e sommando su tutti i possibili valori di S_j .

$$Z_{i,j+1}(S_i, S_{j+1}) = \sum_{S_j} Z_{i,j}(S_i, S_j) e^{\beta J S_j S_{j+1} + \beta h S_{j+1}} \quad (4.5)$$

Questo passaggio definisce implicitamente una "matrice" che trasferisce l'informazione dal passo j al passo $j + 1$. Tuttavia, l'espressione $e^{\beta J S_j S_{j+1} + \beta h S_{j+1}}$ non è simmetrica rispetto allo scambio degli indici j e $j + 1$, il che potrebbe portare ad autovalori complessi, complicando l'analisi.

Simmetrizzazione della Matrice di Trasferimento

Per ovviare al problema della simmetria, possiamo riscrivere in modo equivalente l'Hamiltoniana del sistema, distribuendo il campo magnetico locale h a metà su due interazioni adiacenti.

$$H(\underline{S}) = -J \sum_i S_i S_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1}) \quad (4.6)$$

Con questa forma, il termine che si aggiunge a ogni passo diventa simmetrico. Definiamo quindi la **Matrice di Trasferimento** $T(S_j, S_{j+1})$ come:

$$T(S_j, S_{j+1}) = e^{\beta J S_j S_{j+1} + \frac{\beta h}{2} (S_j + S_{j+1})} \quad (4.7)$$

Essendo gli spin binari ($S = \pm 1$), questa può essere rappresentata come una matrice 2×2 , con righe indicizzate da S_j e colonne da S_{j+1} .

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta h} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta h} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Questa matrice è ora manifestamente simmetrica.

Funzione di Partizione e Autovalori

Utilizzando la matrice di trasferimento, la funzione di partizione totale per una catena di N spin con condizioni periodiche può essere espressa elegantemente come la traccia della potenza N -esima di T .

$$Z = \sum_{S_1, \dots, S_N} T(S_1, S_2) T(S_2, S_3) \cdots T(S_N, S_1) = \text{Tr}(T^N) \quad (4.9)$$

L'operazione di traccia implementa la chiusura del ciclo, ovvero l'identificazione di S_{N+1} con S_1 .

Poiché la matrice T è simmetrica, ammette due autovalori reali, λ_1 e λ_2 . La funzione di partizione diventa:

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (4.10)$$

Nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$), il termine dominante è quello associato all'autovalore più grande, che per convenzione chiamiamo λ_1 ($\lambda_1 > \lambda_2$).

$$Z \approx \lambda_1^N \quad (4.11)$$

L'energia libera di Helmholtz per spin, $f = -(\frac{1}{\beta N}) \log Z$, è quindi determinata unicamente dall'autovalore principale.

$$f = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_1 \quad (4.12)$$

Questo risultato è di fondamentale importanza: la complessità di una somma su 2^N stati è stata ridotta al calcolo dell'autovalore più grande di una piccola matrice 2×2 . Svolgendo i calcoli per la matrice T , si ottiene:

$$\lambda_1 = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right] \quad (4.13)$$

$$\lambda_2 = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta h) - \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right] \quad (4.14)$$

L'espressione esatta per l'energia libera in presenza di campo magnetico è:

$$f = -J - \frac{1}{\beta} \log \left(\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right) \quad (4.15)$$

Suscettività Magnetica e Funzioni di Correlazione

Avendo a disposizione l'energia libera per qualsiasi valore del campo h , possiamo calcolare la magnetizzazione m e la suscettività magnetica χ_m .

$$m = -\frac{\partial f}{\partial h} = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (4.16)$$

Per campi piccoli ($h \rightarrow 0$), la magnetizzazione risponde linearmente, $m \approx \chi_m h$. La suscettività risulta:

$$\chi_m \approx \beta e^{2\beta J} \quad (4.17)$$

4.1.1 Teorema di Fluttuazione-Dissipazione

Esiste una relazione profonda e generale, nota come **Teorema di Fluttuazione-Dissipazione**, che collega la risposta di un sistema a una perturbazione esterna (la suscettività) alle fluttuazioni interne del sistema in equilibrio (la funzione di correlazione).

La suscettività è definita come $\chi = \frac{\partial m}{\partial h}$. Partendo dalla definizione di magnetizzazione media $\langle S_i \rangle$:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \frac{\sum_S S_i e^{-\beta H}}{\sum_S e^{-\beta H}} \quad (4.18)$$

Derivando rispetto ad h , e ricordando che $H = H_0 - h \sum_j S_j$, otteniamo:

$$\chi = \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle \right) = \frac{\beta}{N} \sum_{i,j} (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) \quad (4.19)$$

Sfruttando l'invarianza traslazionale del sistema, possiamo riscrivere la doppia somma come una singola somma sulla distanza relativa $r = j - i$:

$$\chi = \beta \sum_r (\langle S_0 S_r \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_r \rangle) = \beta \sum_r C(r) \quad (4.20)$$

La suscettività è proporzionale all'integrale (o somma) della funzione di correlazione connessa $C(r)$.

Dato che la funzione di correlazione per il modello di Ising 1D decade esponenzialmente con una forma del tipo $C(r) \propto e^{-|r|/\xi}$, possiamo approssimare la somma con un integrale nel continuo:

$$\sum_r C(r) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dr e^{-|r|/\xi} = 2 \int_0^{+\infty} dr e^{-r/\xi} = 2\xi \quad (4.21)$$

Questo mostra che la suscettività è direttamente proporzionale alla lunghezza di correlazione. Dai calcoli espliciti si trova che la lunghezza di correlazione è $\xi = \frac{1}{2} e^{2\beta J}$, che, inserita nella relazione precedente, ci porta a:

$$\chi_m \propto \beta(2\xi) = \beta \left(2 \cdot \frac{1}{2} e^{2\beta J} \right) = \beta e^{2\beta J} \quad (4.22)$$

Questo spiega perché χ_m diverge esponenzialmente a basse temperature: è un riflesso del fatto che la lunghezza di correlazione ξ sta divergendo.

4.1.2 Autovettori e il Loro Significato Fisico

La matrice di trasferimento contiene ancora più informazioni. Oltre agli autovalori, anche i suoi autovettori hanno un preciso significato fisico. Poiché T è simmetrica e reale, possiamo scomporla spettralmente:

$$T(S, \tilde{S}) = \lambda_1 v_1(S) v_1(\tilde{S}) + \lambda_2 v_2(S) v_2(\tilde{S}) \quad (4.23)$$

dove v_1 e v_2 sono gli autovettori ortonormali.

La probabilità marginale di trovare un singolo spin nello stato S_1 , $p(S_1)$, si ottiene sommando su tutti gli altri spin. Nel formalismo della matrice di trasferimento, questo porta a:

$$p(S_1) = \frac{T^N(S_1, S_1)}{Z} \quad (4.24)$$

Utilizzando la decomposizione spettrale e considerando il limite $N \rightarrow \infty$, dove λ_1 domina:

$$T^N(S_1, S_1) \approx \lambda_1^N v_1(S_1) v_1(S_1) \quad (4.25)$$

Poiché $Z \approx \lambda_1^N$, otteniamo un risultato notevole:

$$p(S_1) = [v_1(S_1)]^2 \quad (4.26)$$

Il quadrato delle componenti dell'autovettore principale fornisce le probabilità marginali dello spin. Per il modello di Ising, la probabilità marginale $p(S)$ di un singolo spin, parametrizzata tramite la magnetizzazione media $m = \langle S \rangle$, è data da:

$$p(S) = \begin{cases} \frac{1+m}{2} & , \text{ se } S = +1 \\ \frac{1-m}{2} & , \text{ se } S = -1 \end{cases} \quad (4.27)$$

Gli autovettori, quindi, assumono la forma:

$$v_1 = \left(\sqrt{\frac{1+m}{2}}, \sqrt{\frac{1-m}{2}} \right), \quad v_2 = \left(\sqrt{\frac{1-m}{2}}, -\sqrt{\frac{1+m}{2}} \right) \quad (4.28)$$

È facile dimostrare che:

$$\begin{aligned} v_1^2(s) &= \frac{1+ms}{2} \\ \sum_{s=\{\pm 1\}} v_{1,2}^2(s) &= 1 \\ \sum_{s=\{\pm 1\}} s v_1(s) v_1(s) &= m \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\sum_{s=\{\pm 1\}} s v_1(s) v_2(s) = \sqrt{1-m^2} \quad (4.30)$$

4.1.3 Funzione di Correlazione

Il secondo autovalore, λ_2 , che finora non abbiamo utilizzato, gioca un ruolo cruciale nel determinare il decadimento della funzione di correlazione. Per dimostrarlo, calcoliamo il valore di aspettazione $\langle S_i S_j \rangle$ utilizzando il formalismo della matrice di trasferimento. L'idea è di inserire gli operatori di spin S_i e S_j nella catena di matrici che costituisce la funzione di partizione.

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{\sum_{\underline{S}} S_i S_j e^{-\beta H}}{Z} = \frac{1}{Z} \text{Tr} (T \cdots T S_i T \cdots T S_j T \cdots T) \quad (4.31)$$

Raggruppando i prodotti di matrici, l'espressione diventa:

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{S_i, S_j} S_i T^{j-i}(S_i, S_j) S_j T^{N-(j-i)}(S_j, S_i) \quad (4.32)$$

Per semplicità e sfruttando l'invarianza traslazionale, poniamo $i = 0$ e $j = r$. L'espressione da calcolare è quindi:

$$\langle S_0 S_r \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{S_0, S_r} S_0 T^r(S_0, S_r) S_r T^{N-r}(S_r, S_0) \quad (4.33)$$

Ora sostituiamo la decomposizione spettrale di $T^k(S, \tilde{S}) = \sum_{\alpha=1,2} \lambda_\alpha^k v_\alpha(S) v_\alpha(\tilde{S})$ all'interno della somma. L'espressione diventa un prodotto di quattro termini, due per T^r e due per T^{N-r} .

$$\begin{aligned} \langle S_0 S_r \rangle = Z^{-1} \sum_{S_0, S_r} S_0 (\lambda_1^r v_1(S_0) v_1(S_r) + \lambda_2^r v_2(S_0) v_2(S_r)) \times \\ S_r (\lambda_1^{N-r} v_1(S_r) v_1(S_0) + \lambda_2^{N-r} v_2(S_r) v_2(S_0)) \end{aligned} \quad (4.34)$$

Nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$), consideriamo che $Z \approx \lambda_1^N$. I termini dominanti nella somma sono quelli che contengono λ_1^N . Si hanno due contributi principali:

1. Il prodotto dei termini con λ_1 da entrambe le parentesi.
2. I prodotti "incrociati" che combinano λ_1^r con λ_2^{N-r} e λ_2^r con λ_1^{N-r} .

Analizziamo il primo contributo:

$$Z^{-1} \lambda_1^r \lambda_1^{N-r} \left(\sum_{S_0} S_0 v_1(S_0)^2 \right) \left(\sum_{S_r} S_r v_1(S_r)^2 \right) \quad (4.35)$$

Poiché $Z \approx \lambda_1^N$, il fattore λ_1^N si cancella. Ricordando che $v_1(S)^2 = p(S)$, le somme non sono altro che il valore medio dello spin, $\langle S \rangle = m$. Questo termine è quindi m^2 , ovvero $\langle S_0 \rangle \langle S_r \rangle$.

Analizziamo ora uno dei termini incrociati (l'altro è identico):

$$Z^{-1} \lambda_2^r \lambda_1^{N-r} \left(\sum_{S_0} S_0 v_2(S_0) v_1(S_0) \right) \left(\sum_{S_r} S_r v_2(S_r) v_1(S_r) \right) \quad (4.36)$$

Il fattore $Z^{-1} \lambda_1^{N-r} = (\lambda_1^N)^{-1} \lambda_1^{N-r} = \lambda_1^{-r}$ si combina con λ_2^r per dare $(\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^r$. Le due somme sono identiche e il loro quadrato è $(\sum_S S v_1(S) v_2(S))^2$. Svolgendo il calcolo si trova che questo termine vale $(1 - m^2)$.

Mettendo insieme i pezzi, otteniamo che la funzione di correlazione connessa, $C^c(r) = \langle S_0 S_r \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_r \rangle$, è data dal solo termine incrociato:

$$C(r) = (1 - m^2) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r \quad (4.37)$$

Questo risultato è fondamentale: dimostra che la correlazione decade esponenzialmente con la distanza r . Il tasso di decadimento è controllato dal rapporto tra il secondo e il primo autovalore, definendo una **lunghezza di correlazione** ξ :

$$C(r) \propto e^{-r/\xi} \quad \text{con} \quad \xi = -\frac{1}{\log(|\lambda_2/\lambda_1|)} \quad (4.38)$$

Un punto critico, dove le correlazioni diventano a lungo raggio ($\xi \rightarrow \infty$), corrisponde alla situazione in cui i due autovalori diventano degeneri, $\lambda_2 \rightarrow \lambda_1$.

Lezione 5

Data: 10/10/2025

5.1 Metodo della Matrice di Trasferimento 1D

Usando il metodo della matrice di trasferimento, si possono calcolare le proprietà di un sistema 1D.

L'energia libera è data dal primo autovalore λ_1 :

$$f = -T \log(\lambda_1) \quad (5.1)$$

La funzione di correlazione $C(r)$ tra due spin a distanza r decade esponenzialmente:

$$C(r) = (1 - m^2) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r \propto e^{-r/\xi} \quad (5.2)$$

Dove ξ è la lunghezza di correlazione:

$$\xi = \frac{1}{\log \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)} \quad (5.3)$$

Il rapporto degli autovalori per il modello di Ising 1D è:

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}{\cosh(\beta h) - \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (5.4)$$

Se $T \ll 1$ si ha:

$$\xi \approx \frac{1}{2\beta h} \quad (5.5)$$

La lunghezza di correlazione ξ diverge (indicando una transizione di fase) solo se $h = 0$ e $T \rightarrow 0$. Se $h \neq 0$, la lunghezza di correlazione è sempre finita e dipende dal campo esterno. La presenza di un campo esterno pone un cut-off sulla correlazione: il sistema è meno correlato.

5.1.1 Modello di Ising su una Striscia (2D)

Si può estendere il metodo della matrice di trasferimento a una striscia 2D di larghezza L , con condizioni periodiche al bordo. In questo caso, invece di imporre condizioni su un singolo spin, si condizionano intere colonne.

Ogni colonna ha 2^L possibili configurazioni. La matrice di trasferimento T è quindi una matrice $2^L \times 2^L$. Si definisce una "supervariabile" $\vec{s} = (s_1, \dots, s_L)$ per ricondursi a un sistema 1D, le cui "variabili" (stati della colonna) hanno L dimensioni.

Nel limite $L \rightarrow \infty$, si ritrova la soluzione di Onsager per il 2D.

5.1.2 Modello con Campo Alternato (Staggered) DA RIVEDE-RE

Si considera un modello 1D con un campo magnetico alternato (staggered): $h_i = (-1)^i h$. Questo è equivalente a un modello antiferromagnetico in un campo costante.

La matrice di trasferimento è:

$$T = \begin{pmatrix} e^{-\beta J + \beta h} & e^{\beta J} \\ e^{\beta J} & e^{-\beta J + \beta h} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

Questo sistema presenta due punti singolari (in corrispondenza di $h = \pm 2J$) invece di uno solo come nel caso ferromagnetico con h costante. Questo avviene perché in quei punti l'intensità del campo è esattamente uguale all'intensità dell'interazione tra spin.

L'intera regione a $T = 0$ con $-2J \leq h \leq 2J$ presenta correlazioni a lungo raggio. Se $|h| < 2J$, il campo non è abbastanza forte da contrastare le interazioni; mentre per $|h| > 2J$ gli spin si allineano lungo il campo (ovvero le correlazioni si annullano).

A $T = 0$, la probabilità di avere uno spin $S = \pm 1$ ha una forma a gradino in funzione di h , con il salto in corrispondenza di $h = 0$:

$P(+1)$ è 0 per $h < -2J$, 0.5 per $-2J < h < 2J$, e 1 per $h > 2J$.

5.2 Modello di Curie-Weiss

Si considera un modello di Ising definito su un **grafo completo** (ovvero ogni nodo è connesso a tutti gli altri). L'Hamiltoniana è data da:

$$H(S) = -J \sum_{i < j} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (5.7)$$

Per garantire che l'energia sia estensiva, poniamo $J = 1/N$. In questa approssimazione, ogni spin interagisce con la media di tutti gli altri.

Possiamo approssimare il termine di interazione:

$$\sum_{i < j} s_i s_j \approx \frac{1}{2} \left(\sum_i s_i \right) \left(\sum_j s_j \right) = \frac{1}{2} \left(\sum_i s_i \right)^2$$

Definendo la magnetizzazione totale $M = \sum_i s_i$ e la magnetizzazione per spin $m = M/N$, l'Hamiltoniana (in questa approssimazione di campo medio) diventa:

$$H(S) \approx -\frac{1}{2N} \left(\sum_i s_i \right)^2 - h \sum_i s_i = -\frac{1}{2N} M^2 - hM \quad (5.8)$$

Riscrivendo in termini di m , l'Hamiltoniana dipende solo da m :

$$H = N \left(-\frac{m^2}{2} - hm \right) \quad (5.9)$$

Definiamo l'energia per spin:

$$\mathcal{E}(m) = -\frac{1}{2} m^2 - hm \quad (5.10)$$

Funzione di Partizione

Calcoliamo la funzione di partizione $Z = \sum_S e^{-\beta H(S)}$. Effettuiamo un cambio di variabile, passando dalla somma su tutte le configurazioni $\{S\}$ alla somma sulla magnetizzazione totale M :

$$Z = \sum_{M=-N}^N e^{-\beta H(M)} \cdot \#(\vec{S} : \sum_i s_i = M) \quad (5.11)$$

Il termine $\#(\vec{S} : \sum_i s_i = M)$ è il numero di configurazioni con M fissato. Questo è un problema combinatorio. Il numero di spin "up" è $N_{\uparrow} = \frac{N+M}{2}$ e "down" è $N_{\downarrow} = \frac{N-M}{2}$.

$$\#(\vec{S} : \sum_i s_i = M) = \binom{N}{\frac{N+M}{2}} \quad (5.12)$$

Usando l'approssimazione di Stirling per $N \rightarrow \infty$, questo termine può essere scritto come $\exp(N \cdot s(m))$, dove $s(m)$ è l'entropia per spin:

Equazione per Spin

$$s(m) = - \left[\frac{1+m}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) + \frac{1-m}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) \right] \quad (5.13)$$

La funzione di partizione (nel continuo) diventa:

$$Z \approx \int_{-1}^1 dm \exp [N(-\beta \mathcal{E}(m) + s(m))] \quad (5.14)$$

Definiamo l'energia libera di Helmholtz per spin $f(m)$:

$$f(m) = \mathcal{E}(m) - Ts(m) \quad (5.15)$$

La funzione di partizione può essere riscritta come:

$$Z \approx \int dm e^{-N\beta f(m)} \quad (5.16)$$

Per N grande, questo integrale è dominato dal valore m^* che minimizza $f(m)$ (**metodo del punto di sella**). L'energia libera che domina la termodinamica f_{th} è data da questo minimo:

$$f_{th} = \min_m f(m) = \mathcal{E}(m^*) - Ts(m^*) \quad (5.17)$$

La funzione $f(m)$ (energia libera) contiene informazioni su tutte le configurazioni (anche quelle meno probabili), mentre $f_{th} = \min f(m)$ è l'energia libera termodinamica.

Equazione di Autoconsistenza

Per trovare il minimo m^* , deriviamo $f(m)$ rispetto a m e poniamo la derivata a zero:

$$m^* : \left. \frac{\partial f}{\partial m} \right|_{m^*} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial m} = -m - h + T \cdot \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{1-m} \right) = 0 \quad (5.18)$$

Usando la relazione $\operatorname{arctanh}(m) = \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{1-m} \right)$, otteniamo l'equazione di autoconsistenza (o equazione del punto di sella):

Equazione di Autoconsistenza

$$m^* = \tanh [\beta(m^* + h)] \quad (5.19)$$

Analisi delle Soluzioni e Transizione di Fase

Per $h = 0$: L'equazione diventa $m = \tanh(\beta m)$. Questa equazione può avere una o tre soluzioni.

- Se $T > T_c$ (alta temperatura): L'unica soluzione è $m = 0$. L'energia libera $f(m)$ ha un solo minimo in $m = 0$.
- Se $T < T_c$ (bassa temperatura): Ci sono tre soluzioni: $m = 0$ (massimo locale, instabile) e due soluzioni simmetriche $\pm m^* \neq 0$. Queste sono i minimi di $f(m)$ e rappresentano uno stato con magnetizzazione spontanea.

Questo fenomeno, per cui il sistema sceglie una delle due soluzioni $\pm m^*$ per $T < T_c$, è la **rottura spontanea della simmetria**.

Nel punto di transizione del secondo ordine (per $h = 0, T = T_c$), si osservano una serie di fenomeni concomitanti (metastabilità, transizione di fase, divergenza della suscettività, ecc.).

github.com / elisabettagagnello

github . com / elisabettagnello

Lezione 6

Data: 16/10/2025

6.1 Modello di Curie-Weiss

L'Hamiltoniana del modello di Curie-Weiss è data da:

$$H = -\frac{1}{N} \sum_{i < j} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (6.1)$$

L'energia libera (di Landau), in funzione del parametro d'ordine m è:

$$f(m) = -\frac{m^2}{2} - hm - Ts(m) \quad (6.2)$$

dove $s(m)$ è il termine entropico:

$$s(m) = -\frac{1+m}{2} \log\left(\frac{1+m}{2}\right) - \frac{1-m}{2} \log\left(\frac{1-m}{2}\right) \quad (6.3)$$

Abbiamo tracciato un diagramma di fase nel piano (h, T) . In questo piano è identificata una linea, chiamata **linea spinodale**, tale che:

- All'interno della regione delimitata dalla linea spinodale, l'energia libera $f(m)$ presenta tre punti stazionari: due minimi e un massimo.
- All'esterno di tale regione, $f(m)$ ha un solo minimo.

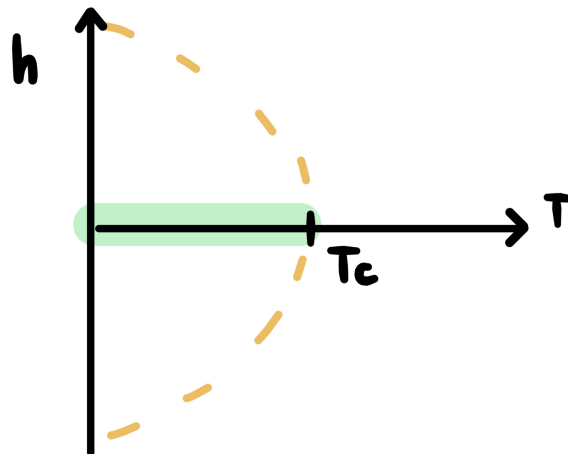


Figura 6.1: La linea verde sull'asse $h = 0$ per $T < T_c$ indica la transizione del primo ordine. La linea tratteggiata rappresenta la linea spinodale.

Energia Libera Termodinamica

Definiamo l'**energia libera termodinamica** f_{th} come il minimo assoluto della funzione $f(m)$ rispetto a m nell'intervallo $[-1, 1]$:

$$f_{th}(T, h) = \min_{m \in [-1, 1]} f(m; T, h) \quad (6.4)$$

Questa f_{th} è la funzione che descrive la termodinamica del sistema. Finché N è finito, tutto è regolare. Tuttavia, nel limite $N \rightarrow \infty$, possono svilupparsi delle singolarità.

La funzione $f(m)$ di per sé è analitica. La singolarità non nasce da $f(m)$, ma dall'operazione di min. Essendoci potenzialmente più soluzioni (più minimi), quando il minimo assoluto "passa" da una soluzione (un ramo) all'altra, si possono verificare cambiamenti drastici che introducono singolarità (la continuazione analitica da un ramo all'altro non è possibile).

Definiamo m_{th} (o m^*) come il valore che minimizza $f(m)$:

$$m_{th} = \operatorname{argmin}_{m \in [-1, 1]} f(m) \quad (6.5)$$

Questo m_{th} è la soluzione dell'equazione di punto sella:

$$m^* = \tanh(\beta(m^* + h)) \quad (6.6)$$

6.1.1 Transizione del Primo Ordine

Lungo tutta la regione $h = 0$ con $T < T_c$ (la linea verde nella Figura 6.1), la funzione f_{th} ha una singolarità nella sua **derivata prima**. Questa è definita come una **transizione di fase del primo ordine**.

La derivata prima dell'energia libera non è definita in quei punti. In particolare, il limite venendo da $h > 0$ e il limite venendo da $h < 0$ assumono valori diversi.

Ricordiamo che la magnetizzazione termodinamica è legata alla derivata dell'energia libera:

$$m_{th} = -\frac{\partial f_{th}}{\partial h} \quad (6.7)$$

Se tracciamo m_{th} in funzione di T e h (Figura 6.2), vediamo una superficie che presenta un "taglio" o "salto" lungo l'asse $h = 0$ per $T < T_c$.

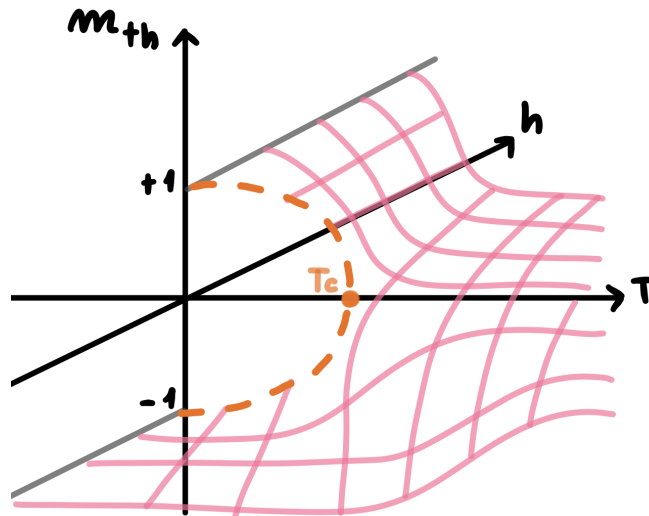


Figura 6.2: Rappresentazione della superficie della magnetizzazione termodinamica $m_{th}(T, h)$, evidenziando la discontinuità (salto) lungo l'asse $h = 0$ per $T < T_c$.

Muovendosi a T fissa, quando si attraversa $h = 0$, la magnetizzazione m_{th} fa un salto discontinuo (es. da un valore positivo a uno negativo).

Se m_{th} ha un salto, significa che la derivata prima $\partial f_{th}/\partial h$ ha un salto. Questo implica che la derivata prima non è ben definita, poiché i limiti destro e sinistro non coincidono:

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\partial f_{th}}{\partial h} \neq \lim_{h \rightarrow 0^-} \frac{\partial f_{th}}{\partial h} \quad (\text{per } T < T_c) \quad (6.8)$$

6.1.2 Transizione del Secondo Ordine

Il punto finale di questo luogo di singolarità del primo ordine, cioè il punto $(h = 0, T = T_c)$, è una singolarità del **secondo ordine**. Questa è chiamata **transizione di fase del secondo ordine** (o transizione critica).

Il fatto che alla fine di una linea di singolarità della derivata prima ci sia un punto con singolarità della derivata seconda è una necessità analitica. Lo si può capire visualizzando il grafico di m_{th} (Figura 6.2): man mano che ci si sposta lungo la linea $h = 0$ verso T_c , il "salto" (la discontinuità) nella magnetizzazione si stringe. Al punto critico T_c , il salto si chiude e m_{th} diventa continua. Tuttavia, nel momento esatto in cui il salto si chiude, la derivata $\partial m_{th}/\partial h$ (che è la derivata seconda di f_{th}) diventa infinita.

$$\frac{\partial^2 f_{th}}{\partial h^2} = \frac{\partial m_{th}}{\partial h} = \infty \quad (\text{per } h = 0, T = T_c) \quad (6.9)$$

Prima di diventare regolare (analitica) per $T > T_c$, la funzione passa per questo punto critico in cui la derivata seconda diverge.

6.2 Stati Stabili, Metastabili e Instabili

Analizziamo il sistema a $T < T_c$ fissata e muoviamoci in $h \neq 0$. Vogliamo plottare tutte le soluzioni m^* dell'equazione di punto sella. Risolvere $m^*(h)$ è difficile, ma possiamo plottare $h(m^*)$ parametricamente:

$$h = T \operatorname{arctanh}(m^*) - m^* \quad (6.10)$$

Plottando h in funzione di m^* (scambiando gli assi), si ottiene la caratteristica curva a "S" (Figura 6.3).

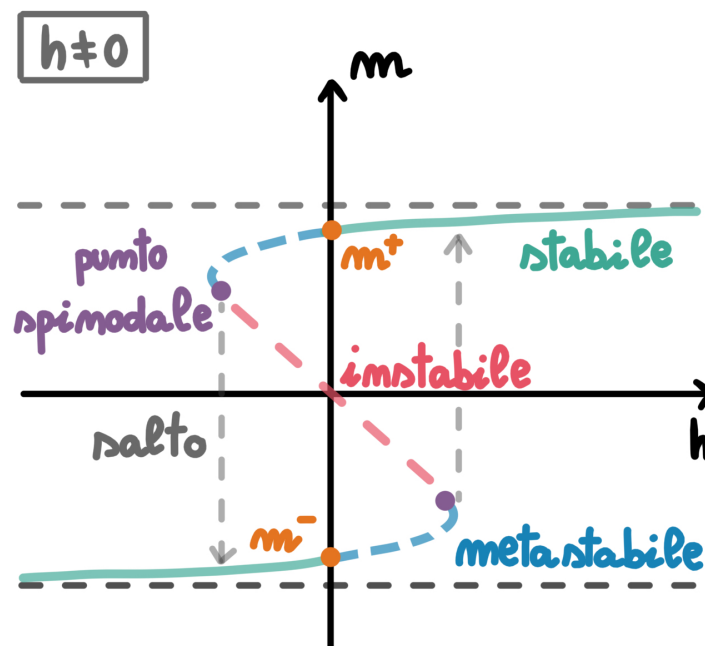


Figura 6.3: Soluzioni dell'equazione di punto sella in funzione del campo (per $T < T_c$).

Dobbiamo dare un significato a questi rami di soluzioni:

1. **Stato Stabile:** È la soluzione m^* che corrisponde al minimo globale di $f(m)$. Questa è la soluzione termodinamica m_{th} . Per $h > 0$, è il ramo con $m > 0$; per $h < 0$, è il ramo con $m < 0$.
2. **Stato Metastabile:** È la soluzione m^* che corrisponde a un minimo locale di $f(m)$, ma non globale.
3. **Stato Instabile:** È la soluzione m^* che corrisponde a un massimo locale di $f(m)$.

Per visualizzarlo, tracciamo $f(m)$ vs m (Figura 6.4). Per $T < T_c$ e h leggermente positivo, $f(m)$ avrà:

- Un **minimo globale (stabile)** a $m > 0$.
- Un **minimo locale (metastabile)** a $m < 0$.
- Un **massimo locale (instabile)** tra i due.

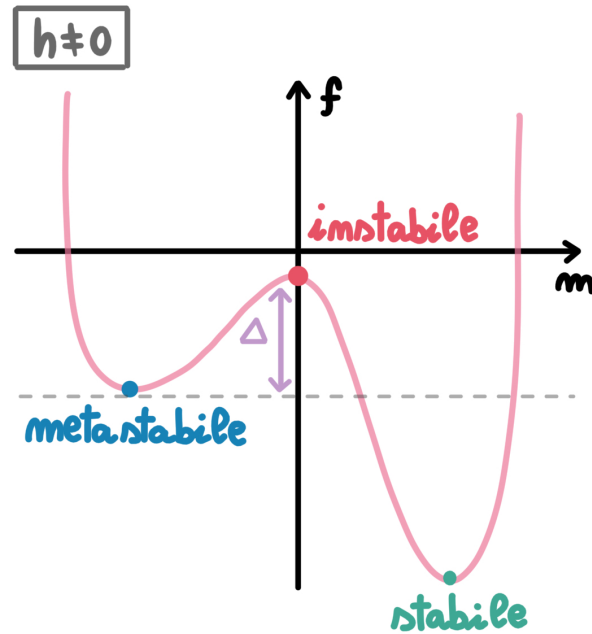


Figura 6.4: Andamento dell'energia libera $f(m)$ per $T < T_c$ e $h > 0$.

Per **stato osservabile** intendiamo uno stato con tempi di vita grandi, che sopravvive su scale temporali umane:

- Se $\frac{\partial f}{\partial m} \neq 0$, il sistema cambia stato su tempi microscopici e non è osservabile.
- Uno stato osservabile deve avere $\frac{\partial f}{\partial m} = 0$.

Questo giustifica la focalizzazione sui punti stazionari, che possono essere di natura diversa (stabili, instabili, metastabili). Un punto **metastabile** è un minimo locale: il sistema, pur non trovandosi nello stato termodinamicamente dominante, risulta stabile rispetto a piccole perturbazioni e può permanere a lungo “intrappolato” in quella configurazione.

Per passare dallo stato metastabile a quello stabile, il sistema deve superare la barriera di energia rappresentata dallo stato instabile (Figura 6.4). Se Δ è la differenza di energia libera tra lo stato instabile e lo stato metastabile, la probabilità di trovarsi sulla cima della barriera è:

$$\frac{P(\text{instabile})}{P(\text{metastabile})} \approx e^{-\beta N \Delta} \quad (6.11)$$

Nei modelli a campo medio, il tempo per superare la barriera scala esponenzialmente con N , diventando infinito nel limite termodinamico. Questo è fondamentale per capire sistemi come i vetri (che sono sistemi metastabili che evolvono su tempi lunghissimi).

Le transizioni del primo ordine (acqua-ghiaccio) sono più comuni e mostrano coesistenza di stati (stabile e metastabile), i due minimi hanno esattamente la stessa energia libera.

6.3 Ciclo di Isteresi e Punti Spinodali

Il concetto di metastabilità è alla base del fenomeno dell'**isteresi**. Consideriamo la caratteristica curva a "S" (Figura 6.3):

1. Partiamo da h molto grande (positivo): il sistema è nello stato stabile $m > 0$.
2. Abbassiamo il campo h : la magnetizzazione segue il ramo stabile.
3. Attraversiamo $h = 0$ e andiamo a h leggermente negativo: il sistema non salta immediatamente allo stato termodinamico (che ora sarebbe $m < 0$), ma rimane "agganciato" al ramo $m > 0$, che ora è diventato **metastabile**.
4. Il sistema segue il ramo metastabile fino a che quel ramo esiste.

Uno sperimentatore osserva quindi una **magnetizzazione residua** non nulla a campo quasi nullo. Il punto in cui il ramo metastabile cessa di esistere è chiamato **punto spinodale**.

5. Raggiunto il punto spinodale, la soluzione metastabile scompare, e il sistema deve "saltare" bruscamente all'unico stato stabile rimasto (quello $m < 0$).
6. Se ora invertiamo il processo (da h negativo a h positivo), il sistema tratterà un percorso simmetrico, saltando dall'altro punto spinodale.

Questo percorso chiuso è il **ciclo di isteresi**.

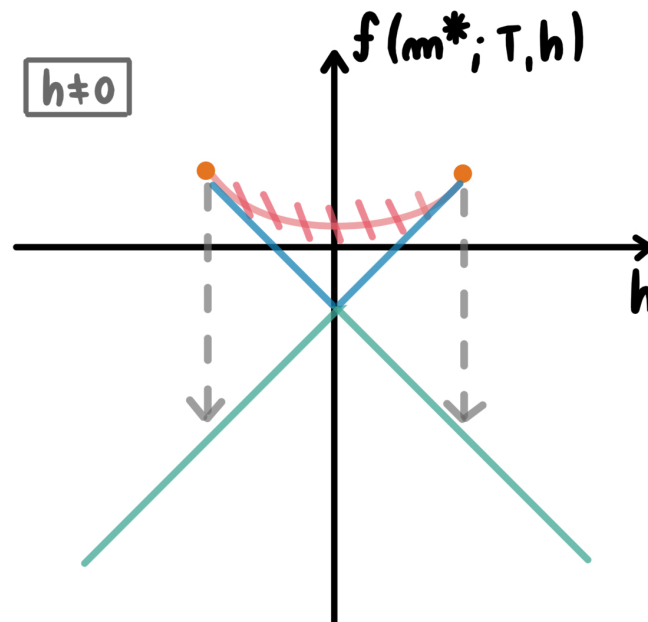


Figura 6.5: Energia libera $f(m^*; T, h)$ delle soluzioni stazionarie in funzione di h . I rami più bassi rappresentano lo stato stabile. I rami superiori sono gli stati metastabili e instabili.

6.3.1 Criticità nei Punti Spinodali

Un sistema è **critico** quando è estremamente suscettibile: una piccola perturbazione (cambiamento di h) causa una risposta macroscopica (cambiamento di m).

- Al punto di transizione termodinamica ($h = 0, T < T_c$), il sistema non è critico. Se perturbo h di poco, m cambia di poco (rimane sullo stesso ramo).
- Ai **punti spinodali**, il sistema è critico. Arrivando al punto spinodale, un cambiamento infinitesimo di h causa un salto macroscopico di m .

Criticità nelle transizioni del primo ordine

Nelle transizioni del primo ordine, il punto di transizione termodinamica e il punto critico (spinodale) sono separati.

6.3.2 Caratterizzazione Analitica dei Punti Spinodali

Il punto spinodale è un punto in cui la funzione $f(m)$ sviluppa un **flesso a tangente orizzontale**. Le condizioni analitiche per il punto spinodale sono:

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0 \quad (\text{è uno "stato", un punto stazionario}) \quad (6.12)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} = 0 \quad (\text{è "critico", la curvatura è nulla}) \quad (6.13)$$

La derivata seconda è proporzionale all'inverso della suscettività locale; quando $\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} \rightarrow 0$ la suscettività diverge: il sistema è estremamente piatto e suscettibile alle fluttuazioni.

6.4 Punti Critici in una Transizione del Secondo Ordine

Torniamo ora al punto di transizione del secondo ordine ($h = 0, T = T_c$). Questo punto è speciale perché la linea spinodale (luogo dei punti critici) interseca l'asse della transizione termodinamica ($h = 0$).

Criticità nelle transizioni del secondo ordine

In una transizione del secondo ordine i concetti di criticità, transizione termodinamica e rottura spontanea della simmetria coincidono.

Per parlare di rottura spontanea della simmetria, dobbiamo essere a $h = 0$, altrimenti la simmetria Z_2 ($S_i \rightarrow -S_i$) è rotta "a mano" dal campo esterno.

A $h = 0$, $f(m)$ è una funzione pari. Analizziamo $f(m)$ vs m (Figura 6.6):

- $T > T_c$: $f(m)$ ha un singolo minimo in $m = 0$ (stato paramagnetico simmetrico). La derivata seconda $\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} > 0$.
- $T = T_c$: Il minimo in $m = 0$ si appiattisce. Questo è il punto critico con $\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} = 0$.

- $T < T_c$: Lo stato simmetrico $m = 0$ diventa un massimo locale ($\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} < 0$), cioè diventa instabile. Il sistema deve "scegliere" spontaneamente uno dei due nuovi minimi globali simmetrici ($+m^*$ o $-m^*$). Questa è la rottura spontanea della simmetria.

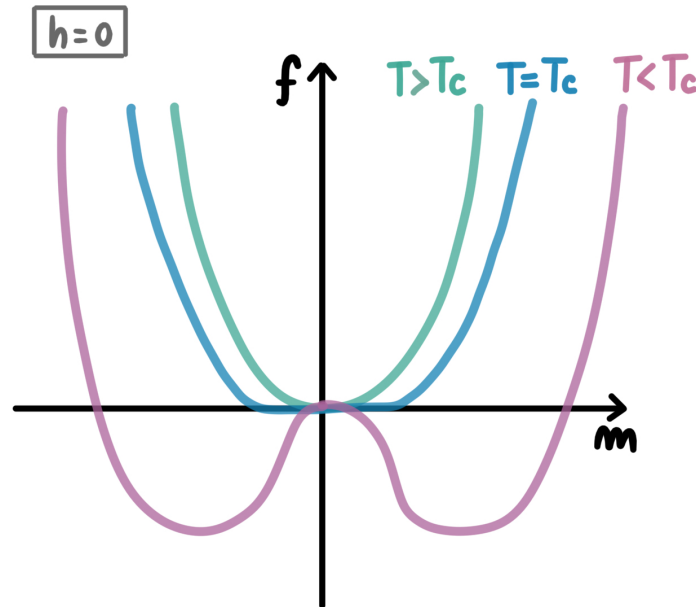


Figura 6.6: Energia libera $f(m)$ a $h = 0$ al variare della temperatura, illustrando la rottura spontanea della simmetria.

6.5 Criticità nel Modello XY

Si tende a pensare che, una volta rotta la simmetria ($T < T_c$), il sistema non sia più critico (infatti nei minimi $m \neq 0$ del modello di Ising, $\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} > 0$). Questa è una semplificazione dovuta alla simmetria Z_2 . Consideriamo un modello con simmetria più ricca, come il **Modello XY**, dove $m \in \mathbb{R}^2$.

- $T > T_c$: L'energia libera è un paraboloide con minimo in $m = (0, 0)$.
- $T < T_c$: Avviene la rottura spontanea della simmetria. L'energia libera assume la forma a **"cappello messicano"** (Sombrero).

Il sistema rompe la simmetria scegliendo un punto sul fondo del cappello ($|m| = m^* > 0$). Tuttavia, il sistema rimane critico rispetto alle perturbazioni lungo il fondo del cappello. Muoversi lungo quella direzione (cambiare l'angolo θ di m) non costa energia. Esistono dei **modi di Goldstone** che mantengono il sistema critico anche nella fase a simmetria rotta.

Questo è fondamentale nei sistemi disordinati (spin glass), che possono avere una transizione di fase e rimanere critici (suscettibili) anche nella fase "fredda" (vetrosa).

6.6 Modello 3-Spin - da rivedere

Consideriamo interazioni non a 2 corpi, ma a 3 corpi (modello P-spin, con $P = 3$).

L'Hamiltoniana (fully-connected) è:

$$H = -\frac{1}{N^2} \sum_{i < j < k} S_i S_j S_k \quad (6.14)$$

La normalizzazione $1/N^2$ è necessaria perché la somma ha $\mathcal{O}(N^3)$ termini.

Questa Hamiltoniana **non** ha la simmetria Z_2 . Se $S_i \rightarrow -S_i$, allora $H \rightarrow -H$. Non ci può essere rottura spontanea di simmetria.

Approssimando h :

$$H \approx -\frac{N}{6} \left(\frac{1}{N} \sum S_i \right)^3 = -\frac{Nm^3}{6} \quad (6.15)$$

L'energia libera diventa:

$$f(m) = -\frac{m^3}{6} - Ts(m) \quad (6.16)$$

L'equazione di punto sella è:

$$-\frac{m^2}{2} + T \operatorname{arctanh}(m) = 0 \quad (6.17)$$

- $m = 0$ è sempre una soluzione.
- Esiste una temperatura spinodale T_s sotto la quale compaiono due nuove soluzioni $m \neq 0$.
- Esiste una temperatura T_1 (con $T_1 < T_s$) dove l'energia libera della soluzione $m = 0$ e quella della soluzione $m \neq 0$ si incrociano.

Abbassando la temperatura, a T_1 , il sistema **salta** discontinuamente da $m = 0$ a $m \neq 0$. Questa è una transizione del primo ordine **in temperatura**.

Di nuovo, il punto di transizione termodinamica (T_1) non è critico. L'unico punto critico è il **punto spinodale** (T_s), dove nasce la soluzione $m \neq 0$. Questo dimostra che interazioni a più corpi producono spontaneamente metastabilità e transizioni del primo ordine.

In natura, le forze fondamentali sono a 2 corpi (gravitazionale, elettromagnetica). Tuttavia, nei sistemi complessi (vetri, polimeri, sistemi biologici), si usano **teorie effettive**. Integrando via via gradi di libertà (es. con il gruppo di rinormalizzazione), le interazioni a 2 corpi generano interazioni efficaci a 3, 4, o più corpi.

6.7 Modello di Potts

Un altro modo per generare transizioni del primo ordine è mantenere l'interazione a 2 corpi, ma aumentare il numero di stati microscopici (da $q = 2$ di Ising a $q > 2$). Definiamo il **Modello di Potts**: $x_i \in \{1, 2, \dots, q\}$. L'Hamiltoniana è:

$$H = -\frac{1}{N} \sum_{i < j} \delta_{x_i, x_j} \quad (6.18)$$

- Per $q = 2$, si recupera il modello di Ising (transizione del secondo ordine).
- Per $q > 2$, il modello presenta una **transizione del primo ordine** in temperatura.

Questo modello presenta **due** punti spinodali in temperatura: un punto spinodale per lo stato ferromagnetico ed uno per lo stato paramagnetico (lo stato $m = 0$ stesso diventa instabile sotto una certa T).

Lezione 7

Data: 17/10/2025

7.1 Ergodicità e Dinamica dei Sistemi

Nello studio della meccanica statistica dei sistemi complessi, il punto di partenza per comprendere la dinamica è il concetto di **ergodicità**. Un sistema si definisce ergodico se, durante la sua evoluzione temporale, è in grado di visitare tutti i microstati accessibili nello spazio delle fasi con una frequenza proporzionale alla loro probabilità termodinamica (distribuzione di Boltzmann). In termini pratici, questo implica l'equivalenza tra media temporale e media d'insieme (statistica).

Tuttavia, quando studiamo sistemi reali o simulazioni, dobbiamo confrontarci con due scale temporali fondamentali:

1. **Tempo di osservazione (t_{obs}):** Il tempo fisico o computazionale che abbiamo a disposizione per misurare le proprietà del sistema.
2. **Tempo ergodico (t_{erg}):** Il tempo caratteristico necessario al sistema per esplorare l'intero spazio delle fasi, superando eventuali barriere di potenziale.

Un sistema si definisce ergodico, quindi, quando il tempo ergodico è comparabile con il tempo di osservazione.

Se $t_{obs} \ll t_{erg}$, il sistema si trova in una condizione di **rottura dell'ergodicità** (o ergodicità rotta). Il sistema rimane confinato ("intrappolato") in una sottoregione dello spazio delle fasi (uno stato metastabile) e le medie misurate non corrisponderanno a quelle termodinamiche di equilibrio. Questo fenomeno è noto come *critical slowing down* quando ci si avvicina a una transizione di fase.

7.1.1 Barriere Energetiche ed Entropiche

Il meccanismo che impedisce al sistema di esplorare lo spazio delle fasi è la presenza di barriere nell'energia libera. Possiamo classificarle in due tipi:

- **Barriere Energetiche:** Sono ostacoli dovuti a un aumento dell'energia interna U (come in un sistema a doppia buca). Per superarle, il sistema deve attendere una fluttuazione termica sufficiente. Il tempo di scavalco segue tipicamente la legge di Arrhenius:

$$\tau \sim \tau_0 e^{\left(\frac{\Delta U}{k_B T}\right)} \quad (7.1)$$

Se siamo a basse temperature o se la barriera è molto alta, il tempo di esplorazione diventa enorme. In tal caso, il sistema rimane intrappolato in una regione dello spazio delle fasi e l'ergodicità è rotta (o richiede tempi infiniti).

- **Barriere Entropiche:** Queste barriere non sono dovute a "muri" di energia, ma alla vastità dello spazio delle fasi. Immaginate un paesaggio energetico piatto (un "flat landscape"), simile a un campo da golf o al deserto del Sahara.

In una barriera entropica, il sistema non "vede" il gradiente di energia che lo guiderebbe verso il minimo. Deve muoversi per pura diffusione in uno spazio ad alta dimensionalità. Sebbene non ci siano muri energetici da scalare, la probabilità di imboccare casualmente la "strada stretta" che porta al minimo è esponenzialmente piccola. In questi casi, è l'entropia (il numero di stati) a intrappolare il sistema, non l'energia.

7.1.2 Modello a 3-Spin

Un esempio illuminante per comprendere la differenza tra barriere energetiche ed entropiche è il modello di spin con interazione a 3 corpi (p-spin con $p = 3$). L'Hamiltoniana (in approssimazione di campo medio) dipende dalla magnetizzazione m come:

$$H(m) \approx -N \frac{m^3}{6} \quad (7.2)$$

Confrontiamo la dinamica di rilassamento verso il minimo (ferromagnetico, $m = 1$) partendo da uno stato disordinato ($m \approx 0$):

- **Modello a 2-spin (Curie-Weiss):** L'energia è $e(m) \sim -m^2$. La forza termodinamica è $F = -\frac{\partial e}{\partial m} \sim m$. Vicino a zero, c'è una pendenza lineare che "spinge" il sistema verso l'ordine.
- **Modello a 3-spin:** L'energia è $e(m) \sim -m^3$. La forza è $F = -\frac{\partial e}{\partial m} \sim m^2$.

Nel caso a 3-spin, vicino a $m = 0$, la forza è nulla al primo ordine (la funzione è estremamente piatta). Il sistema, trovandosi in $m = 0$, non percepisce alcuna spinta verso $m = 1$. Anche se lo stato ordinato esiste ed è energeticamente favorevole, il sistema rimane bloccato in $m = 0$ a causa della barriera entropica: non sa in che direzione muoversi perché il paesaggio è localmente piatto.

7.1.3 Modello di Potts

Il modello di Potts è una generalizzazione del modello di Ising in cui ogni spin S_i può assumere q valori discreti (chiamati spesso "colori"): $S_i \in \{1, 2, \dots, q\}$. L'Hamiltoniana è definita come:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{S_i, S_j} \quad (7.3)$$

dove δ è la delta di Kronecker (l'energia diminuisce se due spin vicini hanno lo stesso colore).

L'ordine della transizione di fase nel modello di Potts dipende dal numero di stati q :

- Per $q = 2$: Il modello è isomorfo al modello di Ising. La transizione è del **secondo ordine** (continua).
- Per $q > 2$: La transizione diventa del **primo ordine** (discontinua).

Consideriamo il caso $q = 3$ (o superiore). Analizzando l'energia libera in funzione del parametro d'ordine m (che misura quanto un colore prevale sugli altri), si osserva un fenomeno di coesistenza di fasi. Esistono due temperature critiche "locali" chiamate **punti spinodali**, oltre alla temperatura di transizione termodinamica T_c :

1. **Spinodale Paramagnetica** (T_{sp}^+): Raffreddando il sistema, a questa temperatura appare per la prima volta un minimo locale (metastabile) corrispondente alla fase ordinata (ferromagnetica), mentre il minimo globale è ancora quello disordinato ($m = 0$).
2. **Spinodale Ferromagnetica** (T_{sp}^-): Riscaldando il sistema, a questa temperatura il minimo ferromagnetico diventa instabile e scompare.

Tra queste due temperature, il sistema mostra **isteresi** e metastabilità. La transizione avviene "a salto" quando l'energia libera dei due minimi si incrocia a T_c .

7.1.4 Nucleazione in Sistemi a Taglia Finita

Nei modelli di campo medio ($N \rightarrow \infty$), le barriere di energia libera tra stati metastabili e stabili scalano con N ($\Delta F \propto N$). Questo implica che il tempo di vita dello stato metastabile diverge ($\tau \sim e^N$), rendendo la metastabilità eterna: l'ergodicità è rotta rigorosamente.

Nei sistemi reali a dimensione finita d (Finite Size Systems), la barriera è finita e il sistema può "scappare" dallo stato metastabile tramite il meccanismo della **nucleazione**. Immaginiamo di formare una "goccia" (droplet) di raggio R della fase stabile all'interno della fase metastabile. La variazione di energia libera ha due contributi:

$$\Delta F(R) \sim \sigma R^{d-1} - \Delta f \cdot R^d \quad (7.4)$$

- **Termine di Superficie** ($+\sigma R^{d-1}$): Costo energetico dovuto alla tensione superficiale σ tra le due fasi. Sfavorisce la goccia.
- **Termine di Volume** ($-\Delta f \cdot R^d$): Guadagno energetico dovuto al fatto che la fase interna alla goccia è termodinamicamente più stabile. Favorisce la goccia.

Esiste un **raggio critico** R_c .

- Se $R < R_c$, il costo superficiale domina: la goccia tende a riassorbirsi.
- Se $R > R_c$, il guadagno di volume vince: la goccia cresce spontaneamente e invade tutto il sistema.

In dimensione finita, la barriera $\Delta F(R_c)$ è finita, quindi c'è sempre una probabilità non nulla che una fluttuazione termica crei una goccia critica. La metastabilità, in senso stretto, non esiste in sistemi a range finito (il sistema alla fine decade), ma i tempi possono essere astronomici.

7.2 Sistemi Disordinati

I sistemi disordinati sono caratterizzati da un'Hamiltoniana i cui parametri non sono costanti, ma variabili casuali estratte da una certa distribuzione di probabilità. L'Hamiltoniana generica è:

$$H(\vec{S}) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad (7.5)$$

Nei sistemi disordinati l'Hamiltoniana non è unica, ma esiste un ensemble di Hamiltoniane a causa delle variabili casuali.

Il disordine può manifestarsi in:

- **Disordine nei legami (J_{ij}):** È il caso dei **Vetri di Spin** (Spin Glasses). Le interazioni possono essere sia ferromagnetiche ($J > 0$) che antiferromagnetiche ($J < 0$) distribuite casualmente.
- **Disordine nei campi (h_i):** **Random Field Ising Model** (RFIM). Ogni spin sente un campo locale che tende a orientarlo in una direzione casuale.
- **Diluizione:** Alcuni legami sono semplicemente assenti ($J_{ij} = 0$ con probabilità $1 - p$).

7.2.1 La Frustrazione

La caratteristica cruciale introdotta dal disordine (in particolare nei segni di J_{ij}) è la **frustrazione**. Un sistema è frustrato quando è impossibile soddisfare contemporaneamente tutte le richieste energetiche locali (tutti i legami).

Esempio del triangolo: Consideriamo tre spin disposti a triangolo con interazioni antiferromagnetiche ($J < 0$).

- Lo spin 1 vuole essere opposto allo spin 2.
- Lo spin 2 vuole essere opposto allo spin 3.
- Lo spin 3 vuole essere opposto allo spin 1.

Non esiste una configurazione che soddisfi tutte e tre le condizioni (Up-Down-Up lascia il legame 1-3 insoddisfatto).

Frustrazione

La frustrazione si ha quando il prodotto lungo un circuito chiuso dei coupling è negativo:

$$\prod J < 0 \quad (7.6)$$

La frustrazione genera un paesaggio energetico estremamente rugoso (**rugged landscape**) con moltissimi minimi locali quasi degeneri, rendendo la dinamica lenta e complessa.

7.2.2 Media Annealed e Quenched

Per studiare questi sistemi, dobbiamo calcolare le medie delle grandezze termodinamiche sul disordine. Distinguiamo due approcci fondamentali.

Media Annealed

Si assume che le variabili di disordine (J_{ij}) evolvano sulla stessa scala temporale degli spin S_i . Il disordine è in equilibrio termico con il sistema. In questo caso, si media la funzione di partizione Z :

$$\bar{Z} = \int dJ P(J) Z_J \quad (7.7)$$

L'energia libera annealed è:

$$F_{ann} = -k_B T \ln(\bar{Z}) \quad (7.8)$$

Questo approccio è matematicamente semplice, ma spesso fisicamente errato per i sistemi che ci interessano.

Per comprendere perché la media annealed fallisce, consideriamo un semplice modello matematico che illustra il peso delle configurazioni rare. Supponiamo che la funzione di partizione Z_J , che dipende dalla realizzazione del disordine J , possa assumere due comportamenti nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$):

1. **Comportamento Tipico:** Si realizza con probabilità $1 - p \approx 1$. In questo caso la funzione di partizione vale:

$$Z_{typ} \sim e^{Nb} \quad (7.9)$$

2. **Comportamento Raro:** Si realizza con una probabilità esponenzialmente piccola $p \sim e^{-Nc}$ (con $c > 0$). In questo caso, però, la funzione di partizione assume un valore eccezionalmente alto:

$$Z_{raro} \sim e^{Na} \quad \text{con } a > b \quad (7.10)$$

Calcoliamo ora la media annealed \bar{Z} :

$$\bar{Z} = p \cdot Z_{raro} + (1 - p) \cdot Z_{typ} \approx e^{-Nc} \cdot e^{Na} + 1 \cdot e^{Nb} \quad (7.11)$$

$$\bar{Z} \approx e^{N(a-c)} + e^{Nb} \quad (7.12)$$

Confrontiamo i due termini all'esponente. Se la configurazione rara è sufficientemente energetica tale che $a - c > b$, allora nel limite $N \rightarrow \infty$ il primo termine dominerà la somma, nonostante la sua probabilità di accadimento sia quasi nulla. Calcolando l'energia libera annealed:

$$F_{ann} \propto -\ln \bar{Z} \sim -N(a - c) \quad (7.13)$$

Tuttavia, l'energia libera del sistema fisico "vero" (quella che misureremmo in laboratorio nel 99.9% dei campioni) è quella associata al comportamento tipico:

$$F_{typ} \propto -\ln Z_{typ} \sim -Nb \quad (7.14)$$

Poiché $a - c > b$, otteniamo che $F_{ann} \neq F_{typ}$. La media annealed è dominata da eventi statisticamente irrilevanti (fluttuazioni giganti di Z) e non descrive lo stato termodinamico del sistema fisico. Questo dimostra la necessità di calcolare la media del logaritmo (Quenched) e non il logaritmo della media.

Media Quenched

Si assume che il disordine sia fissato (congelato) su scale temporali molto più lunghe di quelle della dinamica degli spin. Per ogni realizzazione fissa del disordine, il sistema raggiunge l'equilibrio. La grandezza fisica che si media non è Z , ma l'energia libera F (o il logaritmo di Z), che è una grandezza estensiva e self-averaging:

$$F_{quenched} = -k_B T \overline{\ln Z} \quad (7.15)$$

Dalla disuguaglianza di Jensen ($\overline{\ln x} \leq \ln \bar{x}$), sappiamo che:

$$F_{quenched} \geq F_{ann} \quad (7.16)$$

La media annealed sottostima sempre l'energia libera vera, perché è dominata da realizzazioni rare del disordine che hanno una Z eccezionalmente grande.

Calcolare direttamente $\overline{\ln Z}$ è analiticamente molto difficile. Si ricorre a un potente artificio matematico chiamato **Replica Trick**. Sfruttiamo l'identità matematica:

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z^n} - 1}{n} \quad (7.17)$$

L'idea è calcolare la media del momento n -esimo della funzione di partizione, $\overline{Z^n}$, assumendo inizialmente che n sia un numero intero positivo. Dopo aver calcolato questa quantità per n intero, si effettua una continuazione analitica per $n \rightarrow 0$.