

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA TRE
FACOLTÀ DI SCIENZE M.F.N.

Metodi Numerici nello Studio della Metastabilità per Dinamiche Conservative

Sintesi della tesi di Laurea in Matematica
di Marzia Arcieri

Relatore: Prof.ssa Elisabetta Scoppola

Alcuni sistemi fisici nella loro evoluzione verso l'equilibrio restano per tempi lunghi in una situazione di apparente equilibrio, esibendo in questo modo quello che in meccanica statistica si chiama 'comportamento metastabile'. In questa tesi abbiamo studiato la metastabilità per modelli di spin bidimensionali a basse temperature, ed abbiamo simulato al computer il comportamento di un gas reticolare sotto una dinamica conservativa, la dinamica di Kawasaki. In particolare abbiamo separato le scale temporali dell'evoluzione, corrispondenti alle configurazioni tipiche attraverso le quali avviene la transizione dallo stato metastabile a quello stabile. Questo problema, seppure sviluppato in maniera rigorosa nella teoria, risulta numericamente non banale, in relazione al fatto che quantità e rapporti che nel limite di basse temperature $\beta \rightarrow \infty$ (dove β è l'inverso della temperatura) appaiono trascurabili assumono invece grande rilevanza nella simulazione numerica.

Lo strumento che abbiamo utilizzato per lo studio teorico della metastabilità e l'oggetto del nostro lavoro di simulazione è il *modello di Ising*, che andiamo dunque a definire.

Dato un reticolo $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, consideriamo lo spazio delle configurazioni $S = \{-1, 1\}^{|\Lambda|}$, e ad ogni stato $\sigma \in S$ associamo l'hamiltoniana di Ising

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \Lambda} \sigma(i)\sigma(j) - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma(i) \quad (1)$$

dove la prima somma è estesa a tutte le coppie di primi vicini in Λ ; J è un parametro che assumiamo positivo che regola l'interazione a coppie di primi vicini, e $h > 0$ rappresenta il campo magnetico esterno. Ove non diversamente specificato assumiamo condizioni al bordo periodiche. Le proprietà all'equilibrio di questo sistema sono descritte dalla misura di Gibbs gran canonica

$$\mu(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z} \quad , \quad Z = \sum_{\sigma \in S} e^{-\beta H(\sigma)} \quad . \quad (2)$$

Utilizzando questo modello vogliamo descrivere la metastabilità di un gas reticolare attraverso un processo stocastico sullo spazio delle configurazioni; in particolare definiremo su S una probabilità di transizione P che definisce una catena di Markov. Per assicurarci che tale catena converga alla distribuzione stazionaria, e che questa sia la misura definita dalla (2), vogliamo che siano soddisfatte le seguenti condizioni:

(i) *Condizione di bilancio dettagliato* :

$$\mu(\sigma)P(\sigma, \sigma') = \mu(\sigma')P(\sigma', \sigma) \quad \forall \sigma, \sigma' ;$$

(ii) *Proprietà ergodica* :

$$\forall \sigma, \sigma' \exists t > 0 : P^t(\sigma, \sigma') > 0,$$

dove indichiamo con P^t la probabilità di transizione in t passi.

In questa tesi sono presentati e studiati due semplici algoritmi di *singolo spin-flip*: l'algoritmo di Glauber-Metropolis e quello di Kawasaki; la differenza fondamentale tra i due consiste nel fatto che il primo è non conservativo, nel senso che la magnetizzazione totale $m = \sum_{i \in \Lambda} \sigma(i)$ non è una quantità conservata dalla dinamica, mentre il secondo è conservativo. In particolare, in

un modello di spin sotto la dinamica di Glauber, la legge secondo cui la configurazione si evolve è la stessa su qualunque sottoinsieme di Λ : una particella può essere creata in un sito indipendentemente dall'intera configurazione, mentre nella dinamica di Kawasaki, affinché cresca la magnetizzazione in una scatola, le particelle devono arrivare dall'esterno. Questo comportamento locale della dinamica non conservativa permette di studiare il sistema nel limite $\beta \rightarrow \infty$, in un volume finito, restrizione che semplifica la formulazione di una teoria rigorosa della metastabilità in questo caso, e che non è invece applicabile nel caso conservativo.

Per superare questa difficoltà abbiamo allora affrontato lo studio di un modello semplificato, in cui consideriamo un gas sotto la dinamica di Kawasaki all'interno di un sottoinsieme finito $\Lambda_0 \subset \Lambda$ e assumiamo di poter descrivere l'interazione con il resto del volume attraverso una densità al bordo di Λ_0 . Per descrivere questo modello 'locale' utilizziamo le *variabili di occupazione* $\eta \in \{0, 1\}^{|\Lambda|}$; l'energia che associamo ad ogni configurazione è

$$H(\eta) = -U \sum_{\langle x, y \rangle \in \Lambda_0} \eta(x)\eta(y) + \Delta \sum_{x \in \Lambda_0} \eta(x) \quad . \quad (3)$$

con $\Delta \in (U, 2U)$, e imponiamo una densità al bordo uguale a $e^{-\beta\Delta}$.

Chiamiamo *bond* una coppia di primi vicini; denotiamo con Λ_0^* i bond interni al reticolo, e con $\Lambda_0^{*\text{in}}$, $\Lambda_0^{*\text{out}}$, rispettivamente i bond al bordo in entrata e in uscita; indichiamo con η^b la configurazione tale che, se $b = (i, j)$ è un bond interno, si ha

$$\eta^b(i) = \eta^b(j) \quad \eta^b(j) = \eta^b(i) \quad \eta^b(k) = \eta^b(k) \quad \forall k \neq i, j \quad ,$$

mentre se il bond è al bordo

$$\begin{aligned} \eta^b(i) &= 1 & \text{se } b \in \Lambda_0^{*\text{in}} \\ \eta^b(i) &= 0 & \text{se } b \in \Lambda_0^{*\text{out}} \quad . \end{aligned}$$

La dinamica che abbiamo simulato è allora la seguente:

$$P(\eta, \eta^b) = \begin{cases} \frac{e^{-\beta[H(\eta^b) - H(\eta)]_+}}{B} & \text{se } b \in \Lambda_0^* \\ \frac{e^{-\beta\Delta}}{B} & \text{se } b \in \Lambda_0^{*\text{in}} \\ \frac{1}{B} & \text{se } b \in \Lambda_0^{*\text{out}} \\ 1 - \sum_{\eta' \neq \eta} P(\eta, \eta') & \text{se } \eta' = \eta \end{cases} \quad (4)$$

dove B è il numero totale di bond, somma di quelli interni al reticolo e quelli sul bordo; per tutte le altre configurazioni $P(\eta, \eta') = 0$.

Chiamiamo *cammino* una sequenza di transizioni con probabilità positiva, e indichiamo con $\omega : x \rightarrow y$ un cammino che porta dal punto x al punto y . Definiamo la *sella minima* tra x ed y come

$$H(x, y) = \min_{\omega: x \rightarrow y} \max_{\omega_j \in \omega} H(\omega_j) \quad .$$

Attraverso questa quantità possiamo classificare gli stati di S definendo dei livelli di stabilità relativi alla sella minima da superare per spostarsi in configurazioni di energia minore. Uno stato, cioè, è tanto più stabile quanto maggiore è l'energia che bisogna fornire al sistema per farlo evolvere verso tali configurazioni. In questo modo determiniamo quelli che sono i cammini più probabili, e individuiamo le tre scale di tempo fondamentali corrispondenti a questa classificazione: $T_1 \equiv e^{U\beta} < T_2 \equiv e^{\Delta\beta} < T_3 \equiv e^{2U\beta}$.

Il programma, sviluppato in linguaggio C, simula il modello che abbiamo descritto mostrando attraverso un output grafico il comportamento dal gas all'interno del reticolo. In particolare abbiamo mostrato che eventi sullo spazio delle configurazioni relativi a diverse scale temporali sono effettivamente distinguibili nella simulazione; questo risultato, come abbiamo già accennato, è numericamente non ovvio. Affinché infatti $T_1 \ll T_2 \ll T_3$ bisogna aumentare β (e quindi, idealmente, mandare la temperatura a zero), senza però arrivare a valori della temperatura troppo bassi che 'congelano' la dinamica, rendendo altamente improbabile ogni tipo di transizione.

Partendo dalle configurazioni di nostro interesse, abbiamo dunque mostrato che:

- un cluster rettangolare di spin positivi che abbia una riga incompleta si modifica, nella scala $e^{U\beta}$, in maniera tale da portarsi il più vicino possibile alla forma quadrata senza l'arrivo di nuove particelle dall'esterno;
- un cluster rettangolare di spin positivi diventa quadrato prima che la sua taglia aumenti significativamente, il che avviene nella scala di tempo $e^{\Delta\beta}$;

- nella stessa scala di tempo, una goccia quadrata, prima di crescere, si sposta nel reticolo attraverso movimenti di particelle sul suo contorno (lo spostamento non è rigido);
- infine nella scala $e^{2U\beta}$, gocce di dimensioni al di sotto di una certa taglia critica (calcolata attraverso argomentazioni rigorose) scompaiono;
- gocce di taglia supercritica crescono di volume, tendendo ad ‘invadere’ tutto il reticolo.

Il lavoro è strutturato come segue: il primo capitolo richiama i concetti basilari di teoria della probabilità e di meccanica statistica che vengono largamente utilizzati in seguito, dedicando uno spazio particolare alle catene di Markov con le quali abbiamo continuamente lavorato.

Il secondo capitolo è invece dedicato al modello di Ising; dopo una presentazione del modello, viene studiato il caso unidimensionale, nel quale siamo in grado di calcolare esplicitamente quantità come la funzione di partizione grancanonica. Un paragrafo esamina poi con un certo dettaglio le transizioni di fase nel modello di Ising, e, affrontando lo studio da un punto di vista macroscopico, mostra l’esistenza di transizioni di fase per tale modello. Infine è illustrata la soluzione di Onsager per il caso bidimensionale, attraverso la quale si calcolano esplicitamente le funzioni termodinamiche di interesse (come l’energia interna, la magnetizzazione, eccetera).

Nel terzo capitolo viene affrontato lo studio della metastabilità in maniera generale; in un primo momento vengono introdotte le dinamiche di Glauber e Kawasaki sul modello di Ising, e viene caratterizzata la maniera tipica in cui tali sistemi si evolvono verso la configurazione stabile determinando il *tubo tipico di traiettorie* del processo. Nel seguito viene presentato il problema dell’uscita da un dominio per catene di Markov più generali, illustrando la teoria generale di Freidlin e Wentzell, che costituisce un punto fondamentale per lo sviluppo della teoria, ma nei casi concreti non fornisce uno strumento efficiente di calcolo; è studiato poi il caso reversibile, per il quale sappiamo dare una stima apriori dall’alto della probabilità che la transizione tra due stati qualunque avvenga prima di un certo tempo. Infine è trattato il caso non reversibile tramite il processo di rinormalizzazione, che riduce lo spazio delle configurazioni facilitando lo studio della catena.

Negli ultimi due capitoli presentiamo in dettaglio il modello semplificato e le idee utilizzate nella simulazione, e, dopo un'introduzione generale dell'utilizzo dei metodi Monte Carlo in meccanica statistica, è riportato il listato del programma e le simulazioni eseguite.

Bibliografia

- [B] P.Billingsley, *Probability and Measure*, Wiley, (1986)
- [CGOV] M. Cassandro, A.Galves, E.Olivieri, M.E.Vares, *Metastable Behaviour of Stochastic Dynamics: A Pathwise Approach*, Journal of Statistical Physics, Vol.35 (1984)
- [FW] M.I.Freidlin, A.D.Wentzell, *Random Perturbations of Dynamical Systems*, Springer-Verlag (1984)
- [G] G.Gallavotti, *Meccanica Statistica*, Quaderni del CNR, Gruppo Nazionale di Fisica Matematica n.50 (1995)
- [GS] G.R.Grimmett, D.R.Stirzaker, *Probability and Random Processes: Problems and Solutions*, Clarendon Press (1992).
- [H] K.Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley, (1987)
- [HOS] F.den Hollander, E.Olivieri, E.Scoppola, *Metastability and Nucleation for Conservative Dynamics*, (1998)
- [NSc1] E.J.Neves, R.H.Schonmann, *Behaviour of Droplets for a Class of Glauber Dynamics at Very Low Temperatures*, Communications in Mathematical Physics., 137 (1991)
- [NSc2] E.J.Neves, R.H.Schonmann, *Critical Droplets and Metastability for a Glauber Dynamics at Very Low Temperatures*, Prob.Theor.Rel.Fields, 91 (1992)
- [O] E.Olivieri, *Elementi di Meccanica Statistica Classica*, Quaderni del CNR Gruppo Nazionale di Fisica Matematica (1993)

- [OS1] E.Olivieri, E.Scoppola, *Markov Chains with Exponentially Small Transition Probabilities: First Exit Problem from a General Domain. I. The reversible Case*, Journal of Statistical Physics, Vol.79 (1995)
- [OS2] E.Olivieri, E.Scoppola, *Metastability and Typical Exit Paths in Stochastic Dynamics*
- [P] G.Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley Publishing Company
- [PL] O.Penrose, J.L.Lebowitz, *Rigorous Treatment of Metastable States in Van der Waals Theory*, Journal of Statistical Physics, Vol.3 (1971)
- [S1] E.Scoppola, *Renormalization Group for Markov Chains and Application to Metastability*, Journal of Statistical Physics, Vol.73 (1993)
- [S2] E.Scoppola, *Metastability for Markov Chains: a General Procedure Based on Renormalization Group Ideas*, In Probability and Phase Transition, Ed. G.Grimmett, NATO ASI Series, Kluwer Ac.Publ. (1994)
- [Sch] R.H.Schonmann, *The Pattern of Escape from Metastability of a Stochastic Ising Model*, Communications in Mathematical Physics., 147 (1992)
- [So] A.D.Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms*, Troisieme Cycle de la Physique, (1989)