

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PISA
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA IN FISICA
A. A. 2001/02

TESI DI LAUREA

DIAGRAMMA DI FASE
DI UN GAS QUASI
UNIDIMENSIONALE
FUORI DALL'EQUILIBRIO
TERMODINAMICO

CANDIDATO

Francesco Caravenna

RELATORE

Prof. Sergio Caracciolo

Ai miei genitori

Introduzione

“Che cosa intendiamo quando parliamo di equilibrio? Prendiamo una sbarra di metallo in equilibrio a temperatura ambiente e osserviamola molto da vicino. Non succede niente. Ora applichiamo una differenza di potenziale alle sue estremità: si genera un flusso di corrente elettrica, la sbarra emette calore e non è più in equilibrio. Se cerchiamo di descrivere la fisica della nostra sbarra metallica al livello microscopico (il livello degli atomi e delle molecole), ci rendiamo conto che la nostra comprensione di base dell’equilibrio è molto buona, mentre la comprensione degli stati di non equilibrio è decisamente ridotta. Se nel primo caso siamo in grado di fare previsioni quantitative molto precise, nel secondo caso a stento se ne sa fare alcuna. Questa situazione è alquanto spiacevole, dal momento che i fenomeni che riguardano la vita si svolgono lontano dall’equilibrio.”

Con queste parole David Ruelle apre un articolo recentemente apparso su *Nature* [1], in cui fa il punto della situazione in cui si trova lo studio dei sistemi non all’equilibrio.

In effetti i metodi che la meccanica statistica fornisce per l’analisi dei sistemi all’equilibrio termodinamico sono molto potenti: accanto a un quadro teorico semplice ed elegante, sviluppato da Maxwell, Boltzmann e Gibbs tra la fine dell’800 e gli inizi del ‘900, si sono affiancate negli ultimi cinquant’anni tecniche nuove, introdotte originariamente nello studio delle teorie di campo quantistiche (argomento apparentemente distante dagli ambiti della meccanica statistica).

Nei primi anni sessanta, Kadanoff introdusse idee nuove nell’ambito dello *scaling* per fenomeni critici, legate alla possibilità di mettere in relazione le proprietà che un sistema fisico manifesta su scale differenti. La comprensione di un collegamento tra questo argomento e la teoria quantistica dei campi si deve a Di Castro e Jona-Lasinio (1969); spetta però a Wilson il merito di aver messo pienamente a frutto le idee di Kadanoff, giungendo alla formulazione di una teoria di gruppo di rinor-

malizzazione (*renormalization group approach* o *new RG*, [3]). Questo approccio ha condotto all'elaborazione di schemi perturbativi per il calcolo di quantità di interesse nello studio dei fenomeni critici, come ad esempio gli esponenti critici, consentendo di ottenere previsioni quantitative in ottimo accordo con i risultati sperimentali, relativi a sistemi fisici sia reali sia simulati.

Motivo d'interesse per lo studio dei sistemi fuori dall'equilibrio termodinamico è l'osservazione che essi costituiscono la grande maggioranza dei fenomeni che si osservano in natura, come si accennava all'inizio. Purtroppo, attualmente non si dispone di un quadro teorico soddisfacente, in merito: in questa condizione, un approccio ragionevole consiste nel partire dall'analisi di sistemi che da un lato presentino i tratti essenziali che caratterizzano il comportamento fuori dall'equilibrio, e che dall'altro lato siano semplici quanto più è possibile, in modo da poterne ricavare la massima quantità di informazioni esatte. (È esattamente con questo spirito che, nel tentativo di rendere conto della natura delle transizioni di fase nei materiali ferromagnetici, Lenz propose il celebrato modello di Ising.) Da queste considerazioni si comprende la grande importanza che rivestono da una parte i (pochi ed estremamente semplici) modelli dei quali si riesce ad ottenere la soluzione esatta, dall'altra l'analisi, mediante simulazioni al computer, delle proprietà di sistemi meno semplici ma ancora "computazionalmente controllabili", ossia per i quali si possano ottenere in tempi ragionevoli misure di grandezze che presentino una sufficiente accuratezza statistica.

Tra i sistemi fuori dall'equilibrio, la classe più studiata, a causa della sua semplicità e importanza, è costituita da quei sistemi che, dopo eventuali transienti, raggiungono uno stato stazionario di non equilibrio, le cui caratteristiche non variano nel tempo. L'esempio più celebre è il gas reticolare forzato (DLG, *driven lattice gas*), una modificazione del modello di Ising con l'aggiunta di un campo esterno che privilegia i salti di particelle in una direzione, coincidente con un asse reticolare; la dinamica diffusiva (che conserva il numero totale di particelle) e le condizioni al bordo periodiche, elementi essenziali del modello, generano un flusso stazionario di materia attraverso il sistema. A causa delle forze interparticellari attrattive, il DLG manifesta una transizione di fase di tipo liquido-gas, che diventa di seconda specie quando la densità delle particelle è pari a $1/2$; la temperatura critica dipende dall'intensità del campo esterno. Per campi sufficientemente intensi, le configurazioni tipiche della fase liquida sono caratterizzata dalla presenza di una regione macroscopica quasi piena di particelle accanto a una regione quasi vuota, con l'interfaccia che le separa orientata parallelamente al campo (si veda la figura 1.1 (g,h)).

L'analisi di questo e di altri modelli, condotta sia attraverso simulazioni Monte Carlo sia mediante un approccio di teoria di campo, ha rivelato come la termodinamica di questi sistemi manifesti fenomeni radicalmente nuovi, estranei alla fisica dell'equilibrio. Uno dei più importanti è certamente la presenza di correlazioni a lungo raggio nello stato stazionario (decadimento algebrico della funzione di correlazione a due punti per la densità) per valori generici dei parametri del sistema, anche lontano dalla regione critica: avremo modo di analizzare in dettaglio questa proprietà, la cui origine è da ricercarsi nella mancanza di una condizione di bilancio dettagliato a livello microscopico, e discuteremo le significative conseguenze che da essa discendono.

Un'altra proprietà degna di nota, anch'essa estranea ai sistemi all'equilibrio, è la possibilità di osservare ordinamento su larga scala e transizioni di fase in sistemi unidimensionali: discuteremo approfonditamente questo punto nel corso del Capitolo 2, in cui esporremo una tecnica, il cosiddetto Ansatz matriciale, che recentemente ha permesso di ottenere la soluzione esatta per diversi modelli interessanti.

Nello spirito di quanto esposto finora, in questo lavoro di tesi abbiamo affrontato lo studio di una interessante variante quasi unidimensionale del gas reticolare forzato: intendiamo con ciò un sistema su reticolo piano rettangolare in cui il limite termodinamico è ottenuto mandando all'infinito solo la lunghezza nella direzione del campo, mantenendo fisse la lunghezza nella direzione trasversa e la densità di particelle; i parametri che governano il modello sono la temperatura e l'intensità del campo esterno. Tra le ragioni che motivano lo studio di un simile modello, è la marcata anisotropia che presenta la dinamica del DLG, che rende il comportamento del sistema bidimensionale nel limite termodinamico estremamente sensibile alla geometria del reticolo: è sembrato dunque interessante studiare il caso estremo in cui il sistema diventa quasi unidimensionale. Si consideri che questo modello non è mai stato trattato in letteratura: la nostra analisi si è basata su uno studio del comportamento del sistema mediante simulazioni al computer.

Il risultato principale della nostra analisi è di poter affermare che nel nostro sistema si osserva una transizione di fase analoga a quella del DLG: nella fase ordinata, le particelle si organizzano in una lunga striscia compatta che attraversa tutto il sistema, nella direzione del campo (si veda la figura (3.1) (a)). Abbiamo quindi proceduto a uno studio sistematico del diagramma di fase, nel corso del quale sono emerse alcune questioni interessanti, legate alla presenza di fenomeni di

metastabilità, che non siamo riusciti a chiarire completamente. Siamo infine passati a un'analisi dei meccanismi microscopici di instabilità che il nostro modello manifesta, che ci ha permesso una comprensione più profonda del comportamento su larga scala del sistema.

L'esposizione è strutturata come segue:

- nel primo capitolo, dopo alcuni richiami sulla teoria dei processi stocastici markoviani, si introduce il gas reticolare forzato e se ne analizzano le proprietà, evidenziando le differenze rispetto ai sistemi all'equilibrio;
- nel secondo capitolo, si passa all'analisi di diverse varianti del processo di esclusione unidimensionale, che permettono una soluzione esatta e forniscono informazioni preziose per la comprensione delle caratteristiche degli stati stazionari di non equilibrio;
- nel terzo capitolo, infine, si espongono in dettaglio i risultati della nostra analisi sul modello quasi unidimensionale di DLG.

Indice

1	Sistemi di particelle su reticolo	1
1.1	Processi stocastici markoviani	2
1.1.1	Definizione	2
1.1.2	Proprietà	4
1.1.3	Costruzione	6
1.1.4	La Master Equation	8
1.1.5	Reversibilità stocastica e bilancio dettagliato	10
1.2	Il gas reticolare forzato	13
1.2.1	Sistemi all'equilibrio termodinamico	14
1.2.2	Fuori dall'equilibrio: il modello KLS	16
1.2.3	Motivazioni fisiche	19
1.2.4	Proprietà del modello: simmetrie, transizione di fase	20
1.3	Correlazioni e fluttuazioni	23
1.3.1	Fluttuazioni all'equilibrio	24
1.3.2	Fluttuazioni fuori dall'equilibrio	30
1.3.3	Correlazioni a lungo raggio per il modello KLS	34
2	Il processo di esclusione unidimensionale	41
2.1	L'ansatz matriciale	43
2.1.1	Il caso totalmente asimmetrico	44
2.1.2	Il diagramma di fase del TASEP	47
2.2	Sviluppi e applicazioni	53
2.2.1	Il caso parzialmente asimmetrico	54
2.2.2	Altri modelli risolti	56
2.2.3	Il teorema di Krebs e Sandow	58
2.3	Grandi deviazioni	61

2.3.1	Deviazioni per sistemi all'equilibrio	62
2.3.2	Il processo di esclusione simmetrico	66
2.3.3	Il LDF nel caso parzialmente asimmetrico	70
3	Studio Monte Carlo del modello Q1DLG₂	77
3.1	Il modello Q1DLG ₂	79
3.2	Analisi del modello	85
3.2.1	Considerazioni sul modello	87
3.2.2	Risultati dell'analisi	89
3.2.3	La fase ordinata	91
3.2.4	La parte inferiore del diagramma di fase	94
3.2.5	Meccanismi microscopici di instabilità	99
3.3	Conclusioni e prospettive	102
A	Questioni tecniche	105
A.1	Costruzione del processo di Markov	105
A.2	Rappresentazioni dell'algebra del TASEP	106
A.3	Formule asintotiche per il TASEP	108

Capitolo 1

Sistemi di particelle su reticolo

L'analisi delle proprietà termodinamiche dei sistemi all'equilibrio si risolve essenzialmente nell'assegnazione della misura canonica di Gibbs $e^{-\beta\mathcal{H}}$ (oppure di quelle microcanonica o grancanonica, equivalenti ad essa nel limite termodinamico). Questa misura di probabilità sullo *spazio delle configurazioni* \mathcal{X} permette il calcolo dei valori medi e delle fluttuazioni per le osservabili del sistema, almeno in linea di principio, e comunque si presta a sviluppi perturbativi per calcoli approssimati. Un punto fondamentale da sottolineare è che questa misura è determinata dalla sola Hamiltoniana \mathcal{H} .

Se ci spostiamo fuori dall'equilibrio, la situazione si presenta da subito differente: le proprietà del sistema in generale dipenderanno dal tempo, e per una descrizione statistica sarà necessario assegnare una misura di probabilità sullo *spazio delle traiettorie* del sistema, ossia sulle funzioni da $[0, +\infty)$ in \mathcal{X} . Nell'introduzione si è anticipato che il nostro interesse sarà rivolto a quella classe di sistemi che raggiungono uno stato stazionario di non equilibrio (SSN), per i quali la misura sullo spazio delle configurazioni diventa stazionaria, ossia indipendente dal tempo; sembrerebbe dunque che per i nostri scopi non sia necessario chiamare in causa lo spazio delle traiettorie e basti limitarsi a considerare \mathcal{X} , come nello studio dei sistemi all'equilibrio.

Le cose purtroppo non stanno così: la difficoltà fondamentale è che, anche in questi sistemi, la misura non è nota a priori, non è legata in modo semplice e diretto a qualche osservabile del sistema. Il sistema viene piuttosto caratterizzato mediante una dinamica stocastica microscopica, nella quale è contenuta la fisica, e la misura stazionaria è determinata da questa dinamica in modo non banale. Lo spazio delle traiettorie è l'“ambiente naturale” in cui definire questa dinamica microscopica.

Nella prima sezione richiameremo le nozioni di base sui processi markoviani (per una trattazione più approfondita, si veda il libro di Liggett [4]), nel cui contesto si inquadrano i modelli di interesse per la meccanica statistica; ciò ci permetterà tra l'altro di identificare la caratteristica principale dei sistemi fuori dall'equilibrio nell'assenza del *bilancio dettagliato*. Passeremo successivamente alla descrizione del gas reticolare forzato, oggetto centrale di questo lavoro; nello studio delle sue proprietà, si metteranno in evidenza le caratteristiche peculiari dei sistemi fuori dall'equilibrio.

1.1 Processi stocastici markoviani

Consideriamo un generico sistema fisico. Sia \mathcal{X} l'insieme delle configurazioni che il sistema può assumere (*spazio degli stati*): supporremo nel seguito che \mathcal{X} sia uno spazio metrico compatto (spesso per noi sarà un insieme finito), munito della σ -algebra boreliana.

Se adottiamo un approccio deterministico, descriveremo l'evoluzione del sistema con una funzione $\zeta : [0, +\infty) \mapsto \mathcal{X}$, dove ζ_t rappresenta la configurazione all'istante t . Se però la nostra attenzione è rivolta a proprietà globali del sistema, saremo interessati a fornire una descrizione statistica: un processo stocastico è in questi casi l'oggetto matematico adatto a descrivere l'evoluzione temporale.

1.1.1 Definizione

Sia $\mathcal{T} \equiv T([0, +\infty), \mathcal{X})$ l'insieme delle funzioni da $[0, +\infty)$ in \mathcal{X} continue a destra e che ammettono limite sinistro: è lo spazio delle traiettorie del sistema; chiameremo anche "storie" i suoi elementi. Sono definite le proiezioni canoniche $\pi_t : \mathcal{T} \mapsto \mathcal{X}$, che a ogni traiettoria ζ associano ζ_t , lo stato all'istante t . Indichiamo con \mathfrak{F}_t la σ -algebra degli eventi conoscibili entro l'istante t (la più piccola che renda misurabili le π_s con $0 \leq s \leq t$), e con \mathfrak{F} la più piccola σ -algebra che contenga tutte le \mathfrak{F}_t .

Un *processo stocastico* su \mathcal{X} è una famiglia $\{\eta_t, t \in [0, +\infty)\}$ di variabili aleatorie a valori in \mathcal{X} : la variabile η_t rappresenta la configurazione del sistema al tempo t . La misura immagine che questa famiglia di variabili aleatorie induce su $(\mathcal{T}, \mathfrak{F})$, detta anche legge del processo, costituisce l'insieme delle informazioni statistiche che il processo fornisce sull'evoluzione del sistema: in questo senso la legge *caratterizza* il processo stocastico. Per questa ragione, per noi processo stocastico sarà sinonimo di misura di probabilità su $(\mathcal{T}, \mathfrak{F})$.

Definizione 1 : Un Processo di Markov (omogeneo) è una famiglia $\{P^c, c \in \mathcal{X}\}$ di misure di probabilità su $T([0, +\infty), \mathcal{X}) \equiv \mathcal{T}$ indicizzate dagli elementi di \mathcal{X} , tali che:

(i) $P^c[\zeta \in \mathcal{T} \text{ t.c. } \zeta_0 = c] = 1$ per ogni $c \in \mathcal{X}$;

(ii) L'applicazione $c \mapsto P^c[A]$ da \mathcal{X} in $[0, 1]$ è misurabile, per ogni $A \in \mathfrak{F}$;

(iii) $P^c[\zeta_{s+} \in A | \mathfrak{F}_s] = P^{\zeta_s}[A]$, per ogni $c \in \mathcal{X}$ e per ogni $A \in \mathfrak{F}$.

Qualche commento alla definizione: a scanso di equivoci, un processo di Markov è in realtà una famiglia di processi stocastici, indicizzati dalla configurazione al tempo 0. Fissata una configurazione c , è determinato il processo stocastico P^c avente questa come condizione iniziale: la proprietà (i) richiede ragionevolmente che esso assegni probabilità 1 alle traiettorie che partono da c .

La (ii) è una proprietà tecnica di regolarità¹, necessaria per esempio per dare senso alla (iii), che costituisce il cuore della definizione ed è detta anche *Proprietà di Markov*. Nel caso in cui lo spazio delle configurazioni sia numerabile, la condizione (iii) si può riformulare in maniera più cristallina nel modo seguente: assegnati gli istanti

$$\{s_i, t_j \in \mathbb{R}^+ : i = 1, \dots, n \quad j = 1, \dots, m\}$$

con $0 < s_1 < \dots < s_n < T, \quad 0 < t_1 < \dots < t_m$

e le configurazioni $p_i, f_j, c \in \mathcal{X}$, deve valere che

$$\begin{aligned} \text{Prob}[\zeta_{T+t_1} = f_1, \dots, \zeta_{T+t_m} = f_m | \zeta_{s_1} = p_1, \dots, \zeta_{s_n} = p_n, \zeta_T = c] = \\ \text{Prob}[\zeta_{t_1} = f_1, \dots, \zeta_{t_m} = f_m | \zeta_0 = c], \end{aligned} \quad (1.1)$$

dove con $\text{Prob}[\alpha | \beta]$ indichiamo la probabilità dell'evento α condizionata al verificarsi dell'evento β .

Il contenuto di questa formula è di fondamentale importanza: se conosco lo stato del sistema al tempo T , un'ulteriore conoscenza dello stato negli istanti precedenti a T non aggiunge informazioni sulla storia del sistema negli istanti successivi. Un'informazione sul passato che si aggiunga alla conoscenza dello stato presente non modifica le previsioni sul futuro, ossia il sistema è senza memoria: è a causa di questa proprietà che i processi di Markov costituiscono un'utile modellizzazione per i più svariati fenomeni, dalla fisica all'economia.

¹Richiedere la (ii) equivale a richiedere che la famiglia $\{P^c, c \in \mathcal{X}\}$ sia un nucleo di probabilità da \mathcal{X} in \mathcal{T} .

1.1.2 Proprietà

A ogni processo di Markov è associata in modo naturale una famiglia $\{S_{(t)}, t \in \mathbb{R}^+\}$ di nuclei di probabilità su \mathcal{X} che gode della proprietà di semigruppato: $S_{(s)}S_{(t)} = S_{(s+t)}$. Questi nuclei sono così definiti:

$$S_{(t)}(c, A) \equiv P^c[\zeta_t \in A],$$

dove c è una configurazione e A un insieme misurabile di configurazioni: $c \in \mathcal{X}$, $A \subseteq \mathcal{X}$. Il significato è chiaro: $S_{(t)}(c, A)$ è la probabilità che, data la configurazione c al tempo 0, la configurazione al tempo t sia una delle configurazioni in A ; $S_{(t)}(c, dc')$ è quindi la distribuzione di probabilità su \mathcal{X} al tempo t , quando la configurazione iniziale è c .

Indichiamo con $\mathcal{D} = C(\mathcal{X}, \mathbb{R})$ lo spazio di Banach delle funzioni continue da \mathcal{X} in \mathbb{R} (con la norma del *sup*) e con \mathcal{D}^* lo spazio delle misure con segno su \mathcal{X} . Assegnata una misura di probabilità $\mu \in \mathcal{D}^*$, è determinata l'evoluzione temporale di tale misura, l'applicazione $\mu_t : [0, +\infty) \mapsto \mathcal{D}^*$ data da

$$\mu_t \equiv \mu S_{(t)} \quad \text{ossia} \quad \mu_t(A) = \int_{\mathcal{X}} \mu(dc') S_{(t)}(c', A), \quad A \in \mathcal{X}.$$

Al tempo t , la misura μ_t descrive un ensemble di sistemi che al tempo 0 erano distribuiti come μ .

Reciprocamente la famiglia di nuclei agisce come *semigruppato di operatori* su \mathcal{D} , associando ad ogni funzione la sua evoluta "indietro nel tempo", mediante l'applicazione $f_t : [0, +\infty) \mapsto \mathcal{D}$, definita come

$$f \mapsto f_t \equiv S_{(t)}f \quad \text{ossia} \quad f_t(c) \equiv \int_{\mathcal{X}} S_{(t)}(c, dc') f(c').$$

Le misure agiscono sulle funzioni, mediante l'aspettazione matematica:

$$\mu(f) \equiv \langle f \rangle_{\mu} \equiv \int_{\mathcal{X}} f(c) \mu(dc),$$

e l'evoluzione temporale rispetta questa dualità: come è immediato verificare, vale la relazione

$$\mu_t(f) = \mu(f_t). \quad (1.2)$$

La famiglia dei nuclei di transizione *caratterizza* il processo di Markov; ciò è conseguenza della proprietà (iii), grazie a cui, assegnato lo stato iniziale, la misura sulle traiettorie è determinata dai nuclei $S_{(t)}$. Nel caso di *spazio degli stati numerabile*,

ciò si esprime in maniera lampante: le misure in questo caso sono identificate dal loro valore sulle singole configurazioni, i nuclei si possono scrivere $S_{(t)}(c, c')$, con c e $c' \in \mathcal{X}$, e per la misura indotta su \mathcal{T} si ha:

$$P^c[\zeta_{t_1} = c_1, \dots, \zeta_{t_m} = c_m] = S_{(t_1)}(c, c_1) \cdot S_{(t_2-t_1)}(c_1, c_2) \cdot \dots \cdot S_{(t_m-t_{m-1})}(c_{m-1}, c_m).$$

Inoltre, assegnata una famiglia di nuclei su \mathcal{X} che soddisfi la proprietà di semigruppato, è garantita l'esistenza di un processo di Markov che abbia quelli come nuclei (si veda per es. [5]).

Ma c'è di più: un processo di Markov può essere costruito anche solo a partire dal suo semigruppato di operatori su \mathcal{D} . In termini più precisi, assegnata una famiglia di operatori su \mathcal{D} che sia un *semigruppato di Markov* (ossia goda della proprietà di semigruppato e di altre proprietà ausiliarie, si veda [4] per maggiori dettagli), esiste un unico processo di Markov la cui famiglia di nuclei agisca su \mathcal{D} come la famiglia data. Questo risultato è di grande importanza, perché permette di affrontare la costruzione del processo con i potenti strumenti dell'analisi funzionale. A tal fine viene infatti in aiuto il Teorema di Hille-Yosida che, analogamente al Teorema di Stone per i gruppi unitari a un parametro negli spazi di Hilbert, stabilisce che ogni semigruppato di Markov su $\mathcal{D} = C(\mathcal{X})$ è determinato dal suo generatore infinitesimo, operatore lineare su \mathcal{D} . Il generatore L si ottiene “mediante derivazione”, nel senso che

$$Lf = \lim_{t \searrow 0} \frac{S_{(t)}(f) - f}{t},$$

sulle f per cui questo limite esiste (che costituiscono il dominio di L), e reciprocamente il semigruppato è determinato da L :

$$S_{(t)}f = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(I - \frac{t}{n}L \right)^{-n} f \equiv e^{Lt}f \quad \text{per } f \in \mathcal{D} \text{ e } t > 0.$$

Inoltre, grazie alla proprietà di semigruppato, si ha che

$$\frac{d}{dt} S_{(t)}f = L S_{(t)}f, \quad \text{ossia} \quad \frac{d}{dt} f_t = L f_t : \quad (1.3)$$

f_t è la soluzione di questa equazione differenziale con la condizione iniziale $f_0 = f$.

In ultima analisi, la costruzione di un processo di Markov è stata ridotta alla costruzione del generatore su \mathcal{D} . L'importanza di ciò non risiede solo nell'essere passati da una famiglia a un parametro di operatori a un solo operatore: il fatto più significativo è che il generatore si scrive in modo relativamente semplice e diretto a partire dalla dinamica stocastica microscopica che si vuole abbia il processo. Questo punto si chiarirà nel prossimo paragrafo.

1.1.3 Costruzione

Senza entrare troppo nei dettagli, per i quali si rimanda ancora al Liggett [4], esaminiamo il problema della costruzione del semigruppato di Markov. Ci limiteremo ai sistemi di particelle indistinguibili su reticolo, con esclusione di tipo *hard-core* (al massimo una particella per sito), che sono i modelli che interessano la nostra analisi.

Il nostro reticolo sarà un sottoinsieme connesso Λ del reticolo ipercubico \mathbb{Z}^d , con i versori \mathbf{e}_i , $i = 1, \dots, d$ nelle direzioni principali. A causa dell'indistinguibilità delle particelle, lo spazio delle configurazioni è $\mathcal{X} = \{0, 1\}^\Lambda$. Indicheremo con $|\mathbf{i} - \mathbf{j}|$ la distanza tra i due siti \mathbf{i} e \mathbf{j} ; due siti si diranno primi vicini se $|\mathbf{i} - \mathbf{j}| = 1$. Data una configurazione $C \in \mathcal{X}$ (useremo anche le lettere maiuscole per indicare le configurazioni del sistema), definiamo la configurazione $C^{i,j}$ come

$$C^{i,j}(\mathbf{k}) = \begin{cases} C(\mathbf{i}) & \text{se } \mathbf{k} = \mathbf{j} \\ C(\mathbf{j}) & \text{se } \mathbf{k} = \mathbf{i} \\ C(\mathbf{k}) & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Noi vogliamo costruire, per il nostro gas di particelle su reticolo, un processo in cui l'evoluzione consti di una successione di mosse elementari, nelle quali una particella salta da un sito \mathbf{i} a un sito libero \mathbf{j} , trasformando così la configurazione iniziale C nella configurazione $C^{i,j}$ (si osservi che questa dinamica conserva il numero di particelle). Fisicamente, la dinamica è completamente specificata assegnando la frequenza di questi eventi $w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C)$ e richiedendo che essi accadano indipendentemente l'uno dall'altro. Assumiamo che $w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C) = 0$ se $C(\mathbf{i}) = C(\mathbf{j})$, e anche che

$$w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C) > 0 \quad \text{se } |\mathbf{i} - \mathbf{j}| = 1 \text{ e } C(\mathbf{i}) \neq C(\mathbf{j}). \quad (1.4)$$

Consideriamo innanzitutto il caso in cui il reticolo sia finito²: $|\Lambda| < \infty$, dove con $|\Lambda|$ indichiamo il numero di punti del reticolo. Allora il generatore L per il nostro processo si scrive

$$(Lf)(C) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \Lambda} w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C) [f(C^{i,j}) - f(C)]. \quad (1.5)$$

[Il fattore $1/2$ è dovuto al fatto che la transizione $C \rightarrow C^{i,j}$ viene contata due volte, da $w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C)$ e $w(\mathbf{j}, \mathbf{i}, C)$.] Nel seguito per indicare $w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C)$ useremo anche la notazione $w_{C \rightarrow C^{i,j}}$.

²In questa situazione $\mathcal{D} = C(\mathcal{X})$ è uno spazio di Banach finito dimensionale, e la costruzione *naïve* che stiamo per fare non è inficiata da problemi tecnici.

In generale quando il reticolo è finito si può ammettere per i siti alla frontiera una dinamica aggiuntiva, corrispondente all'immissione e all'estrazione di particelle: ciò avviene specificando le frequenze $w(\mathbf{i}, C)$ per le transizioni $C \rightarrow C^i$ (indicando con C^i la configurazione in cui $C(\mathbf{i})$ è sostituito da $1 - C(\mathbf{i})$), con $\mathbf{i} \in \partial\Lambda$. Come si intuisce, è sufficiente a tal fine aggiungere al generatore L della (1.5) un contributo L_b dato da:

$$(L_b f)(C) = \sum_{\mathbf{i} \in \partial\Lambda} w(\mathbf{i}, C)[f(C^i) - f(C)].$$

La costruzione del generatore nel caso in cui $|\Lambda| = \infty$ richiede più cautela: affinché il generatore risulti ben definito è necessario richiedere alcune proprietà alle frequenze di transizione. Due condizioni sufficienti risultano essere:

- la dinamica ha un *raggio finito*, nel senso che esiste $R > 0$ tale che

$$w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C) = 0 \quad \text{se } |\mathbf{i} - \mathbf{j}| > R$$

e tale che $w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C)$ dipenda dalla configurazione solo attraverso i siti “non distanti” da \mathbf{i} e \mathbf{j} , ossia da $\{C(\mathbf{k}), \text{ con } |\mathbf{k} - \mathbf{i}| \text{ e } |\mathbf{k} - \mathbf{j}| \leq R\}$;

- la dinamica è *invariante per traslazioni*, ossia

$$w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C) = w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathcal{T}_{\mathbf{a}} C),$$

dove $\mathcal{T}_{\mathbf{a}}$ è l'operatore di traslazione di \mathbf{a} , definito come $(\mathcal{T}_{\mathbf{a}} C)(\mathbf{i}) = C(\mathbf{i} - \mathbf{a})$.

Si procede dunque alla costruzione del generatore: indicando con $\mathcal{D}_0 \subset \mathcal{D}$ l'insieme delle funzioni da \mathcal{X} in \mathbb{R} “locali”, che dipendono solo da un numero finito di siti (per le quali esiste $Q > 0$ tale che $f(C) = f(C')$ per ogni C, C' con $C(\mathbf{i}) = C'(\mathbf{i})$ per $|\mathbf{i}| < Q$), si definisce l'azione di L su \mathcal{D}_0 come nell'eq. (1.5); se le frequenze di transizione hanno raggio finito e sono invarianti per traslazioni, si dimostra che è possibile estendere L a \mathcal{D} .

In generale l'evoluzione temporale non preserva la località: anche se $f \in \mathcal{D}_0$, non è detto che $f_t \in \mathcal{D}_0$; tuttavia la dipendenza di f dalle variabili lontane resta esponenzialmente debole, nel senso che i seguenti insiemi:

$$\mathcal{D}_{(Q,a,b)} \equiv \left\{ f \in \mathcal{D} \mid \sup_{C, C' \text{ con } C(\mathbf{i}) = C'(\mathbf{i}) \text{ per } |\mathbf{i}| < Q} |f(C) - f(C')| \leq a e^{-bQ} \right\},$$

con Q, a e b costanti positive arbitrarie, sono lasciati invariati dall'azione del semi-gruppo, ossia $\exp(Lt)\mathcal{D}_{(Q,a,b)} \subset \mathcal{D}_{(Q,a,b)}$.

Può risultare utile dare una descrizione del nostro processo svincolata dal semi-gruppo di Markov, meno legata alle tecniche analitiche, ottenuta costruendo “con le mani” la misura sullo spazio delle traiettorie del sistema.

Fissiamo la configurazione iniziale C_0 e costruiamo le realizzazioni del nostro processo come segue; ricordiamo che lo spazio delle traiettorie è $\mathcal{T} = \{\zeta : [0, +\infty) \mapsto \mathcal{X}\}$, dove $\mathcal{X} = \{0, 1\}^\Lambda$ è lo spazio delle configurazioni (che supporremo finito).

Partiamo con $\zeta_t = C_0$ per $t \in [0, \tau^0)$, dove τ^0 è un tempo d’attesa casuale distribuito esponenzialmente con tempo caratteristico $\bar{\tau}(C_0)$:

$$\text{Prob}(d\tau^0) \propto e^{-\tau^0/\bar{\tau}(C_0)}, \quad \bar{\tau}(C) \equiv \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} w(i, j, C).$$

All’istante τ_0 si sceglie una nuova configurazione $C_1 = C^{i,j}$, secondo la probabilità

$$\text{Prob}(C_1 = C^{i,j} | C_0) = \frac{w(i, j, C_0)}{\bar{\tau}(C_0)},$$

e si continua con $\zeta_t = C_1$ per $t \in [\tau_0, \tau_0 + \tau_1)$, dove τ_1 è un altro tempo d’attesa esponenziale, indipendente da τ_0 e con tempo caratteristico $\bar{\tau}(C_1)$, e così via.

Quello appena esposto è qualcosa di più di un racconto informale: il discorso può essere formalizzato, e costituisce una via alternativa per definire il nostro processo di Markov; si veda l’Appendice A.1 per un approfondimento.

1.1.4 La Master Equation

Fino a questo momento la nostra attenzione è stata rivolta alla costruzione del processo di Markov mediante il suo semigruppo, che agisce sullo spazio $\mathcal{D} = C(\mathcal{X}, \mathbb{R})$ delle funzioni continue da \mathcal{X} in \mathbb{R} .

Come abbiamo visto, il semigruppo agisce per dualità anche su \mathcal{D}^* , lo spazio delle misure su \mathcal{X} . Da un punto di vista fisico, una misura di probabilità su \mathcal{X} descrive un ensemble, che costituisce uno degli oggetti principali nell’analisi della meccanica statistica: si comprende dunque l’interesse che riveste lo studio dell’evoluzione temporale delle misure.

Ci limiteremo al caso in cui il reticolo sia finito, e dunque sia finito anche lo spazio delle configurazioni \mathcal{X} . In questo caso su \mathcal{X} c’è una misura naturale, quella uniforme, che induce il prodotto scalare canonico:

$$\langle f, g \rangle \equiv \sum_{C \in \mathcal{X}} f(C) g(C) \quad \text{per } f, g \in \mathcal{D}.$$

Si osservi che, essendo ogni misura μ su \mathcal{X} determinata dai suoi valori sulle singole configurazioni $\{\mu(C)\}$, ogni misura può essere pensata come una funzione su \mathcal{X} , e viceversa ogni funzione positiva determina una misura: questa identificazione non è altro che l'isomorfismo naturale tra \mathcal{D} e il suo duale, indotto dal prodotto scalare:

$$\mu(f) = \sum_{C \in \mathcal{X}} \mu(C) f(C) = \langle \mu, f \rangle.$$

Nell'evoluzione delle misure, gioca un ruolo fondamentale L^* , l'aggiunto di L rispetto al prodotto scalare canonico: $\langle Lf, g \rangle = \langle f, L^*g \rangle$ per ogni $f, g \in \mathcal{D}$. Ricordando la definizione di L dall'equazione (1.5), si ricava la seguente espressione per L^* :

$$L^*f = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} \{ w(i, j, C^{i,j}) f(C^{i,j}) - w(i, j, C) f(C) \}, \quad f \in \mathcal{D}.$$

Ricordando la relazione di dualità (1.2), a partire dall'equazione (1.3) che determina l'evoluzione di f_t possiamo ricavare un'analogia equazione differenziale per μ_t :

$$\left\langle \frac{d}{dt} \mu_t, f \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \mu, f_t \rangle = \langle \mu, Lf_t \rangle = \langle L^* \mu_t, f \rangle,$$

da cui $d\mu_t/dt = L^* \mu_t$, per l'arbitrarietà di f . Dunque L^* è il generatore dell'evoluzione temporale per le misure; usando l'espressione di L^* ricavata sopra, possiamo scrivere l'equazione per μ_t in funzione delle frequenze di transizione:

$$\frac{d}{dt} \mu_t(C) = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} \{ w_{C^{i,j} \rightarrow C} \mu_t(C^{i,j}) - w_{C \rightarrow C^{i,j}} \mu_t(C) \}. \quad (1.6)$$

Questa è la celebre Master Equation. Grande importanza rivestono le *misure stazionarie* o *invarianti*, ossia le soluzioni di tale equazione per cui $\frac{d}{dt} \mu_t = 0$. Per costruzione, la dinamica del nostro modello conserva il numero di particelle, e dunque lo spazio delle configurazioni si decompone nei settori $\mathcal{X}_N \equiv \{C \in \mathcal{X}, \sum_{i \in \Lambda} C(i) = N\}$, che vengono lasciati invariati. All'interno di ogni settore, grazie alla condizione (1.4) la dinamica è irriducibile (ossia ogni configurazione è connessa a ogni altra configurazione da un numero finito di mosse a probabilità non nulla), e dunque fissato il numero di particelle è unica la misura stazionaria.

Dato che per ipotesi $|\mathcal{X}| < \infty$, la distribuzione di probabilità che sopravvive per tempi lunghi è la misura invariante: indipendentemente da quale sia la misura iniziale, si ha un rilassamento verso questa misura³. Si comprende dunque l'inte-

³Se le condizioni al bordo non conservano il numero di particelle, non ci sono - a meno di valori patologici dei $w(i, C)$ - sottoinsiemi di \mathcal{X} lasciati invariati dalla dinamica; in questo caso c'è una sola misura stazionaria su \mathcal{X} , verso cui il sistema rilassa indipendentemente dalla condizione iniziale.

resse di trovare la misura stazionaria di un sistema (fuori dall'equilibrio): è questa che ne descrive lo stato stazionario di non equilibrio. Ma è giunto il momento di chiarire, nell'ambito di questi processi stocastici, che cosa intendiamo precisamente con "sistema fuori dall'equilibrio".

1.1.5 Reversibilità stocastica e bilancio dettagliato

La nozione di reversibilità per un processo stocastico traduce l'idea intuitiva di invarianza per inversione temporale. Quello che si richiede è che, se ζ_t è una traiettoria "tipica" del sistema, anche la traiettoria vista al contrario ζ_{-t} sia ugualmente plausibile: se mi viene mostrato un filmato dell'evoluzione del sistema proiettato a rovescio, non me ne devo accorgere.

La reversibilità è una delle proprietà fondamentali che caratterizzano l'equilibrio termodinamico, e può anzi essere considerata la caratteristica che contraddistingue un sistema all'equilibrio, rispetto a un sistema fuori dall'equilibrio⁴. Quindi se voglio definire un processo che modella un sistema all'equilibrio con Hamiltoniana \mathcal{H} , nell'ambito dei sistemi di particelle su reticolo, dovrò scegliere le frequenze di transizione in modo che innanzitutto producano come misura stazionaria la misura di Gibbs $e^{-\beta\mathcal{H}}$, e inoltre generino un processo reversibile. Cerchiamo dunque di formalizzare la nozione di reversibilità, per analizzarne le conseguenze.

Si ricordi che un *processo di Markov* è in realtà una famiglia di processi stocastici, uno per ogni condizione iniziale; nelle nostre ipotesi questa famiglia è completamente determinata assegnando le frequenze di transizione $w_{C \rightarrow C'}$. Inoltre, fissato il numero di particelle, c'è una sola misura invariante.

Quando nel seguito parleremo di processo, intenderemo piuttosto un singolo processo stocastico, determinato dalla famiglia di Markov e da una particolare misura iniziale $\mu \in \mathcal{D}^*$, che nel nostro caso sarà proprio la misura invariante. Infatti condizione necessaria per definire la reversibilità di un processo X_t è che il processo sia stazionario, e dunque sia stazionaria la sua misura iniziale μ : in caso contrario, il processo indurrebbe sullo spazio delle configurazioni \mathcal{X} una misura che varia col tempo.

⁴Per i sistemi le cui grandezze variano col tempo, la non invarianza per inversione temporale è palese, ma essa vale anche per i sistemi che raggiungono uno stato stazionario di non equilibrio (si pensi al già citato fenomeno della corrente elettrica): *la stazionarietà non implica reversibilità*, anche se ne è naturalmente condizione necessaria.

Un processo stazionario con insieme dei tempi $[0, +\infty)$ ha un'estensione canonica a un processo con insieme dei tempi \mathbb{R} , ed è dunque definito il processo invertito $X_t^I \equiv X_{-t}$. Un processo X_t si dirà reversibile se le misure di probabilità che X_t e X_t^I inducono sullo spazio delle traiettorie $\mathcal{T} = T([0, +\infty), \mathcal{X})$ coincidono.

La reversibilità di un processo si può esprimere mediante un'equivalente, significativa condizione⁵ in termini del suo semigrupp e della sua misura iniziale (e stazionaria) μ :

$$\mu(C) S_{(t)}(C, C') = \mu(C') S_{(t)}(C', C), \quad \text{per ogni } t \in [0, +\infty), \quad C, C' \in \mathcal{X},$$

la cui interpretazione è chiara: la frequenza per una transizione dalla configurazione C alla configurazione C' in un intervallo di tempo t è uguale, nello stato stazionario, alla frequenza per la transizione opposta. Non stupisce che sia possibile un'analogia formulazione in termini del generatore, che coinvolge le frequenze infinitesime:

$$\mu(C) w_{C \rightarrow C'} = \mu(C') w_{C' \rightarrow C}, \quad (1.7)$$

dove $C' = C^{i,j}$ e $w_{C \rightarrow C'} = w(i, j, C)$, $w_{C' \rightarrow C} = w(i, j, C^{i,j})$. È evidente che se una misura μ soddisfa questa condizione essa è automaticamente stazionaria (si confronti la (1.7) con la (1.6)).

La condizione (1.7) è detta anche *bilancio dettagliato* ed è la proprietà fondamentale che caratterizza la dinamica microscopica di un sistema all'equilibrio rispetto a quella di un sistema fuori dall'equilibrio. *Ogni volta che nel seguito parleremo di sistemi stocastici fuori dall'equilibrio, intenderemo riferirci a sistemi per i quali tale condizione non è verificata.*

Alcune importanti osservazioni: se assegnamo le frequenze di transizione tra le configurazioni con un fissato numero di particelle su reticolo finito, grazie all'irriducibilità della dinamica c'è un'unica misura invariante, determinata dalla Master Equation. Essendo la misura invariante univocamente determinata, la condizione (1.7) è una condizione implicita *sulle sole frequenze*: è dunque corretto chiedersi se un sistema, definito assegnando le frequenze di transizione, sia o non sia reversibile, intendendo con ciò chiedersi se la sua misura invariante soddisfi o no la condizione di bilancio dettagliato (1.7).

⁵Siamo sempre nel caso $|\Lambda| < \infty$.

Tuttavia quando si assegnano le frequenze di transizione nel definire un sistema, la misura stazionaria che ne deriva non è quasi mai nota esplicitamente: la condizione (1.7) si rivela di scarsa utilità pratica, in questi casi. Risulta quindi molto interessante la seguente riformulazione della condizione di bilancio dettagliato, in termini delle sole frequenze di transizione:

se la dinamica di un sistema è irriducibile, la sua misura stazionaria è reversibile se e solo se per ogni insieme di configurazioni $\{C_1, C_2, \dots, C_n\}$ vale che

$$w_{C_1 \rightarrow C_2} \cdots w_{C_{n-1} \rightarrow C_n} \cdot w_{C_n \rightarrow C_1} = w_{C_1 \rightarrow C_n} \cdot w_{C_n \rightarrow C_{n-1}} \cdots w_{C_2 \rightarrow C_1}. \quad (1.8)$$

La dimostrazione è molto semplice: la necessità segue direttamente dalla definizione di bilancio dettagliato, che si può anche scrivere

$$\frac{\mu(C)}{\mu(C')} = \frac{w_{C' \rightarrow C}}{w_{C \rightarrow C'}} \implies \frac{w_{C_1 \rightarrow C_2}}{w_{C_2 \rightarrow C_1}} \cdots \frac{w_{C_{n-1} \rightarrow C_n}}{w_{C_n \rightarrow C_{n-1}}} \cdot \frac{w_{C_n \rightarrow C_1}}{w_{C_1 \rightarrow C_n}} = 1.$$

La via per dimostrare la sufficienza è indicata dalla stessa condizione (1.7), riscritta come

$$\mu(C) = \mu(C') \frac{w_{C' \rightarrow C}}{w_{C \rightarrow C'}}, \quad (1.9)$$

che lega i pesi di due configurazioni C, C' nello stato stazionario (a patto che $w_{C \rightarrow C'} \neq 0$). Fissata una configurazione di partenza C_0 a cui si dà per convenzione peso unitario⁶ $\mu(C_0) = 1$, per ogni configurazione C si sceglie un “percorso a probabilità non nulla” $\{C_0, C_1, \dots, C_{n-1}, C_n = C\}$ che la connetta con C_0 (l'esistenza di tale percorso è garantita dall'irriducibilità delle dinamica); si definisce quindi $\mu(C)$ iterando la (1.9) lungo il percorso che porta da C_0 a C :

$$\mu(C) \equiv \frac{w_{C_0 \rightarrow C_1}}{w_{C_1 \rightarrow C_0}} \cdots \frac{w_{C_{n-1} \rightarrow C}}{w_{C \rightarrow C_{n-1}}}.$$

La condizione (1.8) serve proprio a garantire che questa costruzione è ben definita, non dipende cioè dal particolare percorso scelto; la μ che ne risulta soddisfa per costruzione la condizione di bilancio dettagliato (1.7), e dunque è reversibile.

⁶Stiamo qui definendo una misura non normalizzata: per ottenere una misura di probabilità occorre dividere μ per la sua massa $Z = \sum_C \mu(C)$ (la misura stazionaria è sempre definita a meno di fattori moltiplicativi).

Prima di passare alla descrizione del gas reticolare forzato, riprendiamo la Master Equation (1.6), che riscriviamo come:

$$\frac{d}{dt}\mu_t(C) = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} \{ w(i, j, C^{i,j}) \mu_t(C^{i,j}) - w(i, j, C) \mu_t(C) \}.$$

Data una funzione $f(C) : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$, definiamo gli operatori “differenziali” \mathcal{D}_{ij} su reticolo: $(\mathcal{D}_{ij}f)(C) \equiv f(C^{i,j}) - f(C)$; si può così evidenziare come la Master Equation altro non sia che un’ equazione di continuità discreta per la probabilità μ_t :

$$\frac{d}{dt}\mu_t(C) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} \mathcal{D}_{ij} J_{ij}^\mu(C) = 0, \quad (1.10)$$

dove la corrente di probabilità associata alla misura μ è definita da $J_{ij}^\mu(C) \equiv -w(i, j, C)\mu(C)$. In questi termini, richiedere che una misura sia stazionaria equivale a imporre che la corrente a essa associata sia a divergenza nulla:

$$\sum_{i,j \in \Lambda} \mathcal{D}_{ij} J_{ij}^\mu(C) = 0 \quad \text{per ogni } C \in \mathcal{X},$$

mentre la condizione di bilancio dettagliato coincide con la richiesta più forte che ogni singola componente della corrente di probabilità sia a “derivata” nulla:

$$\mathcal{D}_{ij} J_{ij}^\mu(C) = 0 \quad \text{per ogni } C \in \mathcal{X}, \quad i, j \in \Lambda.$$

1.2 Il gas reticolare forzato

In questa sezione applicheremo la teoria generale esposta nei precedenti paragrafi alla costruzione effettiva dei sistemi di particelle che interessano la nostra analisi. Come abbiamo visto, il punto di partenza è la costruzione del generatore del semigruppato di Markov per il processo, che si traduce nell’assegnazione della dinamica mediante le frequenze di transizione tra le configurazioni del sistema.

Qual è la connessione tra il sistema fisico che vogliamo descrivere e le frequenze di transizione che caratterizzano il processo stocastico? La risposta a questa domanda è differente a seconda che si consideri un sistema all’equilibrio termodinamico o fuori dall’equilibrio. Affrontiamo innanzitutto il primo caso.

1.2.1 Sistemi all'equilibrio termodinamico

Come abbiamo già avuto modo di notare, le proprietà termodinamiche di un sistema all'equilibrio sono interamente determinate dalle interazioni statiche: nota l'Hamiltoniana \mathcal{H} del sistema, la misura di Gibbs⁷ $e^{-\beta\mathcal{H}}$ sullo spazio delle configurazioni permette il calcolo dei valori medi delle osservabili. Tuttavia, in alcuni contesti (per esempio quando si vogliono effettuare simulazioni Monte Carlo) risulta utile disporre anche di una descrizione dinamica del sistema: occorre dunque capire come debbano essere assegnate le frequenze di transizione. Le condizioni da soddisfare sono le seguenti:

- (i) il processo deve avere come misura stazionaria la misura di Gibbs:

$$\mu_{eq}(C) = e^{-\beta\mathcal{H}(C)} ;$$

- (ii) dovendo modellizzare un sistema all'equilibrio, il processo deve essere reversibile (si veda la discussione nel Paragrafo 1.1.5): deve dunque valere la condizione di bilancio dettagliato per le frequenze di transizione.

Nel nostro caso, conoscendo a priori la misura stazionaria P_{eq} , il bilancio dettagliato si impone facilmente, direttamente dalla definizione (1.7): le frequenze di transizione $w_{C \rightarrow C'}$ devono essere scelte in modo che

$$\frac{w_{C \rightarrow C'}}{w_{C' \rightarrow C}} = \frac{\mu_{eq}(C')}{\mu_{eq}(C)}, \quad (1.11)$$

ossia

$$\frac{w_{C \rightarrow C'}}{w_{C' \rightarrow C}} = \exp[-\beta(\mathcal{H}(C') - \mathcal{H}(C))]. \quad (1.12)$$

Questa è in definitiva l'unica condizione per le frequenze: una volta che essa sia soddisfatta, la misura di Gibbs è in modo evidente la misura stazionaria del sistema. Come vedremo subito, le frequenze non vengono fissate in modo univoco da tale condizione: qualunque scelta delle $w_{C \rightarrow C'}$ compatibile con essa determina un processo stocastico che descrive lo stesso sistema all'equilibrio.

Richiediamo che le frequenze siano funzione solo della differenza di energia:

$$w_{C \rightarrow C'} = g[\beta(\mathcal{H}(C') - \mathcal{H}(C))],$$

⁷Con β si indica l'inverso della temperatura: $\beta = 1/kT$, dove k è la costante di Boltzmann. Si osservi che, per ottenere effettivamente una misura di probabilità, la misura di Gibbs $e^{-\beta\mathcal{H}}$ va normalizzata, dividendola per la funzione di partizione $Z \equiv \int_{\mathcal{X}} e^{-\beta\mathcal{H}}$; ci riferiremo spesso a misure non normalizzate.

dove $g[x]$ è una funzione a valori reali positivi; affinché la (1.12) sia soddisfatta, deve valere che

$$\frac{g[-x]}{g[x]} = e^x. \quad (1.13)$$

A seconda della scelta di $g(x)$ si distinguono diversi tipi di dinamiche. L'algoritmo più frequentemente utilizzato nelle simulazioni è quello introdotto da Metropolis, corrispondente alla scelta

$$g[x] = \min\{1, e^{-x}\}. \quad (1.14)$$

Facciamo una piccola digressione sull'implementazione algoritmica della dinamica nelle simulazioni Monte Carlo, che avviene nel modo seguente. Il tempo viene discretizzato in intervalli di ampiezza dt ; data la configurazione attuale C_t del sistema, si sceglie casualmente una coppia di siti $\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \Lambda$: la configurazione al tempo $t+dt$ sarà $C_{t+dt} = C_t^{i,j}$ con probabilità $w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C_t) dt$ oppure $C_{t+dt} = C_t$ con probabilità $1 - w(\mathbf{i}, \mathbf{j}, C_t) dt$; si sceglie quindi un'altra coppia di siti e si ripete la procedura: la catena di Markov così costruita approssima per $dt \rightarrow 0$ il processo continuo.

Computazionalmente l'algoritmo di Metropolis viene applicato nel modo seguente (si veda anche il Capitolo 3): scelta la coppia di siti (\mathbf{i}, \mathbf{j}) , si determina la differenza in energia per la corrispondente mossa elementare, $\Delta E = \mathcal{H}(C^{i,j}) - \mathcal{H}(C)$; se $\Delta E < 0$, la mossa viene senz'altro accettata mentre, se $\Delta E > 0$, si estrae un numero casuale z distribuito uniformemente tra 0 e 1 e la mossa viene accettata solo se $z < e^{-\Delta E}$. Il significato fisico della procedura è chiaro: il primo caso corrisponde alla tendenza naturale verso configurazioni meno energetiche, il secondo tiene conto che il sistema è a contatto con un bagno termico che può fornire l'energia necessaria per la transizione, anche se questa è accompagnata da un aumento di energia.

Il problema della dinamica per un sistema all'equilibrio può dunque dirsi risolto, tramite l'assegnazione delle frequenze, nella forma sopra esposta.

Nei casi più semplici, l'Hamiltoniana del sistema è costituita da interazioni a corto raggio, tipicamente solo tra primi vicini, come nella classica Hamiltoniana di Ising:

$$\mathcal{H}_I(C) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j = -4J \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (1.15)$$

dove con $\langle i, j \rangle$ si indicano le coppie di primi vicini; si è posto $n_i = C(\mathbf{i})$ e sono state introdotte le variabili "di spin" $\sigma_i \equiv 2n_i - 1$. La scelta $J > 0$ (risp. $J < 0$) corrisponde ad avere un'interazione attrattiva (risp. repulsiva) tra le particelle: in

termini di spin, si può parlare anche di interazione di carattere ferromagnetico (risp. antiferromagnetico).

Come abbiamo anticipato, noi saremo interessati esclusivamente a *dinamiche diffusive*, dove il numero di particelle è conservato dalla dinamica interna, in cui le transizioni da una configurazione all'altra corrispondono a semplici salti di particelle; tuttavia il numero complessivo di particelle nel sistema non sarà necessariamente conservato, a causa delle condizioni al bordo. Per la descrizione di un sistema all'equilibrio, è possibile scegliere le condizioni al bordo come si preferisce: si può ammettere l'immissione e l'estrazione di particelle, oppure si possono imporre condizioni periodiche o chiuse, che conservano globalmente il numero di particelle; l'essenziale è che sia soddisfatto il bilancio dettagliato e che la misura stazionaria sia quella di Gibbs.

1.2.2 Fuori dall'equilibrio: il modello KLS

Per i sistemi all'equilibrio l'assegnazione delle frequenze di transizione è funzionale a produrre una distribuzione di equilibrio nota a priori: le frequenze non hanno un ruolo fondamentale e non sono univocamente determinate (spesso vengono scelte in base a ragioni di comodità computazionale).

La situazione fuori dall'equilibrio si presenta molto differente: qui la fisica del sistema viene tipicamente caratterizzata proprio nell'assegnazione delle frequenze, che costituiscono quindi il punto di partenza; la misura stazionaria viene determinata da queste mediante la risoluzione della Master Equation, che costituisce un ostacolo tutt'altro che banale. Le difficoltà nello studio dei sistemi fuori dall'equilibrio sorgono proprio dal fatto che la misura che caratterizza lo stato stazionario in generale non è nota: la sua dipendenza dalle quantità che caratterizzano il sistema, le frequenze di transizione, non è esprimibile in forma esplicita.

Introduciamo ora un semplice modello di gas reticolare forzato (DLG, *Driven Lattice Gas*), noto anche come modello KLS (da Katz, Lebowitz e Spohn che lo introdussero nel 1983, [6]). Il punto di partenza è un sistema di particelle sul reticolo finito Λ , soggette a interazioni tra primi vicini come nel modello di Ising, secondo l'Hamiltoniana (1.15); la dinamica è diffusiva, e ammetteremo salti di particelle solo nei siti primi vicini⁸. Vogliamo portare il sistema fuori dall'equilibrio per mezzo di un campo esterno ("campo elettrico") \mathbf{E} che agisca localmente su ogni sito, inducendo

⁸Considerare salti tra siti più lontani (purché a distanza minore di una fissata) complicherebbe il modello senza probabilmente modificarne il comportamento critico.

le particelle a muoversi preferenzialmente in una direzione, coincidente con un asse reticolare; il campo è supposto per semplicità uniforme e costante nel tempo.

Dobbiamo tradurre tutto ciò in condizioni sulle frequenze: avendo intenzione di costruire un processo stocastico che modellizzi un sistema fuori dall'equilibrio, le nostre frequenze di transizione *non* dovranno soddisfare la condizione di bilancio dettagliato. Tuttavia è fisicamente ragionevole supporre che la condizione (1.12) continui a valere *localmente*, quando si tenga conto del lavoro fatto dal campo elettrico; sceglieremo cioè le frequenze in modo che

$$\frac{w_{C \rightarrow C^{i,j}}}{w_{C^{i,j} \rightarrow C}} = \exp \left\{ -\beta [\mathcal{H}_I(C^{i,j}) - \mathcal{H}_I(C) - \mathbf{E} \cdot (\mathbf{j} - \mathbf{i})(C(\mathbf{i}) - C(\mathbf{j}))] \right\}. \quad (1.16)$$

Come abbiamo già notato, questa relazione non fissa la forma delle $w_{C \rightarrow C'}$; impiegando l'algoritmo di Metropolis già introdotto, porremo

$$w_{C \rightarrow C^{i,j}} = g \left[\beta [\mathcal{H}_I(C^{i,j}) - \mathcal{H}_I(C) - \mathbf{E} \cdot (\mathbf{j} - \mathbf{i})(C(\mathbf{i}) - C(\mathbf{j}))] \right] \quad (1.17)$$

$$g[x] = \min\{1, e^{-x}\}.$$

Si intuisce immediatamente l'importanza che giocheranno le condizioni al contorno nel portare fuori dall'equilibrio il nostro sistema. In effetti, se consideriamo condizioni al bordo chiuse (ossia non aggiungiamo nessuna particolare dinamica per i siti alla frontiera), l'effetto del campo è del tutto analogo all'effetto che l'attrazione gravitazionale terrestre produce sulle particelle di un gas racchiuso in un contenitore; se si introduce una nuova Hamiltoniana $\mathcal{H}' \equiv \mathcal{H}_I + U$ che tenga conto dell'energia potenziale $U(C) = -\sum_i (\mathbf{E} \cdot \mathbf{i})C(\mathbf{i})$ dovuta al campo, si può facilmente verificare che la misura $e^{-\beta \mathcal{H}'}$ è stazionaria e reversibile per questo sistema: direttamente dalla proprietà (1.16) delle frequenze segue che $P_{eq} \equiv e^{-\beta \mathcal{H}'}$ soddisfa la condizione di bilancio dettagliato (1.7).

Dunque se si impongono condizioni al bordo chiuse un sistema descritto da frequenze che verifichino la (1.16) è un sistema all'equilibrio, ossia le $w_{C \rightarrow C'}$ soddisfano il bilancio dettagliato⁹. Nello stato stazionario la densità del gas aumenta man mano che ci si muove nella direzione di \mathbf{E} : le configurazioni tipiche presentano un'interfaccia tra una regione a bassa densità e una ad alta densità di particelle, che è stabile perché il flusso diffusivo dovuto al gradiente di concentrazione bilancia quello opposto dovuto all'azione del campo.

⁹Ha perfettamente senso affermare che le frequenze soddisfano il bilancio dettagliato, perché la misura P_{eq} che compare nella definizione (1.11) è da esse determinata; si riveda in merito la discussione nel paragrafo 1.1.5.

Naturalmente non è questa la situazione che ci interessa: tutto risulta estremamente più interessante se si impongono condizioni periodiche sul reticolo Λ , per lo meno nella direzione di \mathbf{E}^{10} . In questo modo nelle configurazioni sopra menzionate compare un'interfaccia tra due regioni a differente densità di particelle che non è più stabile, a causa dell'azione questa volta concorde di campo e gradiente di concentrazione: l'interfaccia si rompe e si genera un flusso di particelle attraverso il sistema. Per essere precisi, il reticolo del nostro sistema sarà un toro d -dimensionale:

$$\Lambda = \left\{ \bigotimes_{i=1, \dots, d} \{-a_i, \dots, a_i\}, a_i \in \mathbb{N}, a_i \approx -a_i \right\},$$

dove con “ \approx ” indichiamo l'identificazione topologica; per essere definiti, il campo sarà nella direzione positiva dell'asse 1, ossia $\mathbf{E} = (E, 0, \dots, 0)$.

Il punto fondamentale è che ora le frequenze (1.17) descrivono un sistema fuori dall'equilibrio, ossia non soddisfano la condizione di bilancio dettagliato, come tra poco mostreremo. La misura $e^{-\beta \mathcal{H}'}$ non è più stazionaria: le condizioni al bordo periodiche rendono infatti possibili nuove transizioni, in cui una particella salta attraverso quella che prima era la frontiera; proprio in corrispondenza di queste transizioni, la misura $e^{-\beta \mathcal{H}'}$ non verifica più la (1.11). La ragione profonda di ciò è che, nella topologia del toro, il campo uniforme \mathbf{E} non è conservativo: non è dunque possibile definire un'energia potenziale (che risulterebbe a più valori) da aggiungere a \mathcal{H}_I per tenere conto del lavoro del campo.

Mostriamo che effettivamente in ogni settore irriducibile per la dinamica, ossia per ogni valore del numero totale di particelle N , le frequenze di transizione non soddisfano il bilancio dettagliato. Non potendo a tal fine usare la definizione (1.11), perché la misura stazionaria P_{eq} non è nota, ci rifaremo all'equivalente condizione (1.8), discussa in precedenza. Consideriamo per semplicità le configurazioni con una sola particella; scelta una configurazione di partenza C_0 , facciamo fare alla particella un giro completo del toro nella direzione del campo, attraverso le configurazioni $C_1, \dots, C_n = C_0$; dalla (1.17) è immediato vedere che

$$e^{-2a_1|\mathbf{E}|} = w_{C_1 \rightarrow C_2} \cdot \dots \cdot w_{C_n \rightarrow C_1} \neq w_{C_n \rightarrow C_{n-1}} \cdot \dots \cdot w_{C_1 \rightarrow C_n} = e^{2a_1|\mathbf{E}|},$$

(si ricordi che $2a_1$ è la lunghezza del reticolo nella direzione del campo) e dunque la condizione (1.8) non è soddisfatta. Non è difficile produrre controesempi nello

¹⁰Noi imponremo sempre condizioni periodiche in tutte le direzioni: ciò presenta il considerevole vantaggio di preservare l'invarianza per traslazioni.

stesso stile per configurazioni con un generico numero di particelle: ogni volta che una particella effettua un percorso chiuso nella direzione del campo, il campo compie lavoro e ciò determina una violazione del bilancio dettagliato.

1.2.3 Motivazioni fisiche

Il gas reticolare forzato che abbiamo introdotto sarà l'oggetto centrale di questo lavoro di tesi: il modello quasi unidimensionale che studieremo mediante simulazioni Monte Carlo nel Capitolo 3 è una variante del modello KLS, in cui il limite termodinamico (su cui torneremo tra poco) viene effettuato solo nella direzione del campo, e anche i vari processi di esclusione che costituiscono i modelli risolti esattamente discussi nel prossimo capitolo non sono che casi limite di questo stesso modello, in cui l'Hamiltoniana non conta più (ossia si pone $J = 0$ nella (1.15)).

Come si è accennato nell'introduzione, lo studio del DLG è motivato dalla sua semplicità, grazie a cui si cerca di ricavare il maggior numero di informazioni esatte, nella speranza di raggiungere una maggiore comprensione di quello che è in generale il comportamento dei sistemi fuori dall'equilibrio. Sebbene le ragioni della sua introduzione siano dunque di carattere prettamente teorico, ci sono nondimeno esempi di fenomeni fisici sperimentalmente osservabili che possono essere in qualche modo connessi con il gas reticolare forzato. Nei conduttori superionici e negli elettroliti solidi, una o più specie ioniche godono di elevata mobilità, per la disponibilità di un grande numero di siti interstiziali o di difetti reticolari. Per alcuni di questi materiali, come lo AgI solido, la conducibilità in assenza di campo esterno è confrontabile con quella dei normali cristalli ionici fusi, come il NaCl; inoltre la conducibilità manifesta una forte dipendenza dalla temperatura, caratteristica che suggerisce la presenza di transizioni di fase (nel caso dello AgI, la conducibilità subisce un aumento di diversi ordini di grandezza, si pensa dovuto a una transizione ordine-disordine nell'occupazione dei siti). Se si suppone che le interazioni tra gli ioni siano a corto raggio, allora per rendere conto delle transizioni di fase un'opportuna versione del gas reticolare può costituire una prima modellizzazione ([8, 9]). C'è però da dire che nello studio del gas reticolare sono state evidenziate transizioni di fase solo nel caso di interazione attrattiva tra le particelle, mentre nella maggior parte degli elettroliti solidi le interazioni tra le diverse specie sono sia attrattive sia repulsive; inoltre, i fenomeni osservati sperimentalmente sono relativi ad effetti di campi deboli, e per una loro comprensione spesso sono sufficienti teorie di risposta lineare, nell'ambito delle perturbazioni di sistemi all'equilibrio.

1.2.4 Proprietà del modello: simmetrie, transizione di fase

Affronteremo ora lo studio delle proprietà salienti del modello KLS (per una trattazione approfondita, si veda [7]). Ricordiamo che la misura stazionaria $\mu_{\beta, \mathbf{E}, N}$ non è nota a priori e, soprattutto, non è ricavabile esplicitamente nel caso generale, se non per reticoli di dimensioni molto ridotte (2×3 , 2×4): avremo modo di vedere che essa presenta caratteristiche sensibilmente differenti da una misura di equilibrio. Diverse informazioni importanti in merito derivano dalle simmetrie del sistema, che si riflettono in conseguenti simmetrie per la misura stazionaria; segue che $\mu_{\beta, \mathbf{E}, N}$ deve essere invariante sotto le seguenti operazioni:

(a) *Traslazioni*:

$$\mu_{\beta, \mathbf{E}, N}(C) = \mu_{\beta, \mathbf{E}, N}(\mathcal{T}_{\mathbf{a}}C), \quad \mathbf{a} \in \Lambda;$$

(b) *Riflessioni*:

$$\mu_{\beta, \mathbf{E}, N}(C) = \mu_{\beta, \mathcal{R}\mathbf{E}, N}(\mathcal{R}C),$$

dove \mathcal{R} è l'operatore di riflessione nella direzione del campo ($\mathcal{R}\mathbf{E} = -\mathbf{E}$);

(c) *“Coniugazione di carica”*:

$$\mu_{\beta, \mathbf{E}, N}(C) = \mu_{\beta, \mathcal{C}\mathbf{E}, |\Lambda| - N}(\mathcal{C}C),$$

dove $\mathcal{C}C$ è la configurazione ottenuta da C scambiando le particelle con le vacanze, $(\mathcal{C}C)(i) = 1 - C(i)$, e $\mathcal{C}\mathbf{E} = -\mathbf{E}$.

Per il modello KLS, il limite termodinamico per la misura stazionaria $\mu_{\beta, \mathbf{E}, N}$ si ottiene mandando $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$, mantenendo contemporaneamente la densità di particelle nel sistema $\rho = n(\Lambda)/|\Lambda|$ costante¹¹.

Nel Capitolo 3 affronteremo l'analisi di una interessante variante del modello KLS che non è stata mai studiata in letteratura: considereremo un sistema in due dimensioni, in cui il limite termodinamico viene effettuato mandando all'infinito solo la lunghezza del reticolo nella dimensione del campo, mentre la dimensione trasversa viene tenuta fissa (il tutto sempre mantenendo costante la densità). L'interesse che presenta un simile modello è che, pur essendo quasi unidimensionale, si osserva la presenza di transizioni di fase, al contrario di quanto accade nei sistemi all'equilibrio.

¹¹Si tenga conto che, nel caso generale, non c'è nessuna dimostrazione rigorosa dell'esistenza di tale limite; gli unici modelli che sono sotto controllo sono quelli in cui non ci siano interazioni al di fuori dell'*hard-core*: in questa situazione si riescono a ottenere diversi risultati esatti, come vedremo nel Capitolo 2.

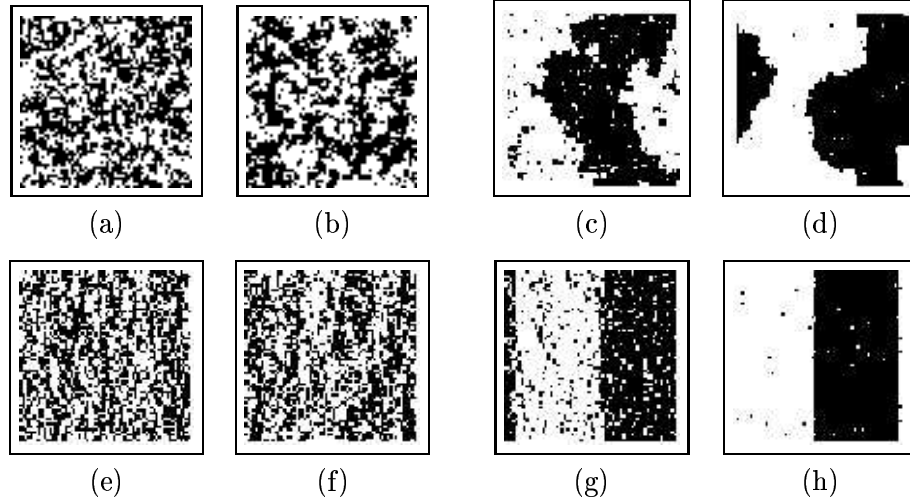


Figura 1.1: Configurazioni “tipiche” per il modello KLS in 2 dimensioni, generate al computer su reticolo 64×64 . Le immagini sono in ordine decrescente di temperatura: (a,b,e,f) $T > T_c(E)$; (c,d,g,h) $T < T_c(E)$. Sopra (a,b,c,d) in assenza di campo esterno ($E = 0$); sotto (e,f,g,h) con un campo esterno saturo ($E = \infty$) nella direzione verticale.

Nel caso in cui il campo \mathbf{E} sia nullo, il modello KLS è un sistema all’equilibrio e lo stato stazionario è la misura di Gibbs $e^{-\mathcal{H}_I}$ su \mathcal{X}_N . Consideriamo il corrispondente sistema di spin, introducendo le variabili locali $\sigma_i = 2n_i - 1$; il vincolo sul numero totale di particelle si traduce nel fissare la magnetizzazione totale: $M = 2N - |\Lambda|$. La misura stazionaria si può anche riscrivere come

$$\mu_{eq} = e^{-\mathcal{H}_I} \delta \left(\sum_{i \in \Lambda} \sigma_i = M \right),$$

che mette in evidenza come la dinamica puramente diffusiva del modello KLS corrisponda a considerare per il sistema di spin all’equilibrio un ensemble canonico, in luogo di quello grancanonico (in cui la magnetizzazione M è coniugata al campo magnetico esterno \mathbf{h}) abitualmente usato per il modello di Ising. In ogni caso, l’equivalenza degli ensemble nel limite termodinamico garantisce che le proprietà termodinamiche del nostro modello per $\mathbf{E} = 0$ coincidono con quelle del corrispondente modello di Ising¹².

¹²Come è noto, l’equivalenza degli ensemble viene a cadere nei punti di transizione di fase, dove i diversi ensemble possono effettivamente descrivere *differenti* stati del sistema (si veda per es. [10]);

Quando, per campo elettrico nullo, la densità del gas è $\rho = N/|\Lambda| = 1/2$ (e dunque la magnetizzazione corrispondente nulla), al variare della temperatura si osserva la transizione di fase (del secondo ordine) del modello di Ising, con temperatura critica $T_c^{(Is)}$: si passa da una fase “gassosa” per $T > T_c^{(Is)}$, in cui la distribuzione delle particelle nel volume è omogenea (cfr. fig. 1.1 (a,b)), a una fase “liquida” per $T < T_c^{(Is)}$, caratterizzata dalla presenza di regioni macroscopiche quasi totalmente piene di particelle (i corrispettivi dei “domini” magnetici) accanto a regioni quasi vuote (cfr fig. 1.1 (c,d)).

La maggior parte delle simulazioni al calcolatore è stata effettuata sul modello in due dimensioni, su cui si concentrerà la nostra attenzione: in questo caso, la temperatura critica per campo nullo $T_c^{(Is)}$ è nota esattamente, dalla famosa soluzione di Onsager ($J/kT_{Ons} = 1/2 \cdot \ln(1 + \sqrt{2}) \sim 0.44$). Uno dei primi risultati ottenuti con le simulazioni Monte Carlo fu che, con l'introduzione del campo elettrico, la transizione di fase continua a manifestarsi (cfr. fig. 1.1 (e,f,g,h)), mantenendo le caratteristiche di fenomeno critico (transizione del secondo ordine). La temperatura della transizione $T_c(E)$ è una funzione dell'intensità del campo; aumenta col crescere di E , fino a saturare al valore $T_c(\infty)$ quando il campo è infinito¹³ (in due dimensioni, $T_c(\infty) \sim 1.4T_{Ons}$).

A differenza di quanto accade nel modello di Ising, per evidenziare la transizione di fase non è possibile prendere come parametro d'ordine il corrispettivo della magnetizzazione, ossia il numero di particelle, poiché esso è costante a causa della dinamica diffusiva del gas reticolare; occorre dunque determinare un'altra osservabile che distingua le diverse fasi. Come abbiamo già notato, la fase di bassa temperatura è caratterizzata dall'insorgere di disomogeneità spaziali nella densità, dovute alla formazione dei domini; queste strutture possono essere evidenziate dallo studio delle componenti di Fourier del campo di densità. Supponiamo che il reticolo abbia lunghezza L_{\parallel} nella direzione del campo, mentre nell'iperpiano $(d-1)$ -dimensionale ortogonale al campo sia ipercubico, di lato L_{\perp} . Data una configurazione del gas, che esprimeremo mediante le variabili di spin, introduciamo la sua trasformata di Fourier:

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\mathbf{j} \in \Lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}} \sigma_{\mathbf{j}}, \quad (1.18)$$

in ogni ensemble, comunque, la transizione avviene ovviamente in corrispondenza degli stessi valori dei parametri.

¹³Dalla definizione delle frequenze di transizione, porre $E = \infty$ significa che i salti in direzione concorde col campo sono sempre effettuati, mentre quelli in direzione opposta sono proibiti.

dove a causa delle condizioni periodiche sono ammessi solo valori discreti per \mathbf{k} , $k^i = (2\pi/L_i)n_i$, con $n_i = 0, \dots, L_i - 1$. Si osservi che, essendo la magnetizzazione globale nulla, $\phi(0) = 0$.

Consideriamo per semplicità il caso $d = 2$; come si vede anche dalla figura 1.1, in presenza di campo elettrico la fase ordinata di bassa temperatura è caratterizzata dalla formazione di due strisce omogenee di magnetizzazione opposta, la cui presenza può essere rilevata osservando il valore assunto da ϕ in corrispondenza del primo vettore d'onda non nullo nella direzione trasversa, che indichiamo con $\mathbf{k}_{1,0} = (2\pi/L_\perp, 0)$ (il campo è nella direzione y). Si potrebbe dunque pensare di prendere $\langle \phi(\mathbf{k}_{1,0}) \rangle$ come parametro d'ordine, ma si ricordi che la misura stazionaria è invariante per traslazioni: la densità media $\langle \sigma_i \rangle$ quindi non dipende da i e direttamente dalla (1.18) segue che $\langle \phi(\mathbf{k}) \rangle = 0$ per ogni \mathbf{k} . Detto in altri termini, data una configurazione del tipo (fig. 1.1 (h)), tutte le configurazioni ottenute da essa per traslazione nella direzione trasversa sono equiprobabili: ciò genera in $\phi(\mathbf{k}_{1,0})$ una fase arbitraria che ne rende nullo il valor medio. Alla luce di ciò, prenderemo come parametro d'ordine $\langle |\phi(\mathbf{k}_{1,0})| \rangle$.

Un'altra quantità di grande interesse è il momento secondo del parametro d'ordine $\langle |\phi(\mathbf{k}_{1,0})|^2 \rangle$, che non è altro che il fattore di struttura statico, trasformata di Fourier della funzione di correlazione trasversa:

$$\langle |\phi(\mathbf{k}_{1,0})|^2 \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \Lambda} e^{i\mathbf{k}_{1,0} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})} \langle \sigma_{\mathbf{i}} \sigma_{\mathbf{j}} \rangle; \quad (1.19)$$

Nel seguito avremo modo di tornare più approfonditamente sul significato del fattore di struttura.

1.3 Correlazioni e fluttuazioni

In questa sezione affronteremo lo studio delle correlazioni nello stato stazionario per i sistemi di particelle su reticolo. Si partirà con l'analisi dei sistemi all'equilibrio termodinamico, per passare poi ai sistemi fuori dall'equilibrio, in cui si evidenziano nuove e significative proprietà, prima fra tutte la presenza di correlazioni a lungo raggio (decadimento algebrico della funzione a due punti) per valori generici dei parametri, anche lontano dalla regione critica: questa costituisce la manifestazione macroscopica di una violazione della condizione di bilancio dettagliato a livello microscopico.

Richiamiamo preliminarmente alcune definizioni. Assegnato un generico sistema statistico di particelle su reticolo invariante per traslazioni, in cui la densità media sia $\langle \eta_t(\mathbf{i}) \rangle = \rho$, si definisce la *funzione di correlazione a due punti per la densità*:

$$G(\mathbf{i} - \mathbf{j}, t - s) \equiv \langle (\eta_t(\mathbf{i}) - \rho)(\eta_s(\mathbf{j}) - \rho) \rangle = \langle \eta_t(\mathbf{i})\eta_s(\mathbf{j}) \rangle - \rho^2. \quad (1.20)$$

E' appena il caso di sottolineare l'importanza che riveste questa quantità. La dipendenza funzionale dalla differenza dei suoi argomenti è dovuta naturalmente all'invarianza per traslazioni; nel caso in cui il sistema sia all'equilibrio, e dunque ci sia invarianza anche per inversione temporale, vale inoltre la relazione $G(\mathbf{i}, t) = G(\mathbf{i}, -t)$. Un'altra quantità di fondamentale interesse è la trasformata di Fourier spaziale di $G(\mathbf{i}, t)$, denominata *fattore di struttura*:

$$S(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}} G(\mathbf{i}, t) = \frac{1}{|\Lambda|} \langle \phi(\mathbf{k}, t) \phi(\mathbf{k}, 0)^* \rangle, \quad (1.21)$$

dove è stata introdotta la trasformata di Fourier per la fluttuazione della densità dal suo valor medio,

$$\phi(\mathbf{k}, t) \equiv \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}} (\eta_t(\mathbf{i}) - \rho).$$

[Per la seconda uguaglianza della (1.21), si osservi che

$$S(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})} G(\mathbf{i} - \mathbf{j}, t) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \Lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})} G(\mathbf{i} - \mathbf{j}, t)$$

e si applichi la definizione (1.20).]

L'importanza fisica del fattore di struttura per sistemi all'equilibrio risiede nel fatto che esso, insieme alla sua trasformata di Fourier temporale, può essere direttamente misurato in esperimenti di scattering elastico e inelastico.

1.3.1 Fluttuazioni all'equilibrio

In questo paragrafo analizzeremo le correlazioni nei sistemi all'equilibrio. Essendo interessati allo studio delle *fluttuazioni*, adoteremo come misura di equilibrio quella grancanonica¹⁴, in cui il numero totale di particelle può variare ed è accoppiato al potenziale chimico ν , che ne fissa il valor medio $\langle N \rangle_{(\nu)}$ o equivalentemente la densità $\rho(\nu) = \langle N \rangle_{(\nu)} / |\Lambda|$. Da un punto di vista dinamico, l'evoluzione sarà ancora puramente diffusiva e saranno dunque le condizioni al bordo che permetteranno al numero

¹⁴Si ricordi che i diversi ensemble danno gli stessi risultati per i valori medi delle osservabili, ma differiscono per quanto riguarda le fluttuazioni.

di particelle di variare; le frequenze di transizione dovranno essere scelte in modo da soddisfare il bilancio dettagliato rispetto alla misura $e^{-\beta\tilde{\mathcal{H}}}$, con $\tilde{\mathcal{H}} \equiv \mathcal{H} - \nu N$.

La proprietà fondamentale di cui gode la funzione a due punti di un sistema all'equilibrio è di avere un decadimento spaziale di tipo esponenziale (per valori dei parametri che non corrispondano a transizioni di fase); più precisamente, esistono costanti positive $c_1(t)$, $c_2(t)$ tali che nel limite termodinamico¹⁵

$$|G(\mathbf{i}, t)| \leq c_1(t)e^{-c_2(t)\mathbf{i}}. \quad (1.22)$$

Si osservi che questa proprietà di rapido decadimento garantisce, per i sistemi all'equilibrio, l'analiticità del fattore di struttura; questa non è un'osservazione di carattere formale: avremo modo di discutere le drastiche conseguenze che produce nei sistemi fuori dall'equilibrio una discontinuità del fattore di struttura, quando la condizione (1.22) verrà a cadere. Notiamo che, essendo ben definito il fattore di struttura nel limite termodinamico, dalla (1.21) segue che le fluttuazioni scalano come $|\Lambda|^{1/2}$.

Per quanto riguarda invece il decadimento temporale dell'autocorrelazione $G(\mathbf{0}, t)$, vale la seguente significativa stima, di carattere opposto alla precedente:

$$|G(\mathbf{0}, t)| \geq ct^{-d/2}, \quad (1.23)$$

e dunque questo decadimento *non* è esponenziale. Per una dimostrazione di queste proprietà e per una enunciazione precisa delle ipotesi che ne sono alla base, si veda per esempio [11].

Questa “lunga coda” della funzione di autocorrelazione è da imputarsi alla natura diffusiva della dinamica (se avessimo scelto una dinamica di *spin-flip*, avremmo trovato un decadimento esponenziale); la questione si comprende meglio riscrivendo la definizione di G nella forma

$$G(\mathbf{i}, t) = \langle (\eta_t(\mathbf{i}) - \rho)\eta_0(\mathbf{0}) \rangle = \langle \eta_t(\mathbf{i}) - \rho \rangle_{\eta_0(\mathbf{0})=1},$$

da cui si vede che la funzione di correlazione misura le deviazioni dallo stato stazionario indotte dal porre al tempo 0 una particella nell'origine ($\langle \cdot \rangle_A$ indica l'aspettazione condizionata al verificarsi dell'evento A). A causa della natura conservativa della dinamica, ci si aspetta che questa perturbazione locale dell'equilibrio scompaia diffusivamente: $G(\mathbf{i}, t)$ deve quindi poter essere descritta dalla soluzione fondamentale

¹⁵Per un reticolo *finito* la (1.22) è sempre banalmente verificata (si tenga conto che $G(\mathbf{i}, t)$ è finita, per la disuguaglianza di Schwartz: $|G(\mathbf{i}, t)| \leq \langle (\eta(\mathbf{i}) - \rho)^2 \rangle = \rho(1 - \rho)$).

dell'equazione di diffusione, almeno per grandi $|\mathbf{i}|$ e t :

$$G(\mathbf{i}, t) \approx \chi (4\pi|t|)^{-d/2} (\det \mathbb{D})^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{4|t|} (\mathbf{i} \cdot \mathbb{D}^{-1} \mathbf{i}) \right], \quad (1.24)$$

dove \mathbb{D} è una matrice $d \times d$ definita positiva, detta *tensore di diffusione*. Il fattore χ che compare nella formula è la *compressibilità statica*, definita come

$$\chi \equiv -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \nu}.$$

Si noti che è esattamente l'analogo della suscettività per i sistemi di spin: il numero di particelle N è coniugato al potenziale chimico ν così come la magnetizzazione M è coniugata al campo magnetico \mathbf{h} . È stato inserito χ come prefattore nella (1.24) affinché venga rispettata la seguente regola di somma:

$$\sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} G(\mathbf{i}, t) = S(\mathbf{0}, t) = \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} G(\mathbf{i}, 0) = S(\mathbf{0}, 0) = \chi, \quad (1.25)$$

la cui validità si dimostra in modo analogo a quella per la suscettività magnetica¹⁶.

Si noti che nella (1.24) il tempo scala come il quadrato dello spazio: $t \sim |\mathbf{i}|^2$, come ci si aspetta da un fenomeno di diffusione; inoltre il decadimento temporale dell'autocorrelazione rispetta la (1.23). Dalla (1.24) si può ricavare il corrispondente andamento asintotico per il fattore di struttura:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(\epsilon \mathbf{k}, \epsilon^{-2} t) = \chi \exp [-(\mathbf{k} \cdot \mathbb{D} \mathbf{k}) |t|]. \quad (1.26)$$

Sia la compressibilità χ , sia il tensore di diffusione \mathbb{D} sono funzione del potenziale chimico ν che compare nella misura grancanonica, ossia sono funzioni della densità media ρ del sistema. Il fascino della (1.26) risiede nella sua generalità: nel limite idrodinamico di piccoli vettori d'onda (grandi distanze) e grandi tempi, il fattore di struttura diventa funzione solo di $|\mathbf{k}|^2 t$: tutti i dettagli microscopici del sistema sono riassunti, in questo limite, nella compressibilità e nel tensore di diffusione. Al di fuori del limite idrodinamico, il fattore di struttura dipende dai dettagli microscopici del sistema, e non ci si aspetta nessuna particolare forma di scala.

¹⁶Direttamente dalla forma della misura stazionaria di Gibbs, a ogni istante t si ha che

$$\langle N \rangle \equiv \frac{\text{Tr}(N e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}(\eta)})}{Z} = \frac{|\Lambda| \text{Tr}(\eta(\mathbf{0}) e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}(\eta)})}{Z},$$

dove $Z \equiv \text{Tr}(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}(\eta)})$, $N = \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} \eta(\mathbf{i})$; si ricava dunque

$$\frac{1}{|\Lambda|} \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \nu} = \frac{-Z/\beta \sum_{\mathbf{i}} \text{Tr}(\eta(\mathbf{i}) \eta(\mathbf{0}) e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}) + |\Lambda|/\beta \cdot [\text{Tr}(\eta(\mathbf{0}) e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}})]^2}{Z^2} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} \langle (\eta(\mathbf{i}) - \rho)(\eta(\mathbf{0}) - \rho) \rangle.$$

Fluttuazioni statiche all'equilibrio

Analizziamo ora più in dettaglio il comportamento delle fluttuazioni della densità. All'equilibrio queste fluttuazioni sono piccole, ossia la grandezza

$$\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} (\eta(\mathbf{i}) - \rho)$$

è tipicamente di ordine $|\Lambda|^{-1/2}$, è già stato notato; su questa scala, per il teorema del limite centrale, quando $|\Lambda|$ è sufficientemente grande le fluttuazioni sono approssimativamente gaussiane.

Per una formulazione più precisa del problema nel limite termodinamico, è di grande utilità passare a una descrizione di carattere *mesoscopico*, introducendo un campo di densità che descrive il sistema a una scala intermedia, ottenuto mediando i dettagli microscopici. Per fare questo, è necessario però “smussare” la funzione caratteristica del volume $|\Lambda|$, sostituendola con una funzione test $\phi(\mathbf{i}) : \mathbb{Z}^d \mapsto \mathbb{R}$, differenziabile e a decrescenza rapida; una dilatazione del volume Λ di un fattore α corrisponde a una contrazione dell'argomento della funzione test, corrisponde cioè a passare da $\phi(\mathbf{i})$ a $\phi(\alpha^{-1}\mathbf{i})$.

Definiamo dunque il campo di densità n^ϵ

$$n^\epsilon(\phi) = \epsilon^d \sum_{\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d} \phi(\epsilon\mathbf{i}) \eta(\mathbf{i}) \quad \left(\equiv \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) n^\epsilon(\mathbf{x}) \right) \quad (1.27)$$

e la sua fluttuazione ξ^ϵ

$$\xi^\epsilon(\phi) = \epsilon^{d/2} \sum_{\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d} \phi(\epsilon\mathbf{i}) (\eta(\mathbf{i}) - \rho) \quad \left(\equiv \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \xi^\epsilon(\mathbf{x}) \right). \quad (1.28)$$

I campi $n^\epsilon(\phi)$ e $\xi^\epsilon(\phi)$ rappresentano la densità di particelle e la sua fluttuazione nel “volume” $\phi(\epsilon\mathbf{i})$, ossia $\epsilon^{-1}\Lambda$; come indicato nelle parentesi, essi possono essere anche pensate come funzioni, o meglio distribuzioni, definite su \mathbb{R}^d . I prefattori ϵ^d , $\epsilon^{d/2}$ sono stati scelti in modo che i campi risultino ben definiti, nel limite termodinamico $\epsilon \rightarrow 0$. In effetti, se si suppone per semplicità che la ϕ che campiona il volume iniziale abbia integrale unitario, il volume del sistema scalato di ϵ^{-1} risulta proprio $\sum_{\mathbf{i}} \phi(\epsilon\mathbf{i}) \approx \int \phi(\epsilon\mathbf{x}) d^d \mathbf{x} = \epsilon^{-d}$; dunque, nella (1.27) abbiamo diviso il numero di particelle per il volume, mentre nella (1.28) le fluttuazioni sono state divise per la radice del volume, essendo queste di ordine $|\Lambda|^{1/2}$.

Per la legge forte dei grandi numeri, si ha che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Prob} \left[\left| n^\epsilon(\phi) - \rho \int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \right| > \delta \right] = 0, \quad (1.29)$$

per ogni $\delta > 0$ e per ogni ϕ . Il corrispondente limite per la covarianza di ξ^ϵ (la media è nulla per definizione) dà:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \xi^\epsilon(\phi) \xi^\epsilon(\psi) \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^d \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \mathbb{Z}^d} \phi(\epsilon \mathbf{i}) \psi(\epsilon \mathbf{j}) \langle (\eta(\mathbf{i}) - \rho)(\eta(\mathbf{j}) - \rho) \rangle = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{[-\pi/\epsilon, \pi/\epsilon]^d} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \hat{\phi}(\mathbf{k})^* \hat{\psi}(\mathbf{k}) S(\epsilon \mathbf{k}) = \\ &= \chi \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \hat{\phi}(\mathbf{k})^* \hat{\psi}(\mathbf{k}) = \chi \int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (1.30)$$

dove nella seconda uguaglianza è stata usata l'inversa della (1.21) ed è stata introdotta la trasformata di Fourier $\hat{\phi}(\mathbf{k}) \equiv \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) \approx \epsilon^d \sum_{\mathbf{i}} e^{i\mathbf{k} \cdot \epsilon \mathbf{i}} \phi(\epsilon \mathbf{i})$.

Dalla (1.30) segue che nel limite termodinamico le fluttuazioni della densità sono essenzialmente indipendenti per regioni distanti: per $\epsilon \rightarrow 0$ la correlazione delle fluttuazioni in due volumi disgiunti ϕ , ψ si annulla. Dato che in questo limite le fluttuazioni hanno distribuzione gaussiana, si può scrivere che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \xi^\epsilon(\phi) = \xi(\phi)$$

dove $\xi(\phi)$ è un rumore bianco gaussiano, a media nulla e di covarianza

$$\langle \xi(\phi) \xi(\psi) \rangle = \chi \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}),$$

ossia

$$\langle \xi(\mathbf{x}) \xi(\mathbf{y}) \rangle = \chi \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (1.31)$$

La compressibilità statica χ , grandezza legata alle proprietà di risposta del sistema a sollecitazioni esterne, fornisce dunque una misura delle fluttuazioni della densità: questo è un esempio delle relazioni di fluttuazione-dissipazione, su cui avremo modo di tornare a breve.

Il regime dinamico

Cerchiamo ora di estendere la precedente trattazione alle fluttuazioni dinamiche. Siamo interessati al comportamento nel limite termodinamico, in cui si prendono in considerazione regioni spaziali sempre più grandi: il limite di scala appropriato per includere in questo schema il tempo appare quello diffusivo, suggerito dalla (1.24). Definiamo dunque il campo di densità dinamico come

$$n_t^\epsilon(\phi) = \epsilon^d \sum_{\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d} \phi(\epsilon \mathbf{i}) \eta_{\epsilon^{-2}t}(\mathbf{i})$$

e la sua fluttuazione come

$$\xi_t^\epsilon(\phi) = \epsilon^{d/2} \sum_{\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d} \phi(\epsilon \mathbf{i}) (\eta_{\epsilon^{-2}t}(\mathbf{i}) - \rho).$$

Come per il caso statico, si può anche pensare ai campi come “funzioni” $n_t^\epsilon(\mathbf{x})$, $\xi_t^\epsilon(\mathbf{x})$ definite su \mathbb{R}^d . Grazie alla stazionarietà del processo, si ha un esatto analogo della (1.29), ossia

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Prob} \left[\left| n_t^\epsilon(\phi) - \rho \int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \right| > \delta \right] = 0, \quad (1.32)$$

per ogni $\delta > 0$, mentre il limite per le covarianze si scrive

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \xi_t^\epsilon(\phi) \xi_s^\epsilon(\psi) \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^d \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \mathbb{Z}^d} \phi(\epsilon \mathbf{i}) \psi(\epsilon \mathbf{j}) \langle (\eta_{\epsilon^{-2}t}(\mathbf{i}) - \rho) (\eta_{\epsilon^{-2}s}(\mathbf{j}) - \rho) \rangle = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{[-\pi/\epsilon, \pi/\epsilon]^d} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \hat{\phi}(\mathbf{k})^* \hat{\psi}(\mathbf{k}) S(\epsilon \mathbf{k}, \epsilon^{-2}(t-s)). \end{aligned} \quad (1.33)$$

Se è valido il limite di scala (1.26) per il fattore di struttura, dalla (1.33) possiamo congetturare che valga per ξ_t^ϵ una generalizzazione di quello che è il limite per ξ^ϵ nel caso statico:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \xi_t^\epsilon(\phi) = \xi_t(\phi),$$

dove $\xi_t(\phi)$ è un campo stocastico gaussiano, con media nulla e covarianza:

$$\langle \xi_t(\phi) \xi_s(\psi) \rangle = \chi \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \hat{\phi}(\mathbf{k})^* \hat{\psi}(\mathbf{k}) \exp[-(\mathbf{k} \cdot \mathbb{D} \mathbf{k})|t-s|]. \quad (1.34)$$

Pensando il campo come una funzione $\xi_t(\mathbf{x})$, $\xi_t(\phi) \equiv \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \xi_t(\mathbf{x})$, la covarianza si riscrive nella significativa forma

$$\langle \xi_t(\mathbf{x}) \xi_s(\mathbf{y}) \rangle = \chi (4\pi|t-s|)^{-d/2} (\det \mathbb{D})^{-1/2} \exp \left[-\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbb{D}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{x})}{4|t-s|} \right], \quad (1.35)$$

si confronti con la (1.24). Questa espressione è molto importante, perché mostra come la dinamica delle fluttuazioni possa essere descritta da una equazione lineare di Langevin per il campo $\xi_t(\mathbf{x})$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \xi_t(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \mathbb{D}(\rho) \nabla \xi_t(\mathbf{x}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_t(\mathbf{x}), \quad (1.36)$$

dove la corrente $\mathbf{J}_t(\mathbf{x})$ è un rumore bianco gaussiano, a media nulla e di covarianza

$$\langle J_{t,i}(\mathbf{x}) J_{t,j}(\mathbf{y}) \rangle = \mathbb{N}(\rho)_{ij} \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta^d(t-s), \quad (1.37)$$

con

$$\mathbb{N}(\rho) = 2 \chi(\rho) \mathbb{D}(\rho). \quad (1.38)$$

Il risultato che abbiamo ottenuto è di fondamentale importanza: se è vero il limite di scala (1.24), allora il comportamento dinamico delle fluttuazioni attorno allo stato stazionario, descritte dal campo $\xi_t(\mathbf{x})$, ha per un gas reticolare all'equilibrio termodinamico una forma universale, dettata dall'equazione di Langevin (1.36); si tratta di un'equazione differenziale stocastica alle derivate parziali, nella forma di un'equazione di continuità per $\xi_t(\mathbf{x})$, in cui la corrente consta di un contributo deterministico legato al gradiente del campo e di un contributo stocastico $\mathbf{J}_t(\mathbf{x})$.

Le informazioni fisiche sul sistema entrano in questa equazione solo tramite le grandezze $\chi(\rho)$ e $\mathbb{D}(\rho)$ (è stata messa in evidenza la dipendenza dalla densità media ρ del gas). Ai fini dello studio delle fluttuazioni, dunque, tutti i dettagli microscopici del sistema sono riassunti nella compressibilità, che è una misura delle fluttuazioni statiche, e dal tensore di diffusione, che fornisce una scala temporale tipica per il rilassamento verso l'equilibrio.

Degna di nota è la relazione (1.38), espressione del *teorema di fluttuazione-dissipazione* (TFD): questo teorema costituisce una delle proprietà fondamentali dei sistemi all'equilibrio termodinamico e mette in relazione la funzione di correlazione a due punti nello stato stazionario con la funzione di risposta del sistema a perturbazioni esterne (per una discussione, si veda per esempio [12]). Nel nostro contesto il teorema è importante perché fornisce un legame tra \mathbb{N} , grandezza che caratterizza le fluttuazioni, e le quantità macroscopiche χ e \mathbb{D} , più facilmente accessibili da un punto di vista sia teorico sia sperimentale.

Come vedremo, la relazione (1.38) viene a cadere per i sistemi fuori dall'equilibrio, e ciò è alla base delle nuove, peculiari proprietà che questi sistemi manifestano.

1.3.2 Fluttuazioni fuori dall'equilibrio

Quando il gas reticolare viene accoppiato a un campo esterno che lo porta fuori dall'equilibrio termodinamico, la situazione si complica: attualmente non si dispone di una teoria delle fluttuazioni analoga a quella che abbiamo appena esposto per i sistemi all'equilibrio.

Chiariamo meglio la questione. Non è difficile immaginare generalizzazioni della precedente costruzione per il gas reticolare forzato, che in alcuni casi conducono a previsioni corrette (per esempio, si può considerare un'equazione di Langevin analo-

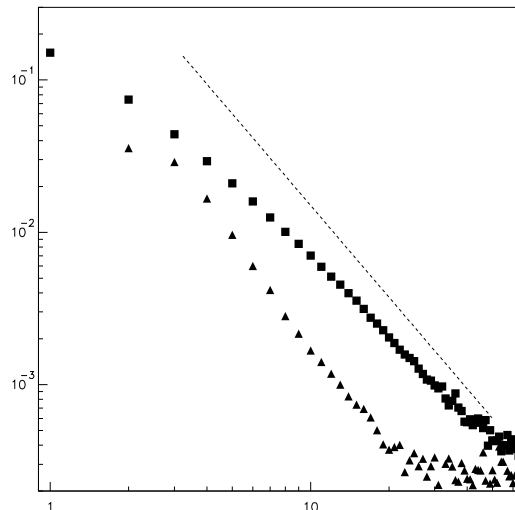


Figura 1.2: Funzione a due punti per il modello KLS su reticolo bidimensionale 128×128 . Sono riportati i valori di: $G(\mathbf{x})$ per $\mathbf{x} \parallel \mathbf{E}$ (■); $-G(\mathbf{x})$ per $\mathbf{x} \perp \mathbf{E}$ (▲). Si noti che le correlazioni trasverse sono negative; la linea ha pendenza -2 . (da [42])

ga alla (1.36), integrando la corrente di un ulteriore contributo dovuto all'azione del campo elettrico). Il fatto è che, per derivare un'equazione stocastica che descriva l'evoluzione su scala mesoscopica a partire dalla dinamica microscopica che definisce il modello, si è costretti a fare alcune assunzioni sulle proprietà della misura stazionaria del sistema; purtroppo per i sistemi fuori dall'equilibrio questa misura non è nota a priori e di conseguenza tali proprietà non sono in generale verificabili (e talvolta sembrano non essere verificate). Ancora una volta, le difficoltà che sorgono nell'analisi dei sistemi fuori dall'equilibrio hanno la loro radice nell'ignoranza dello stato stazionario.

Informazioni sulle funzioni di correlazione possono essere ricavate innanzitutto mediante simulazioni Monte Carlo al computer; si è così formato nel corso degli anni un quadro delle proprietà dei sistemi fuori dall'equilibrio.

La caratteristica più importante che emerge chiaramente (cfr. figura 1.2) è, come già accennato, la natura *algebraica* del decadimento spaziale per funzione di correlazione a due punti, caratteristica questa comune a diversi sistemi fuori dall'e-

equilibrio (*Lattice Gas Automata*, materiali granulari, modelli di Landau-Ginzburg generalizzati) e non solo al DLG. Per il gas reticolare, l'andamento della funzione a due punti a tempi uguali è della forma

$$G(\mathbf{x}, 0) \approx |\mathbf{x}|^{-d}, \quad (1.39)$$

mentre per altri sistemi l'esponente non coincide necessariamente con la dimensione dello spazio.

Un'altra proprietà del gas reticolare forzato è che $G(\mathbf{x}, t)$ non è definita positiva; questo è dovuto semplicemente alla natura diffusiva della dinamica, che conserva il numero di particelle. A causa di ciò, come è stato notato in calce alla (1.19), $\phi(\mathbf{0}, t) = 0$; usando la (1.21) si ha che

$$\sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} G(\mathbf{x}, t) = S(\mathbf{0}, t) = \frac{1}{|\Lambda|} \langle \phi(\mathbf{0}, t) \phi(\mathbf{0}, 0)^* \rangle = 0. \quad (1.40)$$

Il senso di ciò è chiaro, ricordando che $G(\mathbf{x}, t)$ misura lo scostamento dalla densità media nel punto \mathbf{x} indotto dal porre al tempo 0 una particella nell'origine (Paragrafo 1.3.1): dovendo il numero totale di particelle essere costante, l'aumento della densità in una regione deve essere accompagnato da una corrispondente diminuzione in un'altra regione, in modo che la regola di somma (1.40) sia rispettata.

Nel prossimo paragrafo mostreremo come l'andamento (1.39) possa essere derivato da un'analisi di carattere mesoscopico, partendo da una modifica dell'equazione di Langevin (1.36) che tenga conto del campo esterno.

Il lento decadimento della funzione a due punti ha conseguenze drastiche sulle proprietà delle fluttuazioni fuori dall'equilibrio.

Per i sistemi all'equilibrio, un ruolo importante è giocato dalla compressibilità statica $\chi = S(\mathbf{0}, t) = S(\mathbf{0}, 0)$, e si vorrebbe definirne un analogo fuori dall'equilibrio; abbiamo visto che per il gas reticolare $S(\mathbf{0}, t) = 0$, ma questo dato di per sé non è interessante, dal momento che nelle derivazioni (1.30-1.33) compare il *limite* di $S(\mathbf{k})$ per $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

Saremmo tentati di definire la compressibilità come tale limite, ma occorre cautela: infatti il decadimento algebrico (1.39) comporta una discontinuità del fattore di struttura nel limite di impulsi che tendono a zero. Definiamo dunque

$$\chi(\rho, \hat{\mathbf{k}}) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(\epsilon \hat{\mathbf{k}}, 0). \quad (1.41)$$

La definizione (1.28) del campo delle fluttuazioni ξ^ϵ si applica senza modifiche al gas reticolare forzato. Possiamo effettuare il corrispettivo del calcolo (1.30) per la covarianza di x_i^ϵ nel limite termodinamico $\epsilon \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \xi^\epsilon(\phi) \xi^\epsilon(\psi) \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^d \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \mathbb{Z}^d} \phi(\epsilon \mathbf{i}) \psi(\epsilon \mathbf{j}) \langle (\eta(\mathbf{i}) - \rho)(\eta(\mathbf{j}) - \rho) \rangle = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{[-\pi/\epsilon, \pi/\epsilon]^d} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \hat{\phi}(\mathbf{k})^* \hat{\psi}(\mathbf{k}) S(\epsilon \mathbf{k}) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \hat{\phi}(\mathbf{k})^* \hat{\psi}(\mathbf{k}) \chi(\rho, \hat{\mathbf{k}}) \equiv K_{\phi, \psi}. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Per evidenziare le differenze rispetto al caso all'equilibrio, consideriamo un volume iniziale unitario Λ , campionato dalla funzione caratteristica $\phi(\mathbf{x})$, per cui $\int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) = \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x})^2 = 1$, e dilatiamo il volume. In un sistema all'equilibrio, grazie alla (1.30), l'intensità $\mathcal{I} \sim |\Lambda|^{1/2} \sqrt{\langle \xi(\phi)^2 \rangle}$ delle fluttuazioni di densità nel volume Λ , nel limite di $|\Lambda|$ grande, è data da

$$\mathcal{I}_{eq} \sim |\Lambda|^{1/2} \sqrt{\chi(\rho)}; \quad (1.43)$$

per un sistema fuori dall'equilibrio, invece, la (1.42) dà

$$\mathcal{I}_{DLG} \sim |\Lambda|^{1/2} \sqrt{\int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} |\hat{\phi}(\mathbf{k})|^2 \chi(\rho, \hat{\mathbf{k}})} = |\Lambda|^{1/2} \sqrt{\mathcal{K}_\phi}, \quad (1.44)$$

con $\mathcal{K}_\phi \equiv K_{\phi, \phi}$.

Il contenuto di questa formula è estremamente significativo. L'intensità delle fluttuazioni in una regione Λ non è funzione solo del volume $|\Lambda|$: essa dipende in modo non banale da $\phi(\mathbf{x})$, ossia dalla forma di Λ . Ci troviamo dunque di fronte a un fenomeno significativo: la termodinamica di un sistema può dipendere esplicitamente dalla forma del contenitore. Comportamenti analoghi si osservano nello studio dei sistemi ferromagnetici con interazioni dipolari; in questo caso però il decadimento algebrico della funzione a due punti non è un fenomeno sorprendente, dal momento che già a livello microscopico l'Hamiltoniana del sistema presenta interazioni a lungo raggio.

Questo scenario induce a credere che la misura stazionaria abbia una dipendenza anomala dalle condizioni al bordo, al contrario di quanto accade per i sistemi all'equilibrio; in particolare, la misura sul volume infinito potrebbe non essere una misura di Gibbs.

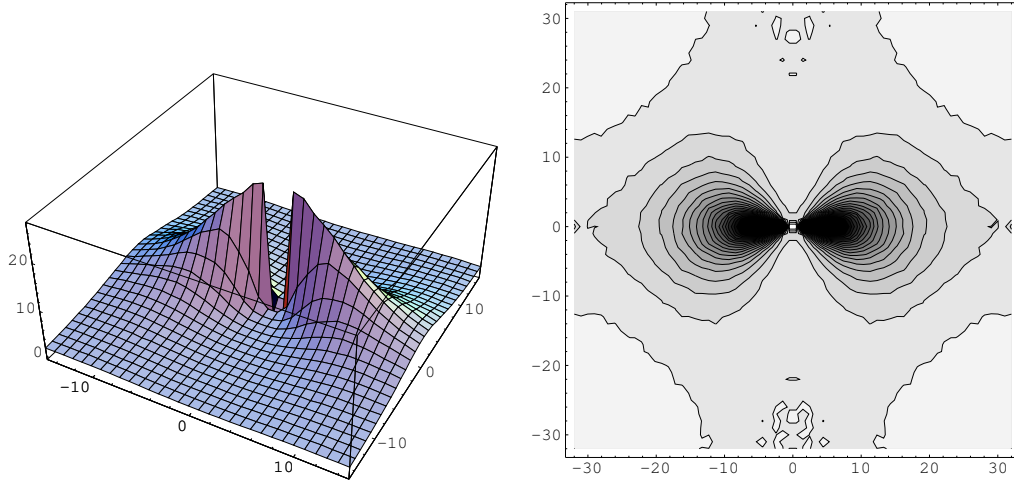


Figura 1.3: Fattore di struttura per il modello KLS su reticolo bidimensionale 128×128 . A sinistra è riportata la superficie e a destra le curve di livello della funzione $S(\mathbf{k})$; sugli assi dei grafici sono riportati i numeri d'onda $\mathbf{n} = (n_{\parallel}, n_{\perp})$: $k_{\parallel} = 2\pi n_{\parallel}/L_{\parallel}$, dove L_{\parallel} è la dimensione del reticolo nella direzione del campo, e analogamente per la direzione trasversa. (da [42])

Riportiamo in figura 1.3 il grafico del fattore di struttura statico per il modello KLS, ottenuto mediante simulazioni Monte Carlo: la discontinuità per $\mathbf{k} = 0$ è evidente.

1.3.3 Correlazioni a lungo raggio per il modello KLS

In questa sezione mostreremo come il decadimento algebrico della funzione a due punti per il gas reticolare forzato sia conseguenza diretta di una violazione del teorema di fluttuazione-dissipazione.

L'analisi sarà condotta a partire da un'equazione di Langevin che descriva l'evoluzione temporale del campo di densità $\rho(\mathbf{x}, t)$ su scala mesoscopica. Come si è già detto, non si dispone di metodi che permettano di derivare tale equazione direttamente dalla dinamica microscopica; la forma dell'equazione sarà quindi determinata da considerazioni fisiche, sfruttando tutte le informazioni che derivano dalle simmetrie del modello. A causa della conservazione del numero di particelle, l'equazione differenziale per il campo di densità avrà la forma di un'equazione di continuità, $\partial_t \rho = -\nabla \cdot \mathbf{J}$, dove la corrente \mathbf{J} sarà composta di un contributo deterministico e di un rumore stocastico.

Consideriamo innanzitutto il modello di Ising all'equilibrio termodinamico, con dinamica diffusiva e con densità $1/2$. In questo caso la forma standard per la corrente deterministica è $\mathbf{J}^{(0)} = -\lambda \nabla \nu$, dove λ è il coefficiente di trasporto (il sistema è isotropo) e ν è il potenziale chimico; entrambe queste grandezze in generale sono funzioni di ρ . Se studiamo il sistema vicino all'equilibrio, possiamo assumere che λ non dipenda da ρ e possiamo porre $\nu = \delta \mathcal{H} / \delta \rho$, dove \mathcal{H} è l'Hamiltoniana mesoscopica.

Introducendo la magnetizzazione $\phi(\mathbf{x}, t) \equiv 2\rho(\mathbf{x}, t) - 1$ e sfruttando l'invarianza del sistema per traslazioni, rotazioni e "coniugazione di carica" (definita a pag. 20), si è condotti all'Hamiltoniana di Landau-Ginzburg:

$$\mathcal{H}_{LG}[\phi] = \int d^d \mathbf{x} \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} \tau \phi^2 + \frac{u}{4!} \phi^4 \right\}, \quad (1.45)$$

dove $\tau \propto (T - T_c)$ misura la distanza dal punto critico; l'equazione del moto per $\phi(\mathbf{x}, t)$ è dunque

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left\{ \lambda \nabla \frac{\delta \mathcal{H}_{LG}}{\delta \phi} + \zeta(\mathbf{x}, t) \right\}. \quad (1.46)$$

Supporremo che il rumore $\zeta(\mathbf{x}, t)$ abbia distribuzione gaussiana, con media nulla e covarianza

$$\langle \zeta(\mathbf{x}, t) \zeta(\mathbf{y}, s) \rangle = \mathbb{N}_{ij} \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta(t - s), \quad (1.47)$$

dove, essendo il sistema vicino all'equilibrio, la matrice \mathbb{N} deve essere scelta in modo da soddisfare il teorema di fluttuazione-dissipazione, ossia

$$\mathbb{N}_{ij} = 2\lambda kT \delta_{ij} : \quad (1.48)$$

questo garantisce che la misura stazionaria è data da $e^{-\beta \mathcal{H}_{LG}}$.

Estendiamo ora questa costruzione al gas reticolare forzato. È ragionevole supporre che l'introduzione del campo esterno generi un ulteriore contributo deterministico $\mathbf{J}^{(E)}$ nella corrente:

$$\mathbf{J}_{det} = \mathbf{J}^{(0)} + \mathbf{J}^{(E)}, \quad \mathbf{J}^{(E)} = \sigma(\rho) \mathbf{E}$$

in cui ci siamo limitati ai termini lineari in \mathbf{E} . Per l'invarianza sotto coniugazione di carica, $\sigma(\rho)$ deve essere invariante sotto $\rho \rightarrow (1 - \rho)$, e deve inoltre annullarsi se non ci sono particelle ($\rho = 0$): la scelta più semplice è $\sigma(\rho) = \rho(1 - \rho)$. Porremo dunque

$$\mathbf{J}^{(E)} = \rho(1 - \rho) \mathbf{E} = (1 - \phi^2) \mathbf{E}.$$

Si potrebbe pensare di limitarsi a questa modifica. Si consideri tuttavia che l'Hamiltoniana (1.45) è invariante per rotazioni: è difficile credere che, partendo da

una dinamica fortemente anisotropa quale è quella del DLG, il processo di *coarse-graining* possa produrre una simile Hamiltoniana. Appare dunque ragionevole considerare una variante dell'Hamiltoniana \mathcal{H}_{LG} , in cui gli accoppiamenti associati alle derivate in direzione del campo sono differenti da quelli per le derivate nelle direzioni trasverse. Siamo condotti in questo modo alla seguente equazione di Langevin:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{x}, t) = & \lambda \left\{ (\tau_{\perp} - \alpha_{\perp} \nabla_{\perp}^2) \nabla_{\perp}^2 \phi + (\tau_{\parallel} - \alpha_{\parallel} \nabla_{\parallel}^2) \nabla_{\parallel}^2 \phi - 2\alpha_{\times} \nabla_{\parallel}^2 \nabla_{\perp}^2 \phi \right. \\ & \left. + \frac{u}{3!} (\nabla_{\perp}^2 \phi^3 + \kappa \nabla_{\parallel}^2 \phi^3) + \mathcal{E} \nabla_{\parallel} \phi^2 \right\} + (\nabla \cdot \zeta), \end{aligned} \quad (1.49)$$

con ovvie notazioni. Questa volta la matrice \mathbb{N} che entra nella covarianza del rumore ζ non è isotropa:

$$\mathbb{N}_{\parallel} = n_{\parallel} \quad \mathbb{N}_{\perp} = n_{\perp}, \quad (1.50)$$

dove con \mathbb{N}_{\parallel} (risp. \mathbb{N}_{\perp}) si indica la proiezione di \mathbb{N} nella direzione parallela (risp. nel sottospazio perpendicolare) al campo. Si osservi che la matrice di diffusione \mathbb{D} in questa equazione (definita da $\partial_t \phi = 1/2 \nabla_i \mathbb{D}_{ij} \nabla_j \phi + \dots$) è data da

$$\mathbb{D}_{\parallel} = \lambda \tau_{\parallel} \quad \mathbb{D}_{\perp} = \lambda \tau_{\perp}. \quad (1.51)$$

Se vogliamo che le equazioni (1.49-1.51) descrivano un vero sistema fuori dall'equilibrio e non semplicemente un sistema all'equilibrio con costanti di accoppiamento anisotrope, dovremo in generale aspettarci una violazione del teorema di fluttuazione-dissipazione¹⁷, per cui

$$\frac{\tau_{\perp}}{\tau_{\parallel}} \neq \frac{n_{\perp}}{n_{\parallel}}. \quad (1.52)$$

Mostreremo ora come ciò sia causa del decadimento algebrico delle correlazioni nella fase disordinata che si osservano nel DLG. Per semplicità, analizzeremo il sistema per temperature molto al di sopra della temperatura critica, per cui sarà sufficiente considerare la forma linearizzata dell'equazione (1.49).

¹⁷Questa affermazione non è del tutto corretta. Può infatti accadere, per un sistema fuori dall'equilibrio, che passando a una descrizione mesoscopica venga recuperata la condizione di bilancio dettagliato che non valeva a livello microscopico: ciò non deve stupire, dal momento che nel processo di *coarse-graining* necessariamente si perdono informazioni. In questa descrizione, il sistema è effettivamente all'equilibrio e dunque vale, in un'opportuna forma, il TFD: quando in questo contesto parliamo di violazione del teorema di fluttuazione-dissipazione, intendiamo riferirci a sistemi per cui cade la proporzionalità (1.38) tra \mathbb{D} e \mathbb{N} , espressione del TFD all'equilibrio. Per una discussione più approfondita della questione, si veda [7].

Introducendo la trasformata di Fourier $\phi(\mathbf{x}, t) = \int e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+\omega t)} \tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega)$, la soluzione dell'equazione si esprime semplicemente come

$$\tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) = -i \frac{\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\zeta}}{i\omega + \Xi(\mathbf{k})},$$

con

$$\Xi(\mathbf{k}) \equiv \lambda\{\tau_{\perp} \mathbf{k}_{\perp}^2 + \tau_{\parallel} k_{\parallel}^2 + (\alpha_{\perp} \mathbf{k}_{\perp}^4 + 2\alpha_{\times} \mathbf{k}_{\perp}^2 k_{\parallel}^2 + \alpha_{\parallel} k_{\parallel}^4)\} = \frac{1}{2} \mathbf{k} \cdot \mathbb{D} \mathbf{k} + O(\mathbf{k}^4).$$

Si osservi che, essendo il rumore a media nulla, $\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$ come ci si aspettava. Dalla covarianza del rumore $\boldsymbol{\zeta}$ si può ottenere la trasformata di Fourier rispetto al tempo del fattore di struttura $\tilde{S}(\mathbf{k}, \omega) = \int dt e^{-i\omega t} S(\mathbf{k}, t)$:

$$\tilde{S}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) \tilde{\phi}(-\mathbf{k}, -\omega) \rangle = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbb{N} \mathbf{k}}{\omega^2 + \Xi(\mathbf{k})^2}$$

da cui il fattore di struttura statico risulta

$$S(\mathbf{k}) \equiv S(\mathbf{k}, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{S}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbb{N} \mathbf{k}}{2\Xi(\mathbf{k})}. \quad (1.53)$$

Siamo interessati al comportamento di $S(\mathbf{k})$ per piccoli valori dell'impulso: limitandoci dunque all'ordine quadratico in \mathbf{k} nell'espressione per Ξ , abbiamo che

$$S(\mathbf{k}) \approx \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbb{N} \mathbf{k}}{\mathbf{k} \cdot \mathbb{D} \mathbf{k}} \quad \text{per } \mathbf{k} \rightarrow 0. \quad (1.54)$$

Come si vede, la violazione del TFD espressa dalla (1.52) comporta una discontinuità del fattore di struttura nel limite di impulso nullo. Mostriamo come questa discontinuità sia alla base del decadimento algebrico per la funzione di correlazione a due punti a tempi uguali. Dalla definizione (1.21) di $S(\mathbf{k})$ si ha che

$$G(\mathbf{x}, 0) = \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} S(\mathbf{k});$$

l'andamento per grandi distanze è controllato dai piccoli valori dell'impulso: usando lo sviluppo (1.54) si ha dunque che

$$G(\mathbf{x}, 0) \approx \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbb{N} \mathbf{k}}{\mathbf{k} \cdot \mathbb{D} \mathbf{k}} \quad \text{per } r = |\mathbf{x}| \rightarrow \infty.$$

Essendo \mathbb{D} diagonale e positiva, possiamo riscalarne impulsi e coordinate, definendo

$$\mathbf{k}' \equiv \mathbb{D}^{1/2} \mathbf{k} \quad \mathbf{x}' \equiv \mathbb{D}^{-1/2} \mathbf{x} \quad \mathbb{M} \equiv \mathbb{D}^{-1/2} \mathbb{N} \mathbb{D}^{-1/2}.$$

Dopo alcune manipolazioni, si può riscrivere l'andamento di G per $r' \rightarrow \infty$ come

$$G(r') \propto \nabla' \cdot \mathbb{M} \nabla' \int \frac{e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'}}{k'^2} = \nabla' \cdot \mathbb{M} \nabla' r'^{(2-d)},$$

e sviluppando le derivate si giunge infine all'espressione

$$G(r') \propto \frac{\hat{\mathbf{x}}' \cdot \overline{\mathbb{M}} \hat{\mathbf{x}}'}{(r')^d}, \quad (1.55)$$

dove è stata introdotta $\overline{\mathbb{M}} \equiv \mathbb{M} - (\text{Tr}\mathbb{M}/d)\mathbb{I}$, la parte senza traccia di \mathbb{M} .

Per il gas reticolare forzato, $\mathbb{N} \neq \mathbb{D}$ ossia $\overline{\mathbb{M}} \neq 0$ e si ha dunque l'annunciato decadimento a potenza. Per i sistemi all'equilibrio invece $\mathbb{N} \propto \mathbb{D}$, e quindi l'ampiezza associata a questo decadimento si annulla. Come vedremo tra poco, i termini di ordine k^4 che abbiamo trascurato nello sviluppo di Ξ sono responsabili di un decadimento esponenziale: per i sistemi all'equilibrio questo decadimento diventa dunque dominante.

C'è però da notare che il decadimento algebrico (1.55) per la fase disordinata del DLG è sostanzialmente differente dal decadimento algebrico che si osserva nei sistemi all'equilibrio in prossimità di un punto critico: infatti in quest'ultimo caso il lento decadimento causa la divergenza della suscettività $\chi = \int d^d \mathbf{x} G(\mathbf{x})$, mentre ciò non avviene nel primo caso. In effetti, a causa del fatto che $\overline{\mathbb{M}}$ è a traccia nulla¹⁸, per il gas reticolare forzato la media di $G(\mathbf{x})$ sull'angolo solido è nulla: quindi, accanto al decadimento algebrico espresso dalla (1.55), per le correlazioni mediate sull'angolo solido emerge un decadimento di tipo esponenziale.

Per evidenziare questo decadimento esponenziale, definiamo il fattore di struttura mediato sugli angoli (rispetto alle variabili primarie)

$$\overline{S}(k') \equiv \int \frac{d\Omega'}{\Omega_d} S(\mathbf{k}') \quad k' = |\mathbf{k}'|,$$

dove $d\Omega$ e Ω_d rappresentano rispettivamente l'angolo solido infinitesimo e l'angolo solido totale in d dimensioni. La trasformata di Fourier di $\overline{S}(k')$ non è altro che $\overline{G}(r')$, la funzione di correlazione mediata sull'angolo solido, in modo da annullare il contributo algebrico al decadimento: diventano dunque fondamentali i contributi di ordine k^4 nell'espressione di Ξ . Svolgendo i calcoli, si giunge all'espressione

$$\overline{S}(k) = \frac{\overline{\chi}}{1 + \xi^2},$$

¹⁸Si osservi che la traccia nulla di $\overline{\mathbb{M}}$ comporta la presenza di direzioni in cui le correlazioni sono negative, concordemente a quanto è stato osservato nel precedente paragrafo.

dove $\bar{\chi}$ e $\bar{\xi}$ sono funzioni di d e dei parametri che compaiono nell'espressione di Ξ (per maggiori dettagli, si veda [7]). Da questa forma per la trasformata di Fourier si ricava naturalmente l'annunciato decadimento esponenziale nello spazio delle configurazioni,

$$\bar{G}(r') \propto \frac{e^{-r'/\bar{\xi}}}{(r')^{(d-1)/2}}. \quad (1.56)$$

Abbiamo dunque visto, per il gas reticolare forzato, come una violazione del teorema di fluttuazione-dissipazione comporti la presenza di correlazioni a lungo raggio lontano dal punto critico. Una domanda sorge spontanea: quali sono le condizioni necessarie perché un sistema manifesti questo tipo di comportamento? Questo problema è stato discusso in letteratura, ma una risposta definitiva non è stata ancora ottenuta. Sono stati avanzati comunque argomenti [13, 14, 15] in favore della necessità delle seguenti condizioni:

1. *una dinamica diffusiva*: questa richiesta già da sola produce un decadimento algebrico nel tempo per le correlazioni nei sistemi all'equilibrio, come si è visto, $G(\mathbf{x}, t) \sim t^{-d/2}$ per $t \rightarrow \infty$ e \mathbf{x} fissato. Dal momento che in un processo diffusivo lo spazio scala come il quadrato del tempo, questa condizione produrrebbe un decadimento algebrico anche per le correlazioni spaziali, se non fosse che l'ampiezza associata a tale decadimento si annulla, per i sistemi all'equilibrio;
2. *uno stato stazionario di non equilibrio*: questa richiesta serve a far cadere la proporzionalità tra \mathbb{D} e \mathbb{N} , ripristinando così un'ampiezza non nulla per il decadimento algebrico;
3. *una dinamica spazialmente anisotropa*: questa è una condizione di carattere tecnico, serve per garantire il decadimento algebrico della funzione a due punti.

Nel seguito, lasceremo da parte queste questioni di carattere generale per dedicarci all'analisi di modelli specifici.

Capitolo 2

Il processo di esclusione unidimensionale

In questo capitolo prenderemo in considerazione un semplice e importante modello unidimensionale, oggetto di intenso studio tanto nella letteratura fisica quanto in quella matematica, per il quale recentemente sono stati ottenuti diversi risultati esatti. Si tratta del processo di esclusione (ASEP, *Asymmetric Simple Exclusion Process*), e nella sua versione più semplice altro non è che il gas reticolare forzato introdotto nel capitolo precedente, in cui non c'è interazione tra le particelle al di fuori dell'*hard-core* ed è solo l'azione forzante del campo a caratterizzare la dinamica. Il modello è stato studiato per differenti condizioni al contorno (aperte, chiuse, periodiche) e con diverse varianti e, a dispetto della sua semplicità, ha messo in luce fenomeni interessanti quali transizioni di fase, correlazioni a lungo raggio, rottura spontanea di simmetria: per una rassegna, si veda [16].

La nostra attenzione sarà innanzitutto rivolta all'esposizione del cosiddetto *ansatz matriciale* (noto in letteratura come MPA, *Matrix Product Ansatz*): si tratta di una semplice e potente tecnica, che ha consentito la soluzione esatta di diversi modelli. La introdurremo nel contesto in cui per la prima volta è stata applicata ai sistemi di particelle, nella soluzione del processo di esclusione totalmente asimmetrico, e ne discuteremo le generalizzazioni (teorema di Krebs e Sandow, Paragrafo 2.2.3). Esamineremo quindi l'applicazione di questa tecnica che ha recentemente permesso a Derrida, Lebowitz e Speer il primo calcolo esatto del funzionale di grandi deviazioni per un sistema fuori dall'equilibrio, e discuteremo le preziose informazioni sugli stati stazionari di non equilibrio che questo esempio fornisce.

Riprendiamo la Master Equation (1.6), riscritta nella forma più generale:

$$\frac{d}{dt}P_t(C) = \sum_{C' \in \mathcal{X}} \{ P_t(C')w_{c' \rightarrow c} - P_t(C)w_{c \rightarrow c'} \}. \quad (2.1)$$

Questa è un'equazione differenziale lineare per la misura P_t . Essendo lo spazio delle configurazioni \mathcal{X} finito, la misura P_t è identificata dai suoi valori sulle singole configurazioni, ossia può essere pensata come una funzione su \mathcal{X} : in questo senso si parla di linearità, immaginando lo spazio delle misure \mathcal{D}^* come un sottoinsieme dello spazio delle funzioni \mathcal{D} (lo spazio delle misure non è uno spazio vettoriale). Se si definisce la matrice $\Gamma_c^{c'}$

$$\Gamma_c^{c'} \equiv \begin{cases} w_{c' \rightarrow c} & \text{se } C' \neq C \\ -\sum_{c''} w_{c \rightarrow c''} & \text{se } C = C', \end{cases} \quad (2.2)$$

la (2.1) si può riscrivere nella forma

$$\frac{d}{dt}P_t(C) = \sum_{C' \in \mathcal{X}} \Gamma_c^{c'} P_t(C').$$

Introduciamo inoltre un notazione alternativa, che ci sarà utile più avanti. Consideriamo uno spazio di Hilbert finito dimensionale \mathcal{V} , di cui l'insieme degli elementi $\{|C\rangle, C \in \mathcal{X}\}$ costituisca una base ortonormale (base canonica); la distribuzione di probabilità P_t sarà identificata col vettore $|P_t\rangle \equiv \sum_c P_t(C)|C\rangle$. Se definiamo l'operatore lineare \mathcal{H} su \mathcal{V} la cui matrice associata nella base canonica è $\langle C|\mathcal{H}|C'\rangle = -\Gamma_c^{c'}$, la Master Equation riscritta per $|P_t\rangle$ diventa

$$\frac{d}{dt}|P_t\rangle = -\mathcal{H}|P_t\rangle, \quad (2.3)$$

che è formalmente analoga a un'equazione di Schroedinger per tempi immaginari (anche se si tenga presente che \mathcal{H} in generale non è hermitiana). Ritourneremo più approfonditamente su questa analogia nel Paragrafo (2.2.3).

Il nostro obiettivo principale sarà quello di determinare le soluzioni stazionarie della Master Equation, che corrispondono agli autovettori di \mathcal{H} con autovalore 0¹.

¹Si noti che l'esistenza di tali soluzioni è garantita dalla (2.2): la somma degli elementi di ogni colonna di $\Gamma_c^{c'}$ è nulla, ossia la trasposta della matrice $\Gamma_c^{c'}$ ha $(1, 1, \dots, 1)$ come autovettore relativo a 0; dato che una matrice e la sua trasposta hanno gli stessi autovalori, è provata l'esistenza di una misura stazionaria.

2.1 L'ansatz matriciale

Specializziamo la costruzione sopra esposta al processo di esclusione che ci apprestiamo a trattare. Consideriamo un reticolo unidimensionale di L siti etichettati da un indice $k = 1, \dots, L$; introduciamo una variabile locale τ_k che vale 1 se il sito k -esimo è occupato e 0 altrimenti: le configurazioni del sistema C sono le L -uple $(k_1, \dots, k_L) \in \{0, 1\}^L$. Le mosse elementari che determinano l'evoluzione del sistema sono quelle in cui una particella salta in un sito adiacente libero, e le frequenze di queste transizioni non dipendono dal sito: introduciamo le grandezze $\Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$ per indicare la frequenza della transizione in cui la configurazione nei siti $[i, i+1]$ passa da (σ_i, σ_{i+1}) a (τ_i, τ_{i+1}) . Imponiamo condizioni al bordo aperte, corrispondenti a porre le estremità del sistema in contatto con due riserve di particelle con differente potenziale chimico: nei siti 1 e L le particelle possono essere aggiunte e rimosse, con frequenze rispettivamente $L_{\tau_1}^{\sigma_1}$ e $R_{\tau_L}^{\sigma_L}$. Queste condizioni al bordo, nel caso di dinamica interna simmetrica, sono determinanti nel mantenere il sistema fuori dall'equilibrio, ossia nel far cadere la condizione di bilancio dettagliato.

Si noti che, a causa delle condizioni al bordo aperte, il numero di particelle *non* è conservato; essendo la dinamica irriducibile², c'è un'unica misura invariante su tutto lo spazio delle configurazioni \mathcal{X} .

Indicando una configurazione con $\{\tau\} = (\tau_1, \dots, \tau_L)$, la Master Equation (2.1) per il nostro sistema si scrive

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_t(\{\tau\}) = & \sum_{k=1}^L \sum_{\sigma_k, \sigma_{k+1}=0,1} \Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_k, \sigma_{k+1}} P_t(\tau_1, \dots, \tau_{k-1}, \sigma_k, \sigma_{k+1}, \dots, \tau_L) + \\ & + \sum_{\sigma_1=0,1} L_{\tau_1}^{\sigma_1} P_t(\sigma_1, \tau_2, \dots, \tau_L) + \sum_{\sigma_L=0,1} R_{\tau_L}^{\sigma_L} P_t(\tau_1, \dots, \tau_{L-1}, \sigma_L). \end{aligned} \quad (2.4)$$

L'importanza di questo modello è legata alla possibilità di ottenere soluzioni esatte per un ampio spettro dei parametri, come vedremo. Ma l'interesse che esercita il processo di esclusione deriva anche dalle svariate applicazioni che questo sistema, pur nella sua semplicità, presenta, e che vanno dalla modellizzazione del traffico automobilistico [17] allo studio della crescita delle interfacce [18], fino ad arrivare a problemi di interesse biologico, legati a fenomeni di trasporto attraverso membrane [19, 20] e alla cinetica della biopolimerizzazione [21].

²Nella nostra analisi escluderemo sempre i valori "patologici" dei parametri che rendono questa dinamica non irriducibile.

2.1.1 Il caso totalmente asimmetrico

Rivisiteremo in questo paragrafo l'importante lavoro [22] in cui Derrida, Evans, Hakim e Pasquier introdussero per la prima volta l'ansatz matriciale nello studio del processo di esclusione totalmente asimmetrico (TASEP).

Il punto di partenza è un lavoro di poco precedente [23], in cui era emersa una interessante quanto inaspettata proprietà del TASEP, suggerita da calcoli espliciti su sistemi di piccole dimensioni e poi dimostrata in generale: la misura nello stato stazionario può essere ottenuta esattamente mediante una semplice relazione di ricorsione sulla grandezza del sistema, ossia conoscendo le misure invarianti dei sistemi lunghi meno di L si può determinare la misura invariante del sistema di lunghezza L . Ciò aveva permesso in [23, 24] calcoli esatti del profilo di densità e di funzioni di correlazione a più punti, tramite un metodo piuttosto complicato che faceva uso di funzioni generatrici.

Suggerito da questa proprietà di ricorsività e ispirato alle tecniche usate nello studio dei sistemi integrabili da Faddeev e Baxter, l'ansatz matriciale viene introdotto come una derivazione alternativa dei risultati già ottenuti che, oltre alla semplicità, presenta l'enorme vantaggio di prestarsi a generalizzazioni. Ma procediamo alla descrizione del modello.

Nel TASEP le particelle possono saltare solo in una direzione (per essere definiti, a destra), con frequenza che porremo uguale a 1 senza perdere di generalità³; le particelle vengono immesse solo all'estremità sinistra con frequenza α , mentre l'estrazione avviene solo all'estremità destra, con frequenza β . In sintesi

$$\begin{aligned} (\dots \bullet \circ \dots) &\rightarrow (\dots \circ \bullet \dots) & \dots \triangleright & \Gamma_{01}^{10} = 1 \\ [\circ \dots] &\rightarrow [\bullet \dots] & \dots \triangleright & L_1^0 = \alpha \\ (\dots \circ] &\rightarrow (\dots \bullet] & \dots \triangleright & R_0^1 = \beta, \end{aligned}$$

dove con \bullet indichiamo un sito occupato e con \circ un sito vuoto; tutte le altre frequenze sono nulle.

Ci poniamo il problema di determinare la misura stazionaria $P_L(\tau_1, \dots, \tau_L)$; per comodità, prenderemo in considerazione misure f_L non normalizzate, che coincidono con P_L a meno di un fattore moltiplicativo Z_L , analogo alla funzione di partizione

³Riscalare tutte le frequenze per un fattore comune corrisponde a una semplice dilatazione temporale, che evidentemente non modifica la misura stazionaria del sistema (cfr. la (2.1))

di un sistema statistico all'equilibrio:

$$P_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = \frac{f_L(\tau_1, \dots, \tau_L)}{Z_L}, \quad \text{con} \quad Z_L \equiv \sum_{\tau_1=0,1} \cdots \sum_{\tau_L=0,1} f_L(\tau_1, \dots, \tau_L).$$

Un caso è molto semplice: se $\alpha + \beta = 1$, si verifica facilmente che la misura stazionaria è semplicemente una misura prodotto,

$$f_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = \prod_{k=1}^L g(\tau_k), \quad \text{con} \quad g(\tau) = \begin{cases} 1/\beta & \text{per } \tau = 1 \\ 1/\alpha & \text{per } \tau = 0. \end{cases}$$

Questa misura è completamente fattorizzata: ogni sito è occupato indipendentemente dagli altri con probabilità $(1/\beta)/(1/\alpha + 1/\beta) = \alpha/(\alpha + \beta) = \alpha$, che è dunque la densità media di particelle nel sistema; inoltre si annullano le funzioni di correlazione connesse:

$$\langle \tau_i \tau_j \rangle_{conn} \equiv \langle \tau_i \tau_j \rangle - \langle \tau_i \rangle \langle \tau_j \rangle = 0.$$

Non esistono strategie generali per la risoluzione della Master Equation, che si presenta come un'equazione assai complicata. Un metodo utile in pratica consiste nel cercare classi particolari di misure f_L , che soddisfino condizioni più forti (sufficienti per la soluzione dell'equazione) ma più maneggevoli. Essendo già a conoscenza dell'esistenza di relazioni di ricorsione per le misure stazionarie relative a diversi valori di L e guidati dalla forma della (2.4), i nostri autori hanno riformulato il problema in questi termini: si tratta di trovare due coefficienti x_0 e x_1 e una famiglia di misure f_L tali che siano soddisfatte le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_k=0,1} \sum_{\sigma_{k+1}=0,1} \Gamma_{\tau_k, \tau_{k+1}}^{\sigma_k, \sigma_{k+1}} f_L(\tau_1, \dots, \tau_{k-1}, \sigma_k, \sigma_{k+1}, \tau_{k+2}, \dots, \tau_L) &= \\ = -x_{\tau_k} f_{L-1}(\tau_1, \dots, \tau_{k-1}, \tau_{k+1}, \dots, \tau_L) + x_{\tau_{k+1}} f_{L-1}(\tau_1, \dots, \tau_k, \tau_{k+2}, \dots, \tau_L) \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1=0,1} L_{\tau_1}^{\sigma_1} f_L(\sigma_1, \tau_2, \dots, \tau_L) &= x_{\tau_1} f_{L-1}(\tau_2, \dots, \tau_L) \\ \sum_{\sigma_L=0,1} R_{\tau_L}^{\sigma_L} f_L(\tau_1, \dots, \tau_{L-1}, \sigma_L) &= -x_{\tau_L} f_{L-1}(\tau_1, \dots, \tau_{L-1}). \end{aligned}$$

Per controllo diretto si può facilmente verificare che in queste ipotesi le f_L sono soluzioni stazionarie della Master Equation, per ogni valore di L : i diversi termini a secondo membro della (2.4) si cancellano uno a uno in modo "telescopico". Queste condizioni in generale sono solo sufficienti, esistono cioè sistemi la cui misura

stazionaria non le soddisfa e *non* costituiscono dunque una riformulazione equivalente del problema (in un certo senso in questo risiede la loro potenza, come avremo modo di discutere in calce al teorema di Krebs e Sandow, par. 2.2.3); esse risultano pertanto significative solo nella misura in cui siano effettivamente risolubili.

L'ansatz matriciale nasce come una sorta di generalizzazione di una misura prodotto: si cercano i pesi f_L della forma

$$f_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = (W | \prod_{k=1}^L (\tau_k D + (1 - \tau_k) E) | V), \quad (2.6)$$

dove D ed E sono matrici e $|V\rangle$ e $|W\rangle$ sono vettori di uno spazio ausiliario⁴. Questa formula afferma semplicemente che il peso $f_L(\tau_1, \dots, \tau_L)$ è dato da un prodotto di L matrici, una per ogni sito k , scegliendo D se $\tau_k = 1$ e E se $\tau_k = 0$. Nel caso le matrici siano unidimensionali, si ritrova la misura prodotto, con $g(1) = D$, $g(0) = E$.

La potenza dell'ansatz risiede nel fatto che permette di tradurre le condizioni di ricorsione sopra esposte in una forma decisamente più semplice: come si può verificare per controllo diretto, la famiglia di misure $\{f_L\}$ nella forma (2.6) soddisfa le (2.5) se e solo se sono soddisfatte le seguenti relazioni algebriche:

$$DE = D + E \quad (2.7)$$

$$D |V\rangle = \frac{1}{\beta} |V\rangle \quad (2.8)$$

$$(W | E = \frac{1}{\alpha} (W |. \quad (2.9)$$

Queste sono le relazioni fondamentali, da cui seguono tutti i risultati del prossimo paragrafo. Resta da mostrare che effettivamente esistono realizzazioni di questa algebra: per questo si rimanda all'Appendice A.2, dove vengono fornite rappresentazioni esplicite. Notiamo comunque che, se da un lato trovare delle effettive rappresentazioni è importante per garantire la consistenza dell'approccio, d'altro canto non si farà mai uso della forma esplicita delle matrici D ed E nella derivazione dei nostri risultati, per i quali le relazioni (2.7)-(2.9) sono sufficienti: ciò grazie al fatto che tali relazioni permettono di esprimere $f_L(\tau_1, \dots, \tau_L)$ in funzione dei pesi $\{f_{L-1}(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1})\}$.

Ci si può chiedere che dimensione debbano avere tali matrici. Sempre nell'Appendice A.2 viene mostrato che, escludendo il già citato caso $\alpha + \beta = 1$ in cui esse possono essere scelte unidimensionali, per gli altri valori dei parametri D ed E devono essere matrici *non commutanti* e infinito-dimensionali.

⁴Questo spazio non ha niente a che vedere con lo spazio di Hilbert \mathcal{V} introdotto in precedenza.

2.1.2 Il diagramma di fase del TASEP

Esaminiamo alcuni vantaggi che presenta il nostro approccio matriciale. La funzione di partizione Z_L si scrive⁵ semplicemente

$$Z_L = (W | C^L | V) \quad C \equiv D + E, \quad (2.10)$$

ed espressioni particolarmente semplici hanno anche le funzioni di correlazione,

$$\langle \tau_i \rangle_L = \frac{(W | C^{i-1} D C^{L-i} | V)}{(W | C^L | V)} \quad (2.11)$$

$$\langle \tau_i \tau_j \rangle_L = \frac{(W | C^{i-1} D C^{j-i-1} D C^{L-j} | V)}{(W | C^L | V)}, \quad i < j. \quad (2.12)$$

La probabilità che in un intervallo di tempo dt una particella salti dal sito i al sito $i + 1$ è $\tau_i(1 - \tau_{i+1})dt$; di conseguenza, il valor medio della corrente (numero di particelle per unità di tempo) tra i due siti sarà $J = \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) \rangle$, che assume la forma

$$J = \frac{(W | C^{i-1} D E C^{L-i-1} | V)}{(W | C^L | V)} = \frac{(W | C^{L-1} | V)}{(W | C^L | V)} = \frac{Z_{L-1}}{Z_L}, \quad (2.13)$$

dove si è usato (2.7) che $DE = C$. Si osservi che questa espressione non dipende da i : nello stato stazionario, la corrente attraverso il sistema è uniforme.

Il profilo di densità $\langle \tau_i \rangle_L$ e la corrente J sono le osservabili principali per il nostro sistema, e andremo a studiarle al fine di ricavare il diagramma di fase, al variare dei parametri α e β che caratterizzano il sistema. Dalle formule sopra ricavate emerge l'importanza che giocano le potenze della matrice C e si comprende dunque l'interesse di ricavarne un'espressione asintotica per $L \rightarrow \infty$, al fine di evidenziare transizioni di fase.

Che cosa intendiamo con transizioni di fase? Per sistemi all'equilibrio si parla di transizione di fase quando, nel limite termodinamico di volume infinito e densità costante, qualche osservabile del sistema (che si può sempre esprimere mediante le derivate parziali dell'energia libera) manifesta una dipendenza non analitica da uno dei parametri del sistema, come ad esempio la temperatura (si veda per esempio [25]). Si distingue poi tra transizioni di prima specie, nel caso in cui una derivata prima dell'energia libera⁶ presenti una discontinuità, e di seconda specie, in cui la discontinuità sia nelle derivate di ordine più alto.

⁵Esprimere la funzione di partizione tramite le potenze della matrice C , come nella formula (2.10), richiama molto da vicino la tecnica della *transfer matrix* per la risoluzione dei sistemi unidimensionali all'equilibrio; non è però chiara quale interpretazione fisica possa avere la matrice C .

⁶Si ricordi che, grazie a proprietà di convessità, l'energia libera resta una funzione continua anche nel limite termodinamico.

Il comportamento non analitico di un'osservabile al variare di qualche parametro è una buona definizione di transizione di fase anche per i sistemi fuori dall'equilibrio; qui però non abbiamo a disposizione un'energia libera che classifichi le osservabili del sistema, e per distinguere tra transizioni di prima e di seconda specie non esiste una regola generale. Ma torniamo all'analisi del nostro modello.

Direttamente dalle relazioni algebriche (2.7)-(2.9), si può ricavare un'espressione esatta per $(W|C^L|V)$ (e dunque per J):

$$(W|C^L|V) = \sum_{p=1}^L \frac{p(2L-1-p)!}{L!(L-p)!} \frac{(1/\beta)^{p+1} - (1/\alpha)^{p+1}}{(1/\beta) - (1/\alpha)}, \quad (2.14)$$

avendo fissato la normalizzazione $(W|V) = 1$. Espressioni esatte si possono quindi ottenere, a partire dalle (2.11),(2.12) e usando le nostre relazioni algebriche, per il profilo di densità e per la funzione di correlazione a due punti:

$$\begin{aligned} \langle \tau_i \rangle_L &= \sum_{p=0}^{L-i-1} \frac{2p!}{p!(p+1)!} \frac{(W|C^{L-i-p}|V)}{(W|C^L|V)} + \\ &+ \frac{(W|C^{i-1}|V)}{(W|C^L|V)} \sum_{p=2}^{L-i+1} \frac{(p-1)(2(L-i)-p)!}{(L-i)!(L-i+1-p)!} \beta^{-p} \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} \langle \tau_i \tau_j \rangle_L &= \sum_{p=0}^{L-j-1} \frac{2p!}{p!(p+1)!} \langle \tau_i \rangle_{L-p-1} \frac{(W|C^{L-p-1}|V)}{(W|C^L|V)} + \\ &+ \langle \tau_i \rangle_{j-1} \frac{(W|C^{j-1}|V)}{(W|C^L|V)} \sum_{p=2}^{L-j+1} \frac{(p-1)(2(L-j)-p)!}{(L-j)!(L-j+1-p)!} \beta^{-p}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Queste espressioni per $\langle \tau_i \rangle_L$, $\langle \tau_i \tau_j \rangle_L$ e J (cfr. (2.13) e (2.14)), per quanto all'apparenza non semplici, si rivelano molto utili ai fini pratici, permettendo sviluppi asintotici espliciti nel limite termodinamico $L \rightarrow \infty$; il punto di partenza per questi sviluppi è l'espressione di $(W|C^L|V)$ per grandi L , ricavabile a partire dalla (2.14):

$$(W|C^L|V) \approx AL^z \lambda^L, \quad (2.17)$$

dove A , z e λ sono funzioni dei parametri α e β ; si rimanda all'Appendice A.3 per maggiori dettagli.

Siamo finalmente in grado di ricavare e discutere il risultato principale di questa analisi: la determinazione del diagramma di fase del TASEP. La affronteremo analizzando separatamente il comportamento della corrente e del profilo di densità.

La corrente

Il comportamento asintotico della corrente, ricavabile a partire dalla (2.13) e dallo sviluppo di $(W|C^L|V)$, si rivela semplice e interessante:

- (i) per $\alpha \geq \frac{1}{2}$ e $\beta \geq \frac{1}{2}$, $J = \frac{1}{4}$;
- (ii) per $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\beta > \alpha$, $J = \alpha(1 - \alpha)$;
- (iii) per $\beta < \frac{1}{2}$ e $\beta < \alpha$, $J = \beta(1 - \beta)$.

Possiamo dunque dividere il piano (α, β) in tre regioni, corrispondenti a tre diverse “fasi” per il nostro sistema (si veda la figura 2.1), separate da linee su cui il comportamento della corrente J è non analitico:

- (i) per $\alpha \geq \frac{1}{2}$ e $\beta \geq \frac{1}{2}$ abbiamo una regione di *massima corrente* (MC), in cui J assume il suo valore massimo;
- (ii) per $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\beta > \alpha$ si ha la fase di *bassa densità* (LD), come si vedrà tra poco, in cui il valore della corrente è limitato da una bassa frequenza di immissione α ;
- (iii) per $\beta < \frac{1}{2}$ e $\beta < \alpha$ abbiamo infine la fase di *alta densità* (HD), dove è il basso valore della frequenza di estrazione β a limitare la corrente.

Osserviamo che il sistema presenta una simmetria di scambio particelle \leftrightarrow vacanze⁷: la dinamica può anche essere descritta dicendo che le vacanze saltano alla loro sinistra scambiandosi con le particelle con frequenza unitaria, mentre per le condizioni al bordo le vacanze vengono immesse all'estremità destra con frequenza β e vengono estratte all'estremità sinistra con frequenza α . La simmetria è dunque quella che scambia particella con vacanza, α con β e inoltre opera una riflessione del reticolo, mandando il sito i nel sito $L + 1 - i$. Il diagramma di fase per la corrente rispetta, come deve essere, questa simmetria.

La linea $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$ verrà detta *linea di coesistenza*: in corrispondenza di essa si ha una transizione di fase di prima specie, mentre per le linee $\beta \geq \alpha = \frac{1}{2}$ e $\alpha \geq \beta = \frac{1}{2}$ la transizione è di seconda specie: la ragione di questa distinzione è che, come vedremo tra breve, attraversando la prima linea le proprietà del sistema variano bruscamente, poiché la densità di particelle presenta una discontinuità.

⁷Col termine “vacanza” indichiamo un sito non occupato.

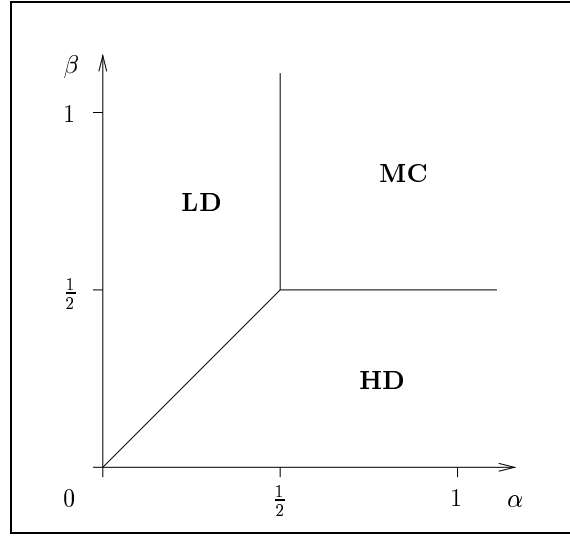


Figura 2.1: Diagramma di fase per il TASEP: si distinguono le fasi di *bassa densità* (LD), *alta densità* (HD) e *massima corrente* (MC).

La densità lontano dai bordi

Vogliamo trovare la forma del profilo di densità $\langle \tau_i \rangle_L$ nel limite termodinamico. Poniamo per comodità $i = Lx$, con $x \in [0, 1]$: in questo modo $\langle \tau_i \rangle_L$ diventa una funzione della variabile continua x .

In questa sezione esamineremo il profilo di densità “lontano dai bordi”, sceglieremo cioè $0 < x < 1$. Partendo dalla formula esatta (2.15) e dallo sviluppo (2.17), si ottiene il seguente comportamento asintotico:

- (i) per $\alpha \geq \frac{1}{2}$ e $\beta \geq \frac{1}{2}$, $\langle \tau_{Lx} \rangle_L \simeq \frac{1}{2}$;
- (ii) per $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\beta > \alpha$, $\langle \tau_{Lx} \rangle_L \simeq \alpha$;
- (iii) per $\beta < \frac{1}{2}$ e $\beta < \alpha$, $\langle \tau_{Lx} \rangle_L \simeq 1 - \beta$;
- (iv) per $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$, $\langle \tau_{Lx} \rangle_L \simeq \alpha + x(1 - 2\alpha)$.

Il comportamento della densità non introduce dunque nuove fasi. Il profilo è indipendente da x , tranne che sulla linea di transizione $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$ dove è lineare; attraversando questa linea la densità subisce una discontinuità, passando dal valore α al valore $1 - \beta$. La densità massima si ha nella fase MC, dove assume il valore $\frac{1}{2}$, mentre le regioni LD e HD corrispondono rispettivamente alle fasi di bassa e alta densità (cfr. figura 2.2).

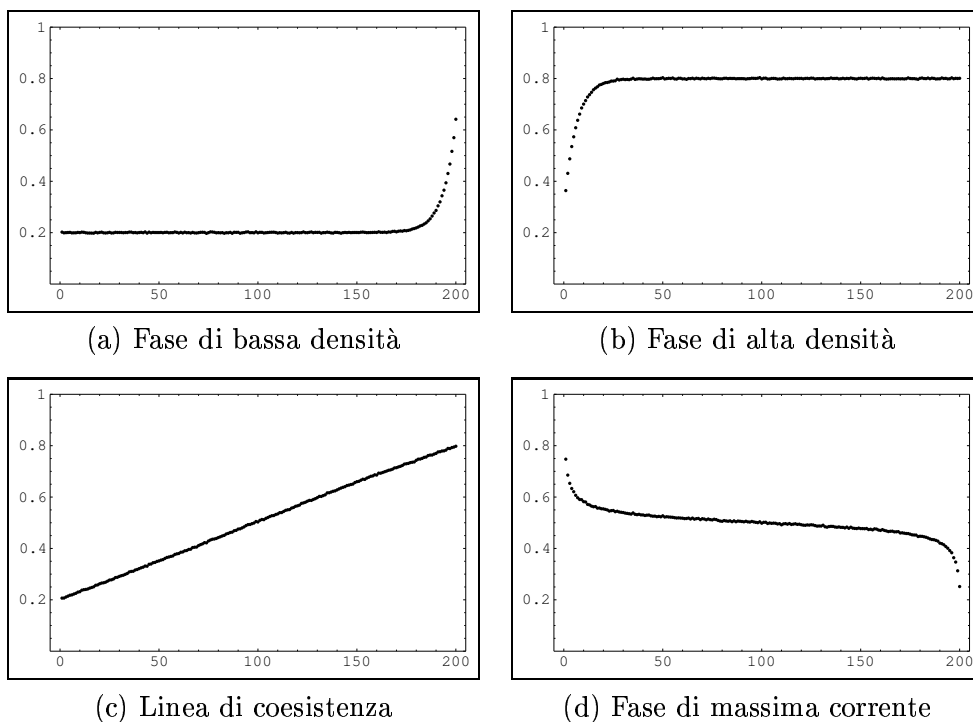


Figura 2.2: Profili medi di densità per il TASEP, da simulazioni Monte Carlo su reticolo di lunghezza $L = 200$. I valori dei parametri sono: (a) $\alpha = 0.2$, $\beta = 0.25$; (b) $\alpha = 0.25$, $\beta = 0.2$; (c) $\alpha = 0.2$, $\beta = 0.2$; (d) $\alpha = 1$, $\beta = 1$. (da [29])

Per $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$, era già noto [26] che le configurazioni tipiche del sistema corrispondono ai cosiddetti *shocks*: si tratta di configurazioni i cui profili di densità presentano un punto di discontinuità, in cui la regione a sinistra ha densità $\rho_a \equiv \alpha$ e quella destra $\rho_b \equiv 1 - \beta$:

$$\rho_y(x) \equiv \rho_a \Theta(y - x) + \rho_b \Theta(x - y),$$

dove Θ è la funzione di Heaviside. La posizione y della discontinuità è distribuita uniformemente lungo il sistema: per questa ragione il profilo medio risulta lineare.

La simmetria particelle \leftrightarrow vacanze applicata al profilo di densità impone che

$$\langle \tau_i \rangle_{L;\alpha,\beta} = 1 - \langle \tau_{L+1-i} \rangle_{L;\beta,\alpha}. \quad (2.18)$$

Come si vede, le formule ottenute rispettano questa condizione.

La densità in prossimità dei bordi

Andare a vedere il profilo di densità vicino alle estremità significa considerare $\langle \tau_{L-n} \rangle_L$, con $1 \ll n \ll L$. Si trova che nella fase di bassa densità il profilo decade esponenzialmente in prossimità del bordo destro, mentre rimane costante in prossimità del bordo sinistro; a causa della simmetria (2.18), si ha un comportamento invertito nella fase di alta densità, dove il decadimento esponenziale si osserva vicino al bordo sinistro. Nella fase di massima corrente, invece, la densità decade in prossimità di entrambi i bordi, *ma con legge a potenza*. Si veda anche la figura 2.2.

La presenza di decadimenti a potenza (sintomo di correlazioni a lungo raggio) in una vasta regione del diagramma di fase e non solo in corrispondenza dei punti critici non deve stupire, come è stato spiegato nel Capitolo 1, perché abbiamo a che fare con un sistema fuori dall'equilibrio.

Nei casi in cui si ha un decadimento esponenziale, della forma $e^{-r/\xi}$, chiameremo la grandezza ξ lunghezza di correlazione; la sua dipendenza da α e β introduce due nuove regioni nel diagramma di fase. Per essere più precisi, la fase LD si divide in due sottofasi:

- una fase LD1, per $\beta < \frac{1}{2}$, in cui $\xi^{-1} = \ln[\beta(1 - \beta)/\alpha(1 - \alpha)]$;
- una fase LD2, per $\beta > \frac{1}{2}$, in cui $\xi^{-1} = -\ln 4\alpha(1 - \alpha)$.

Reciprocamente nella fase HD si distinguono due fasi HD1 per $\alpha < 1/2$ e HD2 per $\alpha > 1/2$, in cui ξ^{-1} vale rispettivamente $\ln[\alpha(1 - \alpha)/\beta(1 - \beta)]$ e $\ln 4\beta(1 - \beta)$. Il diagramma di fase complessivo è riportato in figura 2.2.

Siamo dunque riusciti a studiare in modo approfondito il diagramma di fase per il processo di esclusione unidimensionale totalmente asimmetrico, evidenziando la presenza di transizioni di fase e di correlazioni a lungo raggio.

Il punto fondamentale di questo approccio è stato mostrare che la misura dello stato stazionario può essere espressa in termini dei prodotti delle matrici non commutanti D ed E , come in (2.6); queste matrici soddisfano le semplici relazioni (2.7)-(2.9), che implicano relazioni di ricorsione tra le misure stazionarie relative a sistemi di diverse lunghezze, e si prestano a calcoli espliciti.

La potenza dell'ansatz matriciale risiede, in ultima analisi, nel fornire una tecnologia che permette di tradurre le complesse condizioni (2.5), sufficienti a garantire la stazionarietà di una misura, in un insieme di relazioni di carattere algebrico.

2.2 Sviluppi e applicazioni

L'ansatz matriciale si fonda sull'ipotesi che la misura stazionaria possa essere scritta in termini di un prodotto di matrici. L'effettiva potenza di questo approccio e la generalità di questa formulazione non sono evidenti a priori. In altri termini: quanto è vasta la classe di sistemi che ammettono uno stato stazionario di questo tipo?

Nella semplice (e potente) forma in cui l'abbiamo presentato, una risposta precisa non è nota: nei prossimi paragrafi vedremo che si possono ottenere risultati esatti per il processo di esclusione parzialmente asimmetrico e per diverse varianti della dinamica; tuttavia, come si è già anticipato, le proprietà di ricorsione che questo metodo implica non sono caratteristiche proprie di tutti i sistemi.

Vedremo che è possibile una generalizzazione naturale dell'ansatz, introdotta da Krebs e Sandow in [27], che si rivela estremamente generale: la sua sfera di applicazione comprende la quasi totalità dei sistemi di particelle con dinamica locale, anche a più specie, su reticolo unidimensionale. Naturalmente c'è un prezzo da pagare: da un lato le condizioni algebriche per la risoluzione esplicita dell'ansatz diventano decisamente meno maneggevoli, dall'altro, soprattutto, non si hanno più relazioni ricorsive tra gli stati stazionari di sistemi con diverse lunghezze.

Prima di procedere, diamo una formulazione dell'ansatz matriciale svincolata dall'esempio specifico del TASEP.

Sia dato un sistema di particelle su reticolo unidimensionale, definito dalle grandezze $\Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$, $L_{\tau_1}^{\sigma_1}$ e $R_{\tau_L}^{\sigma_L}$; indichiamo le matrici D ed E rispettivamente con M_0 e M_1 . Noi cerchiamo una misura stazionaria della forma (2.6), che si può riscrivere

$$f_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = (W | \prod_{k=1}^L M_{\tau_k} | V). \quad (2.19)$$

Le condizioni (2.5) sostituite nella Master Equation conducono alle seguenti relazioni algebriche, che sono una generalizzazione delle (2.7)-(2.9):

$$\sum_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} \Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_i, \sigma_{i+1}} M_{\sigma_i} M_{\sigma_{i+1}} = x_{\tau_{i+1}} M_{\tau_i} - x_{\tau_i} M_{\tau_{i+1}} \quad (2.20)$$

$$\sum_{\sigma_L} R_{\tau_L}^{\sigma_L} M_{\sigma_L} | V = -x_{\tau_L} | V \quad (2.21)$$

$$\sum_{\sigma_1} L_{\tau_1}^{\sigma_1} (W | M_{\sigma_1} = x_{\tau_1} (W |. \quad (2.22)$$

Un'estensione immediata è quella di considerare un sistema in cui siano presenti $N - 1$ tipi diversi di particelle, noto in letteratura come processo di esclusione a N

specie: è sufficiente aumentare il numero di gradi di libertà locali, permettendo alle variabili τ_i di assumere i valori $0, 1, \dots, N - 1$; si ottengono le medesime relazioni (2.20)-(2.22).

In ultima analisi, chiedersi se un sistema, definito assegnando le frequenze $\Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$, $L_{\tau_1}^{\sigma_1}$ e $R_{\tau_L}^{\sigma_L}$, ammetta uno stato stazionario della forma (2.19) è equivalente a chiedersi se esistano rappresentazioni di queste relazioni algebriche con i valori delle frequenze dati. Grande interesse presenta dunque lo studio delle rappresentazioni di un'algebra della forma (2.20)-(2.22), e più in generale la determinazione di condizioni per i parametri $\Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$, $L_{\tau_1}^{\sigma_1}$ e $R_{\tau_L}^{\sigma_L}$ affinché tale algebra formale ammetta realizzazioni esplicite: in merito si veda per esempio [28]. Torneremo su questo problema quando discuteremo il teorema di Krebs e Sandow.

2.2.1 Il caso parzialmente asimmetrico

Considereremo ora il caso dell'ASEP, in cui le particelle possono saltare sia a destra sia a sinistra: è probabilmente la generalizzazione più immediata del TASEP a cui sperare di applicare con successo l'ansatz matriciale, tanto che già nel lavoro [22] sul TASEP questo modello era stato preso in considerazione. La dinamica è definita come segue:

$$\begin{aligned} (\cdots \bullet \circ \cdots) &\rightarrow (\cdots \circ \bullet \cdots) && \text{con frequenza } \Gamma_{01}^{10} = p_r \\ (\cdots \circ \bullet \cdots) &\rightarrow (\cdots \bullet \circ \cdots) && \text{con frequenza } \Gamma_{10}^{01} = p_l \\ [\circ \cdots] &\rightarrow [\bullet \cdots] && \text{con frequenza } L_1^0 = \alpha \\ (\cdots \bullet] &\rightarrow (\cdots \circ] && \text{con frequenza } R_0^1 = \beta, \end{aligned}$$

dove indichiamo con \bullet un sito occupato e con \circ una vacanza, e assumiamo che $p_r > p_l$ ⁸. Le equazioni (2.20)-(2.22) per questo sistema portano alle seguenti relazioni algebriche:

$$\begin{aligned} p_r DE - p_l ED &= D + E \\ D|V &= \frac{1}{\beta}|V) \\ (W|E &= \frac{1}{\alpha}(W|, \end{aligned} \tag{2.23}$$

dove, come per il TASEP, si è posto $M_0 = E$, $M_1 = D$. La consistenza di queste relazioni era stata dimostrata già nel lavoro [22], in cui ne veniva data una rappresentazione esplicita.

⁸Il caso simmetrico $p_r = p_l$ non rientra in questa analisi, e non si può ottenere come limite $p_l \rightarrow p_r$; avremo modo di parlarne in seguito, a proposito delle grandi deviazioni.

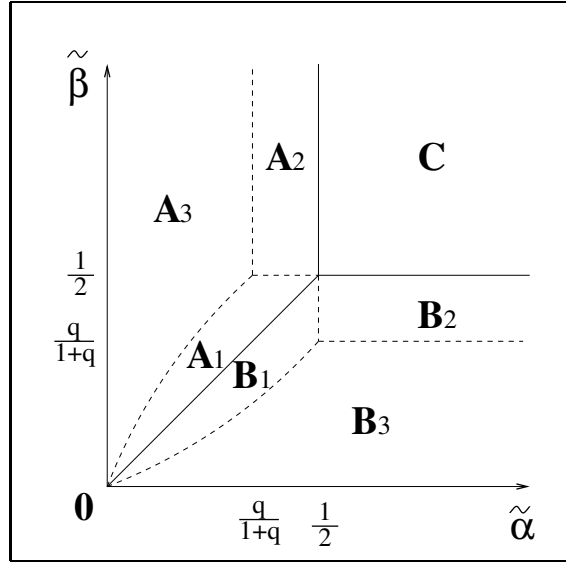


Figura 2.3: Diagramma di fase completo per l'ASEP. (da [29])

La corrente per questo sistema si scrive $J = p_R \langle \tau_i (1 - \tau_{i+1}) \rangle - p_L \langle \tau_i (1 - \tau_{i-1}) \rangle$, che per lo stato stazionario assume la stessa forma di quella del TASEP, $J = Z_{L-1}/Z_L$; tuttavia in questo caso una formula esplicita per la funzione di partizione Z_L che si presti a sviluppi asintotici per $L \rightarrow \infty$ non è affatto semplice da ottenere, e per ricavare il diagramma di fase si sono dovuti aspettare diversi anni: solo recentemente il problema è stato risolto [29, 30].

Per discutere il diagramma di fase, introduciamo le quantità $\tilde{\alpha} \equiv \alpha/(p_r - p_l)$, $\tilde{\beta} \equiv \beta/(p_r - p_l)$ e $q \equiv p_l/p_r$ (per noi $q < 1$).

Il diagramma di fase per la corrente coincide con quello del TASEP (dove si ricordi che $p_r = 1$, $p_l = 0$):

- (i) per $\tilde{\alpha} \geq \frac{1}{2}$ e $\tilde{\beta} \geq \frac{1}{2}$, $J = (p_r - p_l)/4$;
- (ii) per $\tilde{\alpha} < \frac{1}{2}$ e $\tilde{\beta} > \tilde{\alpha}$, $J = (p_r - p_l)\tilde{\alpha}(1 - \tilde{\alpha})$;
- (iii) per $\tilde{\beta} < \frac{1}{2}$ e $\tilde{\beta} < \tilde{\alpha}$, $J = (p_r - p_l)\tilde{\beta}(1 - \tilde{\beta})$.

Lo studio della lunghezza di correlazione ξ per il decadimento del profilo di densità in prossimità dei bordi si rivela invece più ricco del caso totalmente asimmetrico: mentre nella regione di massima corrente si continua ad avere $\xi = \infty$ (ossia il decadimento della densità è sempre algebrico), le regioni di bassa e alta densità A e B si dividono in tre differenti fasi. Introduciamo la funzione $g(x) \equiv x/[q + (1 - q)x]$. In

virtù della simmetria particelle-vacanze, ci limitiamo alla fase di bassa densità A , in cui si distinguono:

- una fase A_1 , per $\tilde{\beta} < \frac{1}{2}$ e $\tilde{\alpha} < \tilde{\beta} < g(\tilde{\alpha})$, in cui

$$\xi^{-1} = \ln \frac{\tilde{\beta}(1 - \tilde{\beta})}{\tilde{\alpha}(1 - \tilde{\alpha})};$$

- una fase A_2 , per $\beta > \frac{1}{2}$ e $q/(1 + q) < \tilde{\alpha} < \frac{1}{2}$, in cui

$$\xi^{-1} = -\ln 4\tilde{\alpha}(1 - \tilde{\alpha});$$

- una fase A_3 , per $\tilde{\beta} > g(\tilde{\alpha})$ e $\tilde{\alpha} < q/(1 + q)$, in cui

$$\xi^{-1} = \ln \frac{q}{[\tilde{\alpha} + (1 - \tilde{\alpha})q]^2}.$$

L'espressione di ξ nelle corrispondenti fasi di alta densità si ottengono sostituendo $\tilde{\alpha}$ con $\tilde{\beta}$. Il diagramma completo è riportato in figura 2.3.

2.2.2 Altri modelli risolti

Una delle caratteristiche più interessanti che emergono dallo studio dei processi a più specie è la formazione di *shocks*, ossia di marcate discontinuità tra due regioni adiacenti, una con alta densità e una con bassa densità di particelle. Ciò avviene per esempio se si considera un processo totalmente asimmetrico su un anello con la presenza, accanto alla particelle ordinarie, di particelle “di seconda classe”, che non possono superare le prime, mentre dal punto di vista delle particelle ordinarie esse sono come delle vacanze; questo modello è stato risolto esattamente in [33], mediante una semplice generalizzazione del metodo che abbiamo appena visto per il TASEP, ed è stato ricavato esplicitamente il profilo degli *shocks*.

Uno *shock* può essere provocato in modo più diretto introducendo un sistema con un legame “lento” $[i_0, i_0 + 1]$, in cui la frequenza di attraversamento r di questo legame sia minore di quella degli altri legami (siamo nel caso totalmente asimmetrico). Questo modello non è stato risolto esattamente, ma un'analisi di campo medio confermata da simulazioni Monte Carlo [36] prevede la formazione di *shocks* macroscopici quando r è minore di un valore critico r_c . È stata anche studiata l'ampiezza dello *shock* in funzione della lunghezza L del sistema, evidenziando che scala come $L^{1/3}$ o $L^{1/2}$, a seconda che la densità di particelle sia pari a $1/2$ o no (e dunque il sistema possieda o no simmetria per scambio particelle-vacanze).

Uno sviluppo interessante del modello con particelle di seconda classe, ancora esattamente risolubile con l'ansatz matriciale, è stato studiato da Mallick in [34]: si tratta di un ASEP su un anello in cui è presente una "impurità", ossia una particella con dinamica differente dalle altre. Le particelle ordinarie saltano a destra con frequenza unitaria se il sito è libero e scavalcano l'impurità con frequenza β , mentre l'impurità salta a destra con frequenza α se il sito è libero:

$$\begin{aligned} 10 &\longrightarrow 01 && \text{con frequenza } 1 \\ 20 &\longrightarrow 02 && \text{con frequenza } \alpha \\ 12 &\longrightarrow 21 && \text{con frequenza } \beta, \end{aligned}$$

dove con 0, 1 e 2 indichiamo rispettivamente le vacanze e le particelle di prima e di seconda classe. Le condizioni al bordo periodiche preservano l'invarianza per traslazioni della dinamica; sfruttando questo fatto, a meno di rinominare i siti possiamo supporre che l'impurità sia sempre nel primo sito. In questo caso l'ansatz matriciale assume la forma⁹

$$f_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = \text{Tr} \left[A \prod_{k=1}^L (\tau_k D + (1 - \tau_k) E) \right].$$

La condizione che la misura f_L sia stazionaria si traduce nelle seguenti relazioni algebriche per le matrici D , E ed A :

$$\begin{aligned} DE &= D + E \\ DA &= \frac{1}{\beta} A \\ AE &= \frac{1}{\alpha} E. \end{aligned}$$

È evidente lo stretto legame che c'è con le (2.7)-(2.9): è sufficiente porre $A = |V\rangle\langle W|$. La derivazione analitica di formule esatte per le osservabili di interesse è in questo caso più laboriosa, a causa del vincolo di conservazione del numero di particelle, ma ancora praticabile; nell'articolo [34] viene studiato il comportamento nel limite termodinamico (mantenendo costante la densità) della velocità V dell'impurità, della corrente J delle particelle di prima classe e del profilo di densità, con la relativa

⁹Nel generico caso di condizioni periodiche, l'ansatz (2.19) è modificato in

$$f_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = \text{Tr} \left[\prod_{k=1}^L M_{\tau_k} \right].$$

lunghezza di correlazione per il decadimento in prossimità dell'impurità. Si scopre che il diagramma di fase per questo sistema è composto di sei regioni, in una delle quali il profilo presenta uno *shock*, la cui ampiezza scala con la dimensione del reticolo come $L^{1/2}$, indipendentemente dalla densità di particelle nel sistema.

2.2.3 Il teorema di Krebs e Sandow

Passiamo ora ad esporre la generalizzazione dell'ansatz matriciale proposta da Krebs e Sandow [27] con l'intento di scoprire le condizioni per cui lo stato stazionario di un generico sistema stocastico con N specie di particelle, su reticolo unidimensionale e con condizioni al bordo aperte possa essere espresso in termini di un prodotto di matrici. Ci limiteremo ai sistemi con dinamica locale, nel senso che le "mosse elementari" che determinano l'evoluzione temporale modificano la configurazione del sistema solo in una coppia di siti adiacenti¹⁰ $[i, i + 1]$, e supporremo inoltre che le frequenze di queste transizioni non dipendano da i . In altre parole, $w_{C \rightarrow C'} \neq 0$ solo se $C' = C^{i, i+1}$, e il sistema è completamente determinato assegnando le frequenze $\Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$, $L_{\tau_1}^{\sigma_1}$ e $R_{\tau_L}^{\sigma_L}$. Riscriviamo la Master Equation (2.4) nel nostro caso a N specie:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_t(\tau_1, \dots, \tau_L) = & \sum_{k=1}^L \sum_{\sigma_k, \sigma_{k+1}=0}^{N-1} \Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_k, \sigma_{k+1}} P_t(\tau_1, \dots, \tau_{k-1}, \sigma_k, \sigma_{k+1}, \dots, \tau_L) + \\ & + \sum_{\sigma_1=0}^{N-1} L_{\tau_1}^{\sigma_1} P_t(\sigma_1, \tau_2, \dots, \tau_L) + \sum_{\sigma_L=0}^{N-1} R_{\tau_L}^{\sigma_L} P_t(\tau_1, \dots, \tau_{L-1}, \sigma_L). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Riprendiamo la notazione introdotta all'inizio del capitolo, in cui le diverse configurazioni del sistema $\{|\tau_1, \dots, \tau_L\rangle\}$ sono la base di uno spazio di Hilbert \mathcal{V} . Nel nostro caso le configurazioni sono le L -uple (τ_1, \dots, τ_L) , con $\tau_i = 0, \dots, N - 1$, e dunque lo spazio \mathcal{V} si decompone come prodotto di spazi di singolo sito \mathcal{V}_i , generati da $\{|0\rangle_i, \dots, |N - 1\rangle_i\}$:

$$\mathcal{V} = \bigotimes_{i=1}^L \mathcal{V}_i, \quad |\tau_1, \dots, \tau_L\rangle = |\tau_1\rangle_1 \otimes \dots \otimes |\tau_L\rangle_L.$$

A causa della località della dinamica, l'operatore di evoluzione \mathcal{H} ha elementi di matrice non nulli solo tra configurazioni che differiscono in una coppia di siti adiacenti. Questo fatto può essere messo in evidenza introducendo un operatore h che agisca

¹⁰Esiste una generalizzazione del teorema di Krebs e Sandow al caso in cui l'interazione abbia raggio finito, si veda [31].

su $\mathcal{V}_i \otimes \mathcal{V}_{i+1}$ e due operatori $h^{(l)}$ e $h^{(r)}$ che agiscono rispettivamente su \mathcal{V}_1 e \mathcal{V}_L come segue:

$$\begin{aligned} \langle \tau_i, \tau_{i+1} | h | \sigma_i, \sigma_{i+1} \rangle &\equiv -\Gamma_{\tau_i, \tau_{i+1}}^{\sigma_i, \sigma_{i+1}} \\ \langle \tau_1 | h^{(l)} | \sigma_1 \rangle &\equiv -L_{\tau_1}^{\sigma_1} \quad \langle \tau_L | h^{(r)} | \sigma_L \rangle \equiv -R_{\tau_L}^{\sigma_L}. \end{aligned}$$

Indicando con I l'operatore identità sullo spazio di singolo sito, \mathcal{H} si scrive

$$\mathcal{H} = h^{(l)} \otimes I^{\otimes L-1} + \sum_{i=1}^{L-1} I^{\otimes i-1} \otimes h \otimes I^{\otimes L-i-1} + I^{\otimes L-1} \otimes h^{(r)}. \quad (2.25)$$

Il nostro obiettivo sarà di caratterizzare gli autostati di \mathcal{H} con autovalore nullo, ossia le soluzioni stazionarie della Master Equation, che in funzione di \mathcal{H} si scrive

$$\frac{d}{dt} |P_t\rangle = -\mathcal{H} |P_t\rangle, \quad (2.26)$$

dove ricordiamo che $|P_t\rangle \equiv \sum_c P_t(C) |C\rangle$, ovvero

$$|P_t\rangle \equiv \sum_{\tau_1, \dots, \tau_L=0}^{N-1} P_t(\tau_1, \dots, \tau_L) |\tau_1, \dots, \tau_L\rangle. \quad (2.27)$$

Come abbiamo già notato, la (2.26) richiama l'equazione di Schroedinger. In effetti la notazione che abbiamo usato per descrivere l'evoluzione di sistemi stocastici su reticolo si presta perfettamente alla descrizione dell'evoluzione quantistica di una catena di spin. Immaginiamo che in ogni sito del nostro reticolo unidimensionale sia posta una particella di spin s ; supponiamo che il sistema sia soggetto a interazioni solo tra particelle adiacenti, e inoltre siano presenti dei campi ai bordi, che agiscono sui siti 1 e L . Allora lo spazio di Hilbert di questo sistema quantistico sarà proprio \mathcal{V} (lo spazio di singolo sito avrà dimensione $N = 2s + 1$) e l'Hamiltoniana \mathcal{H} che ne determina l'evoluzione temporale sarà della forma (2.25). Una differenza è naturalmente che, nel caso di una catena di spin, l'Hamiltoniana \mathcal{H} è un operatore hermitiano, mentre in generale non ha la proprietà delle matrici stocastiche per cui si annulla la somma degli elementi di ciascuna colonna.

In tutte le considerazioni che verranno fatte nel seguito, la sola proprietà che verrà richiesta a \mathcal{H} sarà quella di avere, per ogni lunghezza L del reticolo, (almeno) uno stato fondamentale di energia zero. Come abbiamo visto, le matrici stocastiche godono automaticamente di tale proprietà, mentre ciò in generale non vale per le matrici hermitiane; se però consideriamo una catena di spin per cui sappiamo essere verificata l'ipotesi, ad essa si può applicare il teorema che andiamo a enunciare.

Introduciamo una famiglia $\{M_\tau, \tau = 0, \dots, N-1\}$ di operatori che agiscono su uno spazio ausiliario¹¹ e due vettori $|V\rangle, |W\rangle$ di tale spazio. Vogliamo capire quando è possibile esprimere la misura stazionaria nella forma

$$f_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = \langle W | \prod_{k=1}^L M_{\tau_k} | V \rangle, \quad (2.28)$$

dove gli operatori M_τ soddisfino delle opportune relazioni algebriche. Il seguente teorema dà in merito una risposta esauriente.

Teorema 1 *Sia data una Hamiltoniana \mathcal{H} della forma (2.25), che ammetta uno stato fondamentale per ogni valore della lunghezza L ; siano inoltre $\{M_\tau\}$ e $\{X_\tau\}$, $\tau = 0, \dots, N-1$, due famiglie di operatori su uno spazio ausiliario.*

(i) *Se sono soddisfatte le seguenti relazioni:*

$$\sum_{\mu, \nu=0}^{N-1} \Gamma_{\sigma\tau}^{\mu\nu} M_\mu M_\nu = M_\sigma X_\tau - X_\tau M_\sigma, \quad (2.29)$$

$$\langle W | X_\alpha = \sum_{\nu=0}^{N-1} L_\alpha^\nu \langle W | M_\nu \quad \text{e} \quad X_\alpha | V \rangle = \sum_{\nu=0}^{N-1} R_\alpha^\nu M_\nu | V \rangle, \quad (2.30)$$

con $\sigma, \tau, \alpha = 0, \dots, N-1$, allora la misura f_L definita dalla (2.28) è stazionaria per la Master Equation (2.26), ossia $\mathcal{H} | f_L \rangle = 0$.

(ii) *Viceversa, per ogni misura stazionaria f_L , è possibile scegliere gli operatori M_τ , X_τ e i vettori $|V\rangle, |W\rangle$ in modo che valga la (2.28) e siano inoltre soddisfatte le relazioni (2.29)-(2.30).*

In questo senso, la misura stazionaria di *qualsunque* sistema è esprimibile nella forma di un prodotto di matrici, come in (2.28); l'algebra (2.29)-(2.30) cui devono soddisfare queste matrici è una evidente generalizzazione dell'algebra (2.20)-(2.22) ricavata in precedenza. Questa generalizzazione non è indolore: nel sostituire i coefficienti x_τ con gli operatori X_τ , oltre ad aumentare la complessità del problema, si perdono fatalmente le relazioni di ricorsione per le misure stazionarie relative a sistemi di differenti lunghezze, che erano state uno dei punti fondamentali per giungere a una soluzione esplicita dell'ASEP.

¹¹Questo spazio non ha niente a che vedere con lo spazio \mathcal{V} .

La (i) si dimostra per diretta sostituzione della (2.28) nella Master Equation (2.24): le relazioni (2.29)-(2.30) producono una cancellazione telescopica, del tutto analoga a quanto già visto nel caso del TASEP.

La dimostrazione della (ii) si ottiene costruendo una rappresentazione esplicita degli operatori e dei vettori su una sorta di “spazio di Fock”. È interessante in merito notare che la costruzione di due famiglie di operatori $\{M_\tau\}$, $\{X_\tau\}$ che soddisfino le relazioni (2.29) non presenta problemi di alcun genere, ed è possibile per valori arbitrari delle grandezze $\Gamma_{\sigma\tau}^{\mu\nu}$: un'algebra associativa generata da $2N$ operatori che soddisfino N^2 relazioni quadratiche è sempre un oggetto matematico ben definito. La parte non banale della costruzione è la definizione dei vettori $|V\rangle$ e $|W\rangle$ in modo che siano soddisfatte le (2.30), e in questo passaggio si usano esplicitamente i pesi della misura stazionaria $f_L(\tau_1, \dots, \tau_L)$; per maggiori dettagli, si rimanda a [27].

Quindi, nel caso in cui la misura invariante non sia nota, la costruzione presentata nella dimostrazione non è di alcun aiuto ai fini di trovare realizzazioni concrete dell'algebra. D'altro canto queste realizzazioni sono necessarie per una soluzione esatta del problema mediante l'ansatz matriciale (2.28): le relazioni (2.29)-(2.30) da sole non sono più sufficienti, come era invece per il TASEP, perché l'essere passati dai coefficienti x_τ agli operatori X_τ non permette più di esprimere in modo semplice i pesi $f_L(\tau_1, \dots, \tau_L)$ in funzione dei pesi $f_{L-1}(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1})$.

Concludiamo menzionando un caso in cui è stata ottenuta una soluzione esplicita di un'algebra non banale del tipo (2.29)-(2.30), che si trova in [32], dove viene data la soluzione esatta di un processo di esclusione totalmente asimmetrico a quattro specie con condizioni al bordo periodiche; l'algebra per questo sistema viene costruita come prodotto tensore di algebre più semplici, tra cui quella dell'ASEP (2.7)-(2.9) che abbiamo discusso in precedenza. La soluzione è “esatta” nel senso che, disponendo di una forma esplicita per le matrici, si può conoscere la probabilità di una generica configurazione nello stato stazionario; tuttavia, ottenere da ciò espressioni asintotiche nel limite termodinamico non è affatto semplice.

2.3 Grandi deviazioni

Nell'analisi delle proprietà termodinamiche di un sistema, grande importanza riveste lo studio delle fluttuazioni: accanto alla conoscenza dei valori medi delle osservabili del sistema, è di fondamentale interesse sapere quanto sono probabili scostamenti da tali valori.

Nella meccanica statistica all'equilibrio oggetto centrale di una simile analisi è l'energia libera. Mancando un quadro teorico generale per i sistemi fuori dall'equilibrio, non stupiscono le difficoltà che si incontrano nella determinazione di un'equivalente oggetto (noto in letteratura come *funzionale di grandi deviazioni*), che misuri la probabilità di una fluttuazione macroscopica dallo stato stazionario. Tali difficoltà sorgono dal fatto che, come in parte abbiamo già avuto modo di notare, gli stati stazionari di non equilibrio manifestano correlazioni a lungo raggio anche lontano dalle transizioni di fase.

Alla luce di ciò si comprende il grande interesse suscitato alcuni mesi fa da due lavori a opera di Derrida, Lebowitz e Speer [37, 38], in cui viene riportata la derivazione esatta del funzionale di grandi deviazioni per il processo di esclusione unidimensionale con condizioni al bordo aperte, nei casi simmetrico e parzialmente asimmetrico¹²: al primo di questi lavori è dedicato l'articolo di Ruelle [1] citato nell'Introduzione. I risultati di questi modelli forniscono informazioni preziose sulle caratteristiche dei sistemi fuori dall'equilibrio, come avremo modo di discutere approfonditamente. Ma prima di tutto passiamo ad esporre lo studio delle deviazioni per i sistemi all'equilibrio, evidenziando il ruolo che gioca l'energia libera; le relazioni che deriveremo ci saranno utili più avanti.

2.3.1 Deviazioni per sistemi all'equilibrio

Consideriamo un sistema di particelle indistinguibili in un volume V , all'equilibrio termodinamico. Sia $\Gamma_V = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \Gamma_{(N,V)}$ il suo spazio degli stati (spazio di Fock), e indichiamo con \mathcal{H} e \mathcal{N} rispettivamente gli operatori Hamiltoniana e numero di particelle. La meccanica statistica di questo sistema sarà descritta dall'ensemble grancanonico (si potrebbe usare indifferentemente l'ensemble microcanonico o canonico), ossia dall'operatore statistico $\exp[-\beta(\mathcal{H} - \mu\mathcal{N})]$ su Γ . Ricordiamo che

$$Z \equiv \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu\mathcal{N})} = e^{-\beta\Omega(\beta, V, \mu)}, \quad (2.31)$$

dove $\Omega(\beta, V, \mu)$ è il granpotenziale (energia libera grancanonica), trasformata di Legendre dell'energia libera di Helmholtz $F(\beta, V, N)$ rispetto a N :

$$\begin{aligned} \Omega(\beta, V, \mu) &= F(\beta, V, \bar{N}(\beta, V, \mu)) - \mu\bar{N}(\beta, V, \mu), \\ \frac{\partial F}{\partial N}(\beta, V, \bar{N}(\beta, V, \mu)) &= \mu. \end{aligned} \quad (2.32)$$

¹²È interessante notare come il caso simmetrico *non* sia ottenibile come limite del caso parzialmente asimmetrico: il limite $p_r \rightarrow p_l$ non commuta col limite termodinamico $L \rightarrow \infty$.

D'ora in avanti considereremo valori delle grandezze (β, V, μ) che non corrispondano a transizioni di fase per il sistema. Siamo interessati alla distribuzione del numero di particelle:

$$\begin{aligned} \text{Prob}_{(\beta, V, \mu)} [\mathcal{N} = N] &= \frac{\text{Tr}[e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu\mathcal{N})} | \mathcal{N} = N]}{Z} = \frac{e^{\beta\mu N} \text{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}} | \mathcal{N} = N]}{Z} = \\ &= \frac{e^{-\beta(F(\beta, V, N) - \mu N)}}{Z} = \frac{e^{-\beta\tilde{\Omega}_{\beta, V, \mu}(N)}}{Z}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

dove nella terza uguaglianza è stata introdotta la funzione di partizione canonica, $Z_c = \exp(-\beta F(\beta, V, N))$.

Si è posto $\tilde{\Omega}_{\beta, V, \mu}(N) \equiv F(\beta, V, N) - \mu N$. Questa grandezza giocherà un ruolo fondamentale nel seguito: è il “granpotenziale”¹³ di un sistema caratterizzato da (β, V, μ) , quando il numero di particelle nel sistema non è necessariamente quello medio $\bar{N} = \bar{N}(\beta, V, \mu)$: si veda la (2.32). Per proprietà della trasformata di Legendre, $\tilde{\Omega}$ assume il suo valore minimo proprio per $N = \bar{N}$, dove vale $\Omega(\beta, V, \mu)$.

Essendo $\tilde{\Omega}$ una grandezza estensiva, si può scrivere $\tilde{\Omega}_{\beta, V, \mu}(N) \equiv V \xi_{\beta, \mu}(\rho)$, dove $\rho \equiv N/V$: abbiamo introdotto la densità di granpotenziale ξ , che altro non è che la pressione. Se si introduce $\bar{\rho} \equiv \bar{N}(\beta, V, \mu)/V$, si ha che $\Omega(\beta, V, \mu) = V \xi_{\beta, \mu}(\bar{\rho})$. Per alleggerire la notazione ometteremo la dipendenza dalla temperatura (che per noi sarà fissa), $\xi_{\mu}(\rho) \equiv \xi_{\beta, \mu}(\rho)$.

Dalla (2.31) si ha che $Z = \exp(-\beta V \xi_{\mu}(\bar{\rho}))$; introducendo l'operatore $\boldsymbol{\rho} \equiv \mathcal{N}/V$, possiamo riscrivere la (2.33) nella forma:

$$\text{Prob}_{\mu}[\boldsymbol{\rho} = \rho] \equiv \text{Prob}_{(\beta, V, \mu)}[\mathcal{N} = N] = e^{-\beta V(\xi_{\mu}(\rho) - \xi_{\mu}(\bar{\rho}))}. \quad (2.34)$$

Questa formula è estremamente importante: la probabilità di osservare una densità diversa da quella media è depressa in modo esponenziale nel limite termodinamico $V \rightarrow \infty$. L'ampiezza di questa depressione è determinata dalla densità di energia libera grancanonica ξ : la densità media $\bar{\rho}$ di particelle sistema è quella che minimizza ξ ¹⁴. Da questa espressione è inoltre possibile avere informazioni sulle fluttuazioni, ossia sulle piccole deviazioni dal valore di equilibrio: ponendo $\rho = \bar{\rho} + u/\sqrt{N}$ e sviluppando ξ attorno al suo minimo, $\xi(\rho) \simeq \xi(\bar{\rho}) + (\rho - \bar{\rho})^2/2C$, si ottiene che la distribuzione per $u(x)$ è gaussiana, con varianza $C = [\partial^2 \xi / \partial \rho^2(\bar{\rho})]^{-1}$.

¹³Per essere precisi, questo è il “granpotenziale” nell'ensemble canonico, che coincide con quello dell'ensemble grancanonico nel limite termodinamico *in assenza di transizioni di fase*: è questa la ragione di tale richiesta.

¹⁴Ricordiamo che $\xi_{\beta, \mu}(\rho)$ è una funzione convessa di ρ ; inoltre, per valori di (β, μ) che non corrispondono a transizioni di fase, il punto di minimo $\bar{\rho}$ è unico.

Vogliamo ora determinare la probabilità di osservare un arbitrario profilo di densità, nel limite termodinamico. Più precisamente, immaginiamo che il volume V del sistema sia un ipercubo d -dimensionale di lato L ; nel limite termodinamico $\{L \rightarrow \infty, \bar{\rho} = \text{cost}\}$ il numero medio di particelle del sistema $\bar{N} = \bar{\rho}V$ diverge: possiamo dunque approssimare le configurazioni, riportate con un'omotetia nell'ipercubo unitario $\mathbf{Q} = [0, 1]^d$, con le funzioni $\rho(x)$, $x \in \mathbf{Q}$.

Suddividiamo il volume V in k sottovolumi V_i ; a causa dell'indistinguibilità delle particelle, lo spazio degli stati si può fattorizzare: $\Gamma_V = \bigotimes_{i=1}^k \Gamma_{V_i}$. L'operatore numero di particelle si può scrivere $\mathcal{N} = \sum_{i=1}^k \mathcal{N}_i$ e, trascurando effetti di bordo che non contribuiscono nel limite termodinamico, anche per l'Hamiltoniana è possibile una simile decomposizione: $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^k \mathcal{H}_i$. In virtù di ciò, l'operatore statistico si fattorizza come prodotto di operatori che agiscono sui Γ_{V_i} ,

$$e^{-\beta(\mathcal{H}-\mu\mathcal{N})} = \bigotimes_{i=1}^k e^{-\beta(\mathcal{H}_i-\mu\mathcal{N}_i)}.$$

Possiamo dunque calcolare la probabilità di osservare una configurazione del sistema caratterizzata da un numero di particelle N_i (o equivalentemente da una densità $\rho_i \equiv N_i/V_i$) nel volume V_i : ricordando la (2.34) si ha

$$\begin{aligned} \text{Prob}[\{\rho_i = \rho_i\}] &= Z^{-1} \text{Tr}[e^{-\beta(\mathcal{H}-\mu\mathcal{N})} | \rho_i = \rho_i] = Z^{-1} \prod_{i=1}^k \text{Tr}_i[e^{-\beta(\mathcal{H}_i-\mu\mathcal{N}_i)} | \rho_i = \rho_i] = \\ &= Z^{-1} \prod_{i=1}^k e^{-\beta V_i \xi_\mu(\rho_i)} = Z^{-1} \exp \left[-\beta V \sum_{i=1}^k \xi_\mu(\rho_i) V_i/V \right]. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Riscaliamo ora il volume del sistema di un fattore V : i sottovolumi V_i vengono mandati nelle corrispondenti regioni dell'ipercubo unitario \mathbf{Q} , che denotiamo con V_i/V . Associamo alla configurazione $\{\rho_i\}$ la corrispondente funzione $\rho(x)$, con $\rho(x) \equiv \rho_i$ per $x \in V_i/V$. Ricordando che $Z = \exp(-\beta V \xi_\mu(\bar{\rho}))$, possiamo riscrivere la (2.35) nella seguente forma:

$$\text{Prob}[\rho(x)] = \exp \left[-\beta V \int_{\mathbf{Q}} dx (\xi_\mu(\rho(x)) - \xi_\mu(\bar{\rho})) \right]. \quad (2.36)$$

Questa formula costituisce la generalizzazione cercata. Si ritrovano in essa in forma più generale i contenuti della (2.34): nel limite termodinamico, le deviazioni dal profilo di equilibrio $\rho(x) = \bar{\rho}$ sono depresse esponenzialmente¹⁵; a determinare il

¹⁵La (2.36) è stata ricavata per funzioni indicatrici, ma si applica naturalmente a ogni generica funzione (misurabile) $\rho(x)$, approssimabile con indicatrici.

decadimento è il *funzionale di grandi deviazioni* \mathcal{F} ,

$$\mathcal{F}\{\rho(x)\} \equiv \int_{\mathcal{Q}} dx (\xi_{\mu}(\rho(x)) - \xi_{\mu}(\bar{\rho})) = - \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\ln(\text{Prob}_V[\rho(x)])}{\beta V}. \quad (2.37)$$

\mathcal{F} è un *funzionale locale*: se dividiamo \mathcal{Q} in due sottoinsiemi, il valore che il funzionale relativo a \mathcal{Q} assume su una $\rho(x)$ è pari alla somma dei valori che i funzionali relativi ai due sottoinsiemi assumono sulle restrizioni di $\rho(x)$. Ciò è dovuto al fatto che, nel limite termodinamico, la probabilità per l'intero sistema si fattorizza nel prodotto delle probabilità per i sottosistemi: questa proprietà di indipendenza è una manifestazione esplicita dell'assenza di correlazioni a lungo raggio nei sistemi all'equilibrio termodinamico (in assenza di transizioni di fase). Come vedremo, nel caso dell'ASEP questa proprietà di località andrà persa: ciò non stupisce, tenendo conto che, per i sistemi fuori dall'equilibrio, correlazioni a lungo raggio nello stato stazionario sono presenti per valori generici dei parametri. \mathcal{F} è inoltre un *funzionale convesso* di $\rho(x)$, come segue dalla convessità di ξ_{μ} .

Le piccole fluttuazioni si possono ancora ottenere sviluppando \mathcal{F} attorno al suo minimo: ponendo $\rho(x) = \bar{\rho} + u(x)/\sqrt{N}$, la legge di $u(x)$ è gaussiana, con covarianza $C(x, x')$, dove $C^{-1}(x, x') = \delta^2 \mathcal{F} / \delta \rho(x) \delta \rho(x')$.

Prima di passare all'analisi dell'ASEP, specializziamo la costruzione ora esposta a un semplice sistema di particelle all'equilibrio su reticolo unidimensionale, non interagenti al di fuori dell'esclusione *hard-core*. Lo spazio degli stati è $\Gamma_L = \{0, 1\}^{\{1, 2, \dots, L\}}$, su cui (essendo $\mathcal{H} = 0$) mettiamo la misura grancanonica $\exp(\mu \mathcal{N})$.

Notiamo che $\Gamma_L = \prod_{i=1}^L \{0, 1\}_i$; la misura $\exp(\mu \mathcal{N})$ su Γ_L è una misura prodotto: ogni sito è occupato indipendentemente dagli altri con probabilità

$$\text{Prob}[\tau_i = 1] = e^{\mu} / (1 + e^{\mu}) \equiv \bar{\rho}, \quad (2.38)$$

che è dunque la densità media del sistema. Invertendo la relazione possiamo esprimere μ in funzione di $\bar{\rho}$,

$$\mu = \ln[\bar{\rho} / (1 - \bar{\rho})], \quad (2.39)$$

grazie a cui la funzione di partizione si può scrivere

$$Z = \int_{\Gamma_L} \exp(\mu \mathcal{N}) = (1 + e^{\mu})^L = e^{L \ln(1 + e^{\mu})}.$$

Questo sistema è un po' singolare, mancando l'energia e la temperatura (formalmente si ha $\beta = 1$): svolgendo i calcoli esplicitamente si scopre però che è possibile

ottenere il funzionale di grandi deviazioni seguendo la procedura esposta in precedenza, con qualche adattamento. Occorre determinare la densità di energia libera gran canonica. L'entropia per il sistema è

$$S = k \ln \left(\frac{L}{N} \right) \simeq -kL f(\rho) \quad \text{per } L, N \rightarrow \infty$$

$$f(\rho) = \rho \ln \rho + (1 - \rho) \ln(1 - \rho),$$

dove N è il numero di particelle della configurazione e k la costante di Boltzmann. Dato che $\Omega = U - S/(\beta k) + \mu N$, per la densità di granpotenziale¹⁶ si ha

$$\xi(\rho) \equiv \frac{\tilde{\Omega}}{L} = f(\rho) - \mu\rho, \quad \rho \equiv \frac{N}{L}.$$

Esprimendo μ in funzione di $\bar{\rho}$ come nella (2.39), dalla (2.36) si ottiene infine l'espressione per il funzionale cercato (riscritta per l'intervallo $[a, b]$ invece che per $[0, 1]$):

$$\mathcal{F}_{eq}\{\rho(x)\} = \frac{1}{b-a} \int_a^b dx \left[\rho(x) \ln \frac{\rho(x)}{\bar{\rho}} + (1 - \rho(x)) \ln \frac{1 - \rho(x)}{1 - \bar{\rho}} \right]. \quad (2.40)$$

2.3.2 Il processo di esclusione simmetrico

Il problema delle deviazioni dal profilo tipico per sistemi fuori dall'equilibrio (nello stato stazionario) non presenta difficoltà concettuali: la definizione del funzionale di grandi deviazioni (LDF) è quella data nel paragrafo precedente per i sistemi all'equilibrio,

$$\mathcal{F}\{\rho(x)\} \equiv - \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\ln(\text{Prob}_V[\rho(x)])}{\beta V}. \quad (2.41)$$

La differenza è che in questo caso la misura invariante è determinata dalla dinamica e non è facile in generale conoscerla esplicitamente; d'altro canto questa conoscenza è indispensabile per calcolare \mathcal{F} .

Sfruttando l'ansatz matriciale, che fornisce una tecnologia efficiente per esprimere i pesi dello stato stazionario, è possibile ottenere la forma esplicita del LDF per il processo di esclusione semplice unidimensionale simmetrico, [37].

Il caso simmetrico (in cui, con le notazioni del Paragrafo (2.2.1), $p_r = p_l$) non è stato da noi trattato, per una duplice ragione: da un lato questo sistema presenta minore interesse poiché, a causa della simmetria della dinamica interna, non

¹⁶Nel nostro sistema il limite termodinamico si ottiene mandando all'infinito L , che fa le veci del volume, a densità $\bar{\rho}$ costante.

si evidenziano transizioni di fase, dall'altro esso non è ricavabile come limite del caso parzialmente asimmetrico per $p_r \rightarrow p_l$ (questo limite non commuta col limite termodinamico $L \rightarrow \infty$). Tuttavia esso presenta correlazioni a lungo raggio nello stato stazionario e per questo si rivela interessante ai fini delle deviazioni dal comportamento tipico: da ciò derivano importanti proprietà, come vedremo.

Generalizziamo le condizioni al bordo: ammetteremo che le particelle vengano immesse anche all'estremità destra, con frequenza δ , e vengano estratte anche a quella sinistra, con frequenza γ . Introduciamo le grandezze $\rho_0 \equiv \alpha/(\alpha + \gamma)$ e $\rho_1 \equiv \delta/(\delta + \beta)$: l'effetto delle condizioni al bordo può essere pensato come derivante dall'aver posto le estremità del sistema in contatto con due riserve di particelle, con densità ρ_0 e ρ_1 . La giustificazione di ciò risiede nell'osservazione che, se mettessimo il nostro sistema in contatto solo con la riserva destra (risp. sinistra), ponendo $\delta = \beta = 0$ (risp. $\alpha = \gamma = 0$), la misura stazionaria sarebbe la misura prodotto $\exp(\mu\mathcal{N})$ introdotta alla fine del paragrafo precedente, in cui ogni sito è occupato indipendentemente dagli altri con probabilità ρ_1 (risp. ρ_0). Nel caso generale in cui $\rho_0 \neq \rho_1$, il profilo di densità medio nel sistema risulta lineare, assumendo come valori estremi ρ_0 e ρ_1 : $\rho(x) = \rho_0(1 - x) + \rho_1 x$.

Il punto fondamentale per ottenere il LDF è determinare il comportamento asintotico nel limite termodinamico dei pesi $f_{N_1, \dots, N_n}(M_1, \dots, M_n)$ relativi ad avere N_1 particelle nei primi M_1 siti, N_2 particelle nei successivi M_2 siti, ecc. Ciò è possibile perché la corrispondente funzione generatrice

$$\begin{aligned} Z(\lambda_1, \dots, \lambda_n; \mu_1, \dots, \mu_n) &\equiv \sum \frac{\mu_1^{N_1}}{N_1!} \dots \frac{\mu_n^{N_n}}{N_n!} \lambda_1^{N_1} \dots \lambda_n^{N_n} \frac{f_{N_1, \dots, N_n}(M_1, \dots, M_n)}{(W|V)} = \\ &= \frac{(W|e^{\mu_1 \lambda_1 D + \mu_1 E} \dots e^{\mu_n \lambda_n D + \mu_n E}|V)}{(W|V)} \end{aligned}$$

è calcolabile esattamente a partire dalle relazioni algebriche (2.23) (con $p_l = p_r$) che definiscono D , E , $(W|$ e $|V)$. Non riporteremo i calcoli necessari per ricavare la forma esplicita di Z né quelli (assai più laboriosi) per ottenere il comportamento asintotico dei pesi $f_{N_1, \dots, N_n}(M_1, \dots, M_n)$, per i quali si rimanda a [37]: discuteremo piuttosto i risultati e le conseguenze che ne derivano.

La forma esplicita del funzionale di grandi deviazioni è:

$$\mathcal{F}\{\rho(x)\} = \int_0^1 dx \left[\rho(x) \ln \frac{\rho(x)}{F(x)} + (1 - \rho(x)) \ln \frac{1 - \rho(x)}{1 - F(x)} + \ln \frac{F'(x)}{\rho_1 - \rho_0} \right], \quad (2.42)$$

dove $F(x)$ è una funzione ausiliaria determinata da $\rho(x)$: è la soluzione monotona

dell'equazione differenziale

$$\rho(x) = F(x) + \frac{F(x)[1 - F(x)]F''(x)}{F'(x)^2}, \quad (2.43)$$

con le condizioni al bordo

$$F(0) = \rho_0, \quad F(1) = \rho_1. \quad (2.44)$$

Si dimostra che tale soluzione esiste ed è (almeno per $\rho_0 < 1$ e $\rho_1 > 0$) unica.

[Se indichiamo con $\mathcal{G}\{\rho(x), F(x)\}$ il secondo membro della (2.42), pensato come funzionale di due funzioni indipendenti $\rho(x)$, $F(x)$, si scopre che l'equazione differenziale (2.43) non è altro che l'equazione di Eulero-Lagrange per \mathcal{G} , $\delta\mathcal{G}/\delta F(x) = 0$; più precisamente, $\mathcal{F}\{\rho(x)\} = \sup_{F(x)} \mathcal{G}\{\rho(x), F(x)\}$, tra le $F(x)$ monotone che soddisfino le (2.44).]

Dalla definizione generale di funzionale di grandi deviazioni, segue che nel limite termodinamico il sistema presenta un profilo di densità in corrispondenza del quale il LDF assume il suo valore minimo: i profili per cui $\mathcal{F}(\rho(x)) > (\min \mathcal{F})$ sono depressi esponenzialmente. Imponendo la stazionarietà $\delta\mathcal{F}/\delta\rho(x) = 0$, si scopre che c'è un solo profilo che minimizza \mathcal{F} ,

$$\bar{\rho}(x) = \rho_0(1 - x) + \rho_1 x,$$

ritrovando così un risultato già noto.

Come per i sistemi all'equilibrio, \mathcal{F} è un funzionale convesso di $\rho(x)$. Per evidenziare le caratteristiche nuove che emergono dall'espressione (2.42), consideriamo una situazione di *equilibrio locale* per un sistema come il nostro, ma senza riserve di particelle alle estremità e con un potenziale chimico $\mu(x)$ variabile spazialmente, in modo da mantenere lo stesso profilo ottimale $\bar{\rho}(x)$. Il LDF per questo sistema è (si confronti la (2.40)):

$$\mathcal{F}_{eq}\{\rho(x)\} = \int_0^1 dx \left[\rho(x) \ln \frac{\rho(x)}{\bar{\rho}(x)} + (1 - \rho(x)) \ln \frac{1 - \rho(x)}{1 - \bar{\rho}(x)} \right]. \quad (2.45)$$

Si ha che, per ogni $\rho(x)$, $\mathcal{F}\{\rho(x)\} \geq \mathcal{F}_{eq}\{\rho(x)\}$, dove il segno di uguaglianza si ha solo (escludendo il caso limite $\rho_0 = \rho_1$ in cui i due funzionali coincidono) per $\rho(x) = \bar{\rho}(x)$; dunque fuori dall'equilibrio le deviazioni dal profilo tipico hanno probabilità ridotta rispetto al sistema all'equilibrio.

Ma le due espressioni (2.45) e (2.42) sono differenti a un livello più profondo. \mathcal{F}_{eq} è un funzionale *locale*: modificando il valore di $\rho(x)$ nell'intervallo $[a, b]$, l'integrando nella (2.45) varia solo in quell'intervallo; in \mathcal{F}_{eq} i contributi delle varie parti del sistema semplicemente si sommano. Ben diversa è la situazione fuori dall'equilibrio: l'integrando della (2.42) contiene la funzione $F(x)$, che si ricava da $\rho(x)$ attraverso un'equazione differenziale e che quindi in generale dipende dai valori che $\rho(x)$ assume in tutto l'intervallo $[0, 1]$. Come abbiamo già notato, questa non località è una manifestazione esplicita della presenza per i sistemi fuori dall'equilibrio di correlazioni a lungo raggio nello stato stazionario.

Dalla (2.42) è possibile ricavare i profili ottimali quando ci siano vincoli imposti al sistema. Per esempio, minimizzando \mathcal{F} col vincolo di una densità media fissata $\int_0^1 \rho(x) dx = c$, si scopre che il profilo ottimale è esponenziale, $\rho(x) = A \exp(\theta x) + B$, dove le costanti sono determinate dal vincolo di densità e dalle condizioni (2.44). Grazie a ciò si può calcolare l'ampiezza delle fluttuazioni del numero di particelle M nel sistema, e si scopre che essa è ridotta rispetto all'analogo sistema localmente all'equilibrio (2.45):

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L^{-1}[\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2] = \lim_{L \rightarrow \infty} L^{-1}[\langle M^2 \rangle_{eq} - \langle M \rangle_{eq}^2] - \frac{(\rho_1 - \rho_0)^2}{12},$$

dove $\langle M \rangle_{eq} = \langle M \rangle = L(\rho_1 + \rho_0)/2$, dato che entrambi i sistemi hanno lo stesso profilo ottimale $\bar{\rho}(x)$.

Concludiamo questa analisi con alcune significative osservazioni, che costituiscono la base per determinare il LDF nel caso parzialmente simmetrico: vogliamo capire se la proprietà di additività, che abbiamo visto venire a mancare nel nostro caso, può essere recuperata in una forma più debole. Riscriviamo la forma del funzionale \mathcal{F} per un intervallo $[a, b]$, tralasciando il fattore $1/(b-a)$ a moltiplicare:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{[a,b]} \{\rho(x); \rho_a, \rho_b\} = & \int_a^b dx \left[\rho(x) \ln \frac{\rho(x)}{F(x)} + \right. \\ & \left. + (1 - \rho(x)) \ln \frac{1 - \rho(x)}{1 - F(x)} + \ln \frac{(b-a)F'(x)}{\rho_b - \rho_a} \right], \end{aligned} \quad (2.46)$$

dove naturalmente F deve soddisfare le condizioni al bordo $F(a) = \rho_a$, $F(b) = \rho_b$.

La dipendenza da a e b , oltre che negli estremi di integrazione, è presente nel terzo addendo dell'integrando; definiamo un funzionale modificato $\mathcal{H}_{[a,b]}$ che non contenga questa dipendenza:

$$\mathcal{H}_{[a,b]} \{\rho(x); \rho_a, \rho_b\} \equiv \mathcal{F}_{[a,b]} \{\rho(x); \rho_a, \rho_b\} - (b-a) \ln \frac{b-a}{\rho_a - \rho_b}, \quad (2.47)$$

dove senza perdere di generalità abbiamo supposto $\rho_a > \rho_b$. Dalla proprietà enunciata in precedenza $\mathcal{F}\{\rho(x)\} = \sup_{F(x)} \mathcal{G}\{\rho(x), F(x)\}$ discende la seguente proprietà per \mathcal{H} , che in un certo senso sostituisce l'additività (anche se il suo significato fisico non è chiaro):

$$\mathcal{H}_{[0,1]}\{\rho(x); \rho_0, \rho_1\} = \sup_{\rho_0 > \rho_u > \rho_1} [\mathcal{H}_{[0,u]}\{\rho^{(1)}(x); \rho_0, \rho_u\} + \mathcal{H}_{[u,1]}\{\rho^{(2)}(x); \rho_u, \rho_1\}]. \quad (2.48)$$

Il fatto importante, e per qualche verso sorprendente, è che questa proprietà di additività permette di ricostruire completamente la forma di \mathcal{F} . Suddividiamo infatti il sistema in n intervalli per mezzo dei punti $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = 1$ e introduciamo le corrispondenti densità $\rho_0 = F_0 > F_1 > \dots > F_n = \rho_1$; iterando la (2.48) e ricordando la (2.47), si ottiene

$$\mathcal{F}_{[0,1]}\{\rho(x); \rho_0, \rho_1\} = \sup_{F_1, \dots, F_{n-1}} \sum_{j=1}^n \left\{ \mathcal{F}_{[x_{j-1}, x_j]}\{\rho(x); F_{j-1}, F_j\} + y_j \ln \frac{F_{j-1} - F_j}{(\rho_0 - \rho_1)y_j} \right\},$$

dove $y_j \equiv x_j - x_{j-1}$. Quando n è grande, le riserve intermedie adiacenti hanno circa la stessa densità, $F_{j-1} \simeq F_j$: su questa base, ci si aspetta che ogni sottointervallo sia un sistema quasi all'equilibrio e sia dunque possibile usare l'espressione (2.45):

$$\mathcal{F}_{[x_{j-1}, x_j]}\{\rho(x); F_{j-1}, F_j\} \simeq y_j \left[\rho(x_j) \ln \frac{\rho(x_j)}{F(x_j)} + (1 - \rho(x_j)) \ln \frac{1 - \rho(x_j)}{1 - F(x_j)} \right].$$

Sostituendo nell'equazione precedente e prendendo il limite $n \rightarrow \infty$, con $y_j \rightarrow 0$ per ogni j , si ottiene proprio la (2.42).

2.3.3 Il LDF nel caso parzialmente asimmetrico

Una derivazione del funzionale di grandi deviazioni per il processo di esclusione parzialmente asimmetrico seguendo la stessa strada del caso simmetrico si rivela molto difficile: l'algebra è più complicata e non si riesce a calcolare esattamente la funzione generatrice $Z(\lambda_1, \dots, \lambda_n; \mu_1, \dots, \mu_n)$.

La scoperta che la relazione di pseudo-additività, ricavata a posteriori dalla forma esplicita del funzionale per il processo simmetrico, ne permette in realtà la ricostruzione completa, suggerisce un modo alternativo di procedere: si cerca di derivare indipendentemente una generalizzazione di tale relazione valida nel caso asimmetrico, che consenta di ottenere il funzionale cercato.

Con questo metodo, Derrida, Lebowitz e Speer sono riusciti in [38] a determinare il funzionale di grandi deviazioni per l'ASEP. Come per il caso simmetrico,

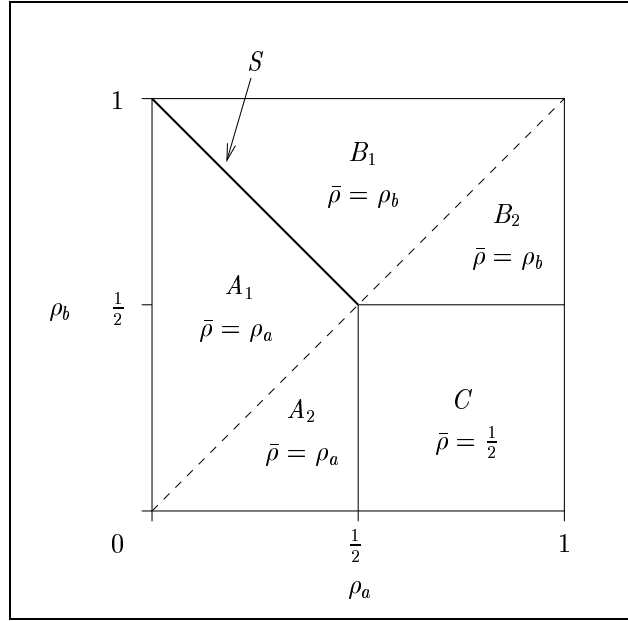


Figura 2.4: Diagramma di fase per l'ASEP, espresso in funzione di ρ_a , ρ_b .

non esamineremo i dettagli della derivazione, ma ci concentreremo sull'analisi dei risultati. Prima però ritorniamo per qualche istante all'ASEP.

Manterremo le condizioni al bordo introdotte nello studio del diagramma di fase: immissione di particelle solo nel sito iniziale, con frequenza α , ed estrazione solo in quello finale, con frequenza β ; porremo inoltre $p_r = 1$ e rinomineremo $p_l = q$ (per noi sarà $q < 1$), cosicché $\tilde{\alpha} = \alpha/(1 - q)$, $\tilde{\beta} = \beta/(1 - q)$. Nel seguito invece di $\tilde{\alpha}$ e $\tilde{\beta}$ useremo piuttosto i due parametri $\rho_a \equiv \tilde{\alpha}$ e $\rho_b \equiv 1 - \tilde{\beta}$, che analogamente al caso simmetrico interpreteremo come le densità di particelle di due riserve con cui il sistema è in contatto; in effetti per $\rho_a = \rho_b$ (ossia per $\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} = 1$) la misura stazionaria del sistema non è altro che una misura prodotto di densità ρ_a .

A differenza di quanto avviene per le osservabili da noi studiate in precedenza, che non manifestano comportamenti anomali lungo la linea $\rho_a = \rho_b$ (non è una linea di transizione di fase), ai fini delle grandi deviazioni le due regioni in cui tale linea divide il diagramma di fase manifestano comportamenti assai differenti. Seguendo [38], indicheremo la regione $\rho_a > \rho_b$ come *Fan Region* e la regione $\rho_a < \rho_b$ come *Shock Region*. Indicheremo infine con S la linea $1/2 \leq \rho_b = 1 - \rho_a$ (si veda la figura (2.4)).

Per ottenere le relazioni di additività, si introduce una modificazione del LDF,

in maniera analoga al caso simmetrico:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{[a,b]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_b \} &\equiv \mathcal{F}_{[a,b]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_b \} + (b-a)K(\rho_a, \rho_b) \\ K(\rho_a, \rho_b) &= \ln \bar{\rho}(1 - \bar{\rho}),\end{aligned}\tag{2.49}$$

dove $\bar{\rho}$ è la funzione di ρ_a, ρ_b espressa dal diagramma di fase (2.4), ossia

$$\bar{\rho} = \begin{cases} \rho_a & \text{se } \rho_a < \frac{1}{2}, \rho_a + \rho_b < 1 \\ \rho_b & \text{se } \rho_b > \frac{1}{2}, \rho_a + \rho_b > 1 \\ \frac{1}{2} & \text{se } \rho_a > \frac{1}{2}, \rho_b < \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Esponiamo dunque le relazioni di additività e la forma del funzionale che da esse segue.

Il caso $\rho_a \geq \rho_b$

La relazione di additività che si ricava nella *Fan Region* è uguale a quella ottenuta nel caso simmetrico:

$$\mathcal{H}_{[a,b]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_b \} = \sup_{\rho_a \geq \rho_c \geq \rho_b} [\mathcal{H}_{[a,c]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_c \} + \mathcal{H}_{[c,b]} \{ \rho(x); \rho_c, \rho_b \}].$$

Se si suddivide l'intervallo $[a, b]$ in n sottointervalli e si itera questa relazione, applicando per ogni sottointervallo la (2.45) e prendendo infine il limite $n \rightarrow \infty$ si ottiene la seguente espressione per il LDF:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{[a,b]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_b \} &= -(b-a)K(\rho_a, \rho_b) + \\ &+ \sup_{F(x)} \int_a^b dx \{ \rho(x) \ln[\rho(x)(1 - F(x))] + (1 - \rho(x)) \ln[(1 - \rho(x))F(x)] \},\end{aligned}\tag{2.50}$$

dove il sup¹⁷ è preso su tutte le funzioni $F(x)$ monotone non crescenti che soddisfano le condizioni al bordo $F(a) = \rho_a, F(b) = \rho_b$. Osserviamo che, nonostante la relazione di additività (2.3.3) sia identica a quella del caso simmetrico, l'espressione di \mathcal{F} non coincide con quella simmetrica (2.42), a causa della diversa definizione di $K(\rho_a, \rho_b)$.

Si noti che, se si toglie la richiesta di monotonia, la $F(x)$ che massimizza la (2.50) è semplicemente $F(x) = 1 - \rho(x)$, e \mathcal{F} sarebbe un funzionale locale. Il vincolo di monotonia rende la costruzione di $F(x)$ più sottile e corrispondentemente l'espressione (2.50) diventa non locale, come ci si aspetta per un sistema come l'ASEP.

¹⁷Si dimostra che questo sup è in realtà un "max", ossia per ogni $\rho(x)$ esiste una $F(x)$ su cui \mathcal{F} assume il valore corrispondente al sup.

Il caso $\rho_a \leq \rho_b$

La relazione di additività nella *Shock Region* è differente:

$$\mathcal{H}_{[a,b]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_b \} = \min_{\rho_c \in \{\rho_a, \rho_b\}} [\mathcal{H}_{[a,c]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_c \} + \mathcal{H}_{[c,b]} \{ \rho(x); \rho_c, \rho_b \}],$$

e differente è l'espressione di \mathcal{F} che ne deriva, iterando lo stesso procedimento di suddivisione:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{[a,b]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_b \} &= -(b-a)K(\rho_a, \rho_b) + \\ &+ \inf_{a \leq y \leq b} \left\{ \int_a^y dx \{ \rho(x) \ln[\rho(x)(1-\rho_a)] + (1-\rho(x)) \ln[(1-\rho(x))\rho_a] \} + \right. \\ &\left. + \int_y^b dx \{ \rho(x) \ln[\rho(x)(1-\rho_b)] + (1-\rho(x)) \ln[(1-\rho(x))\rho_b] \} \right\}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

Il fatto che, per ogni $\rho(x)$, si debba determinare l'estremo inferiore al variare di y rende anche questa espressione non locale.

Passiamo ora ad analizzare le importanti conseguenze delle forme (2.50), (2.51) per \mathcal{F} . Si noti che in entrambe le espressioni *non compare* q , e dunque esse sono indipendenti da $(p_r - p_l)$; si osservi inoltre che per ogni $\rho(x)$ si ha $\mathcal{F}_{[a,b]} \{ \rho(x); \rho_a, \rho_b \} \geq 0$. Cerchiamo innanzitutto i minimi di \mathcal{F} , che corrispondono ai profili di densità dominanti nel limite termodinamico.

Al di fuori di S c'è un solo profilo che minimizza \mathcal{F} , $\rho(x) = \bar{\rho}$, in accordo con quanto già noto dallo studio della densità lontano dai bordi; su S c'è invece un'intera famiglia a un parametro di profili su cui \mathcal{F} assume il suo minimo valore, come è facile verificare: si tratta degli *shocks* introdotti in precedenza,

$$\rho_y(x) \equiv \rho_a \Theta(y-x) + \rho_b \Theta(x-y), \quad y \in [a, b]. \quad (2.52)$$

Si noti che la sola conoscenza di \mathcal{F} non permette di determinare la distribuzione del punto di discontinuità y e con essa il profilo medio, che su S come sappiamo risulta lineare.

La *Fan Region* è in qualche modo la regione meno differente dal caso simmetrico, per quanto riguarda le grandi deviazioni: in essa \mathcal{F} è ancora un funzionale convesso (è l'estremo superiore di una famiglia di funzionali strettamente convessi) e vale ancora che $\mathcal{F} \{ \rho(x) \} \geq \mathcal{F}_{eq} \{ \rho(x) \}$, con \mathcal{F}_{eq} dato dalla (2.40): dunque anche qui la probabilità di deviazioni è ridotta rispetto a un sistema all'equilibrio con lo stesso profilo medio.

Ben diversa è la situazione nella *Shock Region*, dove al contrario \mathcal{F} non è convessa; è immediato verificarlo su S , dove i profili che annullano \mathcal{F} sono (solo) gli *shocks* $\rho_y(x)$: una sovrapposizione $\rho(x) = \lambda\rho_{y_1}(x) + (1 - \lambda)\rho_{y_2}(x)$ con $y_1 \neq y_2$ non è più uno *shock* e si ha $\mathcal{F}\{\rho(x)\} > 0$. Ma la situazione non è limitata a S : per ogni scelta di ρ_a, ρ_b in questa regione c'è un profilo costante vicino a cui \mathcal{F} non è convessa.

Inoltre nella *Shock Region* la disuguaglianza sopra esposta viene rovesciata: per ogni $\rho(x)$ vale che $\mathcal{F}\{\rho(x)\} \leq \mathcal{F}_{eq}\{\rho(x)\}$, e dunque la probabilità di deviazioni macroscopiche dal profilo tipico è aumentata anziché ridotta. C'è una interessante analogia tra questi risultati sulle deviazioni per l'ASEP e il comportamento osservato sperimentalmente [39] per le *fluttuazioni*¹⁸ in un fluido soggetto all'azione della gravità, le cui estremità superiore e inferiore sono in contatto con sorgenti di calore a temperatura rispettivamente T_a e T_b (sistema di Rayleigh-Bénard; questo sistema presenta transizioni di fase associate alla formazione di differenti profili per il flusso di calore e di materia, quando $(T_b - T_a)$ è sufficientemente grande); per $T_b > T_a$ si osserva un aumento delle fluttuazioni, anche per valori molto bassi della differenza delle temperature (dove il sistema è stabile); viceversa, quando $T_b < T_a$ le fluttuazioni si riducono.

Abbiamo visto che, per i sistemi all'equilibrio (e anche per il processo di esclusione simmetrico), dalla conoscenza del LDF, che dà la probabilità di deviazioni macroscopiche dal profilo tipico, è possibile ricavare la distribuzione delle piccole fluttuazioni di ordine $1/\sqrt{L}$: si pone $\rho(x) = \bar{\rho}(x) + u(x)/\sqrt{L}$ e si espande \mathcal{F} al secondo ordine, ottenendo per $u(x)$ una distribuzione gaussiana di covarianza $C(x, x')$, con $C^{-1}(x, x') = \delta^2\mathcal{F}/\delta\rho(x)\delta\rho(x')$.

È un fatto significativo che nel caso asimmetrico questa procedura in generale non sia applicabile. Infatti nella regione di massima corrente (ossia per $\rho_a > 1/2 > \rho_b$) la derivata seconda $\delta^2\mathcal{F}/\delta\rho(x)\delta\rho(x')$ presenta una discontinuità in corrispondenza del profilo di equilibrio $\rho(x) = \bar{\rho} = 1/2$ e non è possibile effettuare lo sviluppo: le fluttuazioni non sono legate in modo semplice al funzionale di grandi deviazioni. Questa che può sembrare una difficoltà “tecnica” riflette in realtà un fatto più profondo: in questa regione la distribuzione piccole fluttuazioni non è *gaussiana* (è appena il caso di notare come questa sia una differenza enorme rispetto a quanto accade nei sistemi all'equilibrio).

Ma analizziamo la questione da un punto di vista più quantitativo. Fissiamo

¹⁸Il comportamento delle deviazioni non è noto.

due punti c, d con $a < c < d < b$: cerchiamo la probabilità di osservare una densità r nell'intervallo $[c, d]$, prima per r fisso, con $r \neq \bar{\rho}$ (grandi deviazioni), quindi per $r - \rho \sim 1/\sqrt{L}$ (fluttuazioni). Siamo nella regione di massima corrente, per cui $\bar{\rho} = 1/2$.

Nel primo caso scriviamo la probabilità come $\exp(-L\bar{\mathcal{F}}(r))$; all'ordine quadratico in $(r - 1/2)$, si trova che

$$\begin{aligned}\bar{\mathcal{F}}(r) &\simeq \frac{4(d-c)(b-c)}{2b-c-d} \left(r - \frac{1}{2}\right)^2 && \text{per } r > \frac{1}{2} \\ \bar{\mathcal{F}}(r) &\simeq \frac{4(d-c)(d-a)}{d+c-2a} \left(r - \frac{1}{2}\right)^2 && \text{per } r < \frac{1}{2}.\end{aligned}\tag{2.53}$$

Come si vede, in generale la derivata seconda di $\bar{\mathcal{F}}(r)$ (il cui inverso dà l'ampiezza delle deviazioni) è discontinua per $r = 1/2$.

Per studiare le piccole fluttuazioni, introduciamo la variabile aleatoria μ definita da

$$\left(r - \frac{1}{2}\right) L(d-c) = \mu\sqrt{L}.$$

Nel caso totalmente asimmetrico $q = 0$ è possibile determinare esattamente la distribuzione $p(\mu)$ mediante l'ansatz matriciale: si scopre che essa *non* è gaussiana e neanche simmetrica¹⁹, tanto che

$$\langle \mu \rangle = \frac{\sqrt{(d-a)(b-d)} - \sqrt{(c-a)(b-c)}}{\sqrt{\pi(b-a)}}.$$

Osserviamo che le (2.53) possono essere recuperate dall'andamento asintotico di $p(\mu)$ per grandi valori di $|\mu|$, che riportiamo qui di seguito:

$$\begin{aligned}p(\mu) &\approx C_1 \exp \left[-\frac{4(b-c)}{(d-c)(2d-b-c)} \mu^2 \right] && \text{per } \mu > 0 \\ p(\mu) &\approx C_2 \exp \left[-\frac{4(d-a)}{(d-c)(d+c-2a)} \mu^2 \right] && \text{per } \mu < 0.\end{aligned}\tag{2.54}$$

Questi sviluppi per $|\mu| \gg 1$ riproducono le (2.53), che valgono per $|r - 1/2| \ll 1$: ciò è possibile, se si ricorda che $\mu = (d-c)(r - 1/2)\sqrt{L}$.

¹⁹Riportiamo per completezza la formula esplicita di $p(\mu)$:

$$\begin{aligned}p(\mu) &= \frac{8(b-a)^{3/2}}{[\pi(b-a)(c-d)^{3/2}](d-c)} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \left\{ xy \exp \left(-\frac{x^2}{c-a} - \frac{x^2}{b-d} \right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[\exp \left(-2\frac{\mu^2 + (\mu+x-y)^2}{d-c} \right) - \exp \left(-2\frac{(\mu+x)^2 + (\mu-y)^2}{d-c} \right) \right] \right\}.\end{aligned}$$

Concludiamo questa analisi osservando che la forma del funzionale di grandi deviazioni per il processo di esclusione simmetrico, da noi discussa nel paragrafo precedente, è stata recentemente riderivata da Bertini et al. in [40], nel contesto generale di un approccio dinamico alle deviazioni per gli stati stazionari di non equilibrio.

Capitolo 3

Studio Monte Carlo di un modello di DLG quasi unidimensionale

Nel primo capitolo è stato introdotto il modello KLS come prototipo di sistema fuori dall'equilibrio, mostrando come la mancanza di una condizione di bilancio dettagliato a livello microscopico possa produrre effetti rilevanti su larga scala, sconosciuti ai sistemi all'equilibrio: una violazione del teorema di fluttuazione-dissipazione accompagnata dalla presenza di correlazioni a lungo raggio lontano dal punto critico e una dipendenza estremamente sensibile dalle condizioni al bordo e dal modo in cui viene effettuato il limite termodinamico (si veda la discussione nel Paragrafo 1.3.2).

Proprio su quest'ultimo aspetto si concentrerà la nostra attenzione in questo capitolo, in cui studieremo il diagramma di fase per un modello di gas reticolare forzato *quasi unidimensionale* (modello Q1DLG₂), intendendo con questo un sistema in due dimensioni in cui il limite termodinamico viene effettuato mandando all'infinito solo la lunghezza del reticolo nella direzione del campo, mantenendo fissa quella nella direzione trasversa; oltre al valore della lunghezza trasversa, i parametri che governano il sistema sono la temperatura e l'intensità del campo elettrico.

L'interesse che presenta questo modello è legato all'emergere, in una regione dei parametri del sistema, di una fase ordinata, caratterizzata dall'organizzazione delle particelle in una lunga striscia che percorre tutto il sistema nella direzione del campo (cfr. figura 3.1 (a)): si tratta di un ordinamento analogo a quello che si osserva nel corrispondente modello bidimensionale (cfr. figura 1.1 (g,h)). Questo fatto è

degno di nota, dal momento che il sistema è quasi unidimensionale: si consideri che, per i sistemi all'equilibrio termodinamico, i modelli quasi unidimensionali sono strettamente analoghi ai corrispondenti modelli strettamente unidimensionali; in particolare, se l'Hamiltoniana del sistema è a corto raggio, non è possibile osservare né ordinamento su larga scala né transizioni di fase (per temperatura diversa da zero)¹.

Abbiamo avuto modo di discutere ampiamente nel corso del Capitolo 2 come, nella classe dei sistemi fuori dall'equilibrio, la presenza di transizioni di fase nei sistemi unidimensionali sia un fenomeno comune, anche per modelli estremamente semplici come l'ASEP, nella cui dinamica sono assenti le interazioni (ossia, le frequenze per le transizioni in cui una particella salta da un sito a un altro sono funzione solo della coppia di siti e non dalla configurazione nei siti adiacenti). In questa ottica, il semplice fatto che nel modello Q1DLG₂ si osservino transizioni di fase non sarebbe così significativo, considerando anche che esso sembra un modello decisamente più “ricco” e complicato dell'ASEP.

In realtà, anche per valutare correttamente l'importanza dei risultati che discuteremo, occorre considerare con più attenzione la situazione. È vero solo in parte che la dinamica del nostro modello è più ricca di quella dell'ASEP: infatti nel nostro caso il numero totale di particelle è conservato, mentre invece le transizioni di fase che presentano tutti i modelli descritti nel Capitolo 2 sono indotte da condizioni al bordo aperte, che comportano l'immissione e l'estrazione di particelle dal sistema. Questa differenza è decisiva: la dinamica dell'ASEP è intrinsecamente disomogenea, perché i siti alla frontiera hanno frequenze di transizione speciali, e le diverse fasi si originano proprio esaltando questa asimmetria, variando le frequenze al bordo rispetto a quelle dei siti interni; nel nostro modello, invece, una variazione dei parametri interviene nello stesso modo sulle frequenze di transizione di *tutti* i siti, preservando così l'invarianza per traslazioni. (C'è da dire che, nell'ambito dei sistemi con numero totale di particelle conservato, esistono esempi senza interazioni, anche unidimensionali, in cui si osservano transizioni di fase: si veda [16]; si tratta però di modelli in cui sono presenti particelle di più specie, che hanno dinamica differenziata).

C'è anche un'altra ragione per cui l'emergere di una fase ordinata per questo modello risulta significativa: ciò mette in luce come il ruolo della dimensionalità nel

¹Una celebre “dimostrazione” di questo fatto è data da Landau e Lifshitz in [12] e si basa su semplici considerazioni di carattere energetico-entropico; per una analisi più dettagliata, si veda [16].

produrre un ordinamento su larga scala (così come il concetto stesso di dimensione critica inferiore) possa risultare molto sottile, per i sistemi fuori dall'equilibrio: infatti la versione unidimensionale del DLG non presenta ordinamento, e anche nel modello Q1DLG₂ la fase ordinata non si manifesta se la dimensione del reticolo nella direzione trasversa è troppo piccola (torneremo più precisamente sulla questione nel corso del capitolo). Una situazione simile è descritta da Korniss, Schmittmann e Zia in [46], dove viene studiato un modello con due specie di particelle in cui la fase ordinata si manifesta nei casi quasi unidimensionale e bidimensionale, ma non nel caso strettamente unidimensionale.

Il modello Q1DLG₂ presenta dunque proprietà peculiari, che ne motivano lo studio. L'analisi è stata condotta mediante simulazioni al computer: si consideri però che, al contrario della maggior parte dei lavori Monte Carlo sul DLG bidimensionale, nei quali viene effettuata la misura di qualche osservabile per verificare l'accordo con una previsione teorica (fornita per esempio da un approccio di teoria di campo), il nostro modello non è mai stato trattato in letteratura, non è stata sviluppata alcuna teoria che ne predica i comportamenti collettivi, né il diagramma di fase è mai stato esplorato. Alla luce di ciò, ci siamo concentrati sullo studio del diagramma di fase, per evidenziarne le diverse regioni; ci siamo venuti a scontrare con difficoltà di carattere tecnico, dovute essenzialmente al rallentamento della dinamica per bassa temperatura e alla presenza di fenomeni di metastabilità connessi con effetti di volume finito difficilmente eliminabili, che non hanno permesso una determinazione precisa della linea di separazione tra le fasi. Abbiamo quindi rivolto la nostra attenzione a una attenta analisi dei meccanismi microscopici di instabilità, che ha messo in luce alcuni aspetti interessanti del sistema.

Nella prima sezione richiameremo la definizione del modello e discuteremo l'implementazione algoritmica della dinamica al computer, esponendo brevemente il metodo *jackknife* per l'analisi dei dati. Passeremo quindi a discutere i risultati ottenuti, da un punto di vista fenomenologico e quantitativo. Trarremo infine le conclusioni della nostra analisi, evidenziando i problemi aperti e le prospettive.

3.1 Il modello Q1DLG₂

Riprendiamo il modello KLS introdotto nel Paragrafo 1.2.2. Considereremo sistemi su reticolo Λ bidimensionale periodico, di periodo L nella dimensione del campo e T nella dimensione trasversa; nel seguito ci riferiremo a questa geometria con la

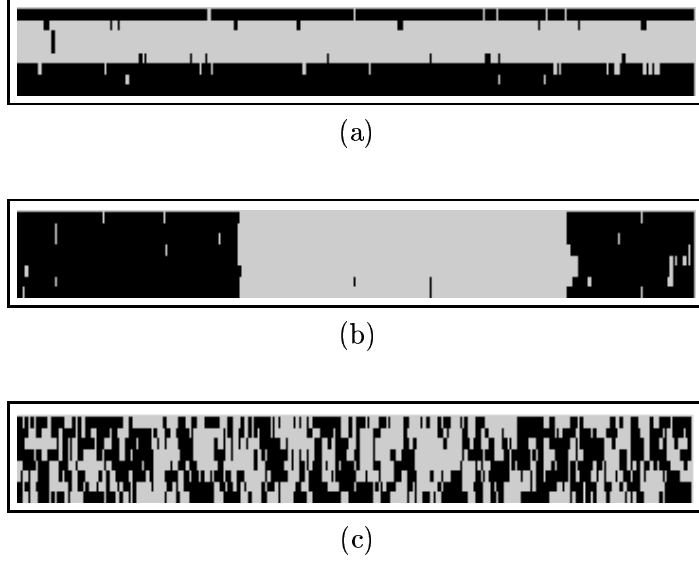


Figura 3.1: Configurazioni del modello Q1DLG₂ su reticolo 256×8 : striscia in direzione parallela (a) e trasversa (b) al campo e configurazione “disordinata” (c); si ricordi che le condizioni al bordo sono periodiche. Le configurazioni sono state scalate nella direzione trasversa per questioni di chiarezza.

notazione $L \times T$. Per ragioni di comodità, opereremo la ridefinizione $\beta \mathbf{E} \rightarrow \mathbf{E}$, così che nell’espressione delle frequenze di transizione i due parametri β ed \mathbf{E} compaiano in forma indipendente:

$$w_{C \rightarrow C^{i,j}} = g \left[\beta [\mathcal{H}_I(C^{i,j}) - \mathcal{H}_I(C)] + \mathbf{E} \cdot (\mathbf{j} - \mathbf{i})(C(\mathbf{i}) - C(\mathbf{j})) \right], \quad (3.1)$$

dove $g[x]$ è una funzione a valori positivi che soddisfa la (1.13) e \mathcal{H}_I è l’Hamiltoniana di Ising²:

$$\mathcal{H}_I(C) = -4 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j. \quad (3.2)$$

Come nel caso del modello KLS, sceglieremo le frequenze di transizione secondo l’algoritmo Metropolis (1.14), ossia

$$g[x] = \min\{1, e^{-x}\}.$$

Il metodo standard per effettuare la simulazione è il seguente: data la configurazione iniziale C_0 , si produce una sequenza di configurazioni C_n , $n = 1, 2, \dots$

²Rispetto alla (1.15), si è posto $J = 1$: ciò corrisponde semplicemente a ridefinire $J\beta \rightarrow \beta$.

applicando iterativamente il seguente passo elementare **pe**: si estrae a caso una coppia di siti primi vicini $\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \Lambda$; se la configurazione attuale è C_n , la configurazione successiva sarà $C_{n+1} = C_n^{\mathbf{i}, \mathbf{j}}$ con probabilità $w_{C_n \rightarrow C_n^{\mathbf{i}, \mathbf{j}}}$ oppure $C_{n+1} = C_n$ con probabilità $1 - w_{C_n \rightarrow C_n^{\mathbf{i}, \mathbf{j}}}$. Come abbiamo notato nella Sezione 1.2.1, la successione costruita approssima l'evoluzione continua; in ogni caso, la misura stazionaria della catena di Markov prodotta dalla simulazione è rigorosamente la stessa del processo a tempi continui. Dato che noi siamo interessati alle proprietà del sistema nello stato stazionario (che viene raggiunto per tempi lunghi a partire da qualunque condizione iniziale, se la dinamica è irriducibile), la misura delle osservabili produce il risultato corretto; torneremo a breve sulla questione.

L'implementazione effettiva al calcolatore dell'algoritmo sopra esposto non presenta alcuna difficoltà tecnica. Descriviamo la codifica del passo elementare **pe**:

pe.1 scegliere una coppia di siti primi vicini \mathbf{i}, \mathbf{j} mediante un generatore di numeri casuali;

pe.2 se i due siti sono occupati, andare a **pe.5**;

pe.3 altrimenti calcolare la “differenza di energia” Δ che interviene nella (3.1), $\Delta = \beta[\mathcal{H}_I(C^{\mathbf{i}, \mathbf{j}}) - \mathcal{H}_I(C)] + lE$, dove $E = |\mathbf{E}|$ e $l = 0, \pm 1$ a seconda della direzione in cui salta la particella nello scambio dei siti \mathbf{i} e \mathbf{j} ;

pe.4 scambiare i numeri di occupazione dei siti \mathbf{i} e \mathbf{j} se $\Delta \leq 0$ oppure se $r < e^\Delta$, dove r è un numero casuale distribuito uniformemente tra 0 e 1;

pe.5 la configurazione corrente è la nuova configurazione della sequenza.

Una *sweep* del Monte Carlo consiste nella ripetizione di **pe** per un numero di volte pari al volume del reticolo $L \cdot T$, dopodiché vengono campionate le osservabili di interesse. Questa definizione è semplicemente un'utile scala per misurare i tempi della simulazione: si può pensare che in una *sweep* ogni particella abbia avuto la possibilità di effettuare un salto.

Occorre decidere le osservabili da misurare per il nostro sistema. Poiché la fase ordinata si manifesta con l'insorgere di disomogeneità spaziali nella densità, introduciamo la trasformata di Fourier della configurazione, espressa in funzione delle variabili di spin $\sigma_{\mathbf{i}} = 2C(\mathbf{i}) - 1$:

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\mathbf{j} \in \Lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}} \sigma_{\mathbf{j}}. \quad (3.3)$$

Come nel modello KLS, per evidenziare la formazione di una striscia di particelle nella direzione del campo è sufficiente analizzare il valore assunto da ϕ in corrispondenza del primo impulso di Fourier non nullo nella direzione trasversa, che indichiamo con $\mathbf{k}_{0,1} = (0, 2\pi/T)$: il nostro parametro d'ordine sarà dunque $f_{01} \equiv \langle |\phi(\mathbf{k}_{0,1})| \rangle$ (si veda la discussione in calce alla (1.18)). Per ragioni che illustreremo nel prossimo paragrafo, la nostra analisi si concentrerà sul caso in cui la dimensione trasversa T è pari a 8; in questo caso il massimo valore che f_{01} può assumere è

$$\max f_{01} = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{1 + \frac{\sqrt{2}}{2}} \simeq 0.653 \quad (3.4)$$

e corrisponde a una configurazione perfettamente ordinata, in cui (a meno di traslazioni) i siti della metà inferiore del reticolo sono tutti occupati, mentre quelli della metà superiore sono tutti vuoti (cfr. figura 3.1 (a)). Si osservi come, ai fini di caratterizzare una striscia di particelle parallela al campo, il parametro d'ordine f_{01} sia molto selettivo: se il profilo della striscia non è perfettamente dritto, i contributi delle diverse colonne a f_{01} , benché uguali in modulo, hanno delle fasi relative che diminuiscono notevolmente il valore del risultato.

Come spiegheremo in seguito, risulta interessante misurare anche $f_{10} \equiv \langle |\phi(\mathbf{k}_{1,0})| \rangle$, il primo impulso di Fourier non nullo nella direzione del campo, al fine di evidenziare la formazione di una striscia di particelle nella direzione trasversa (cfr. figura 3.1 (b)); avremo modo di discutere le caratteristiche di questa pseudo-fase.

Per misurare una grandezza, si attende che il sistema si porti nello stato stazionario: si procede quindi al campionamento e all'analisi dei dati. Per essere ragionevolmente "certi" che il sistema abbia raggiunto lo stato stazionario, conviene osservare le tracce temporali delle misure delle osservabili: il fatto che, dopo un intervallo di tempo iniziale, la forma della traccia si faccia più "omogenea" (cfr. figura 3.5) è in genere un buon segnale.

Quando lo stato stazionario è stato raggiunto, dalla sequenza delle misure si estrae il valor medio. Più precisamente, indichiamo con $\{C_i, i = 1, \dots, n\}$ i risultati di n realizzazioni consecutive del processo stocastico: i è il tempo discreto della simulazione Monte Carlo e C_i è la configurazione del sistema a quell'istante. Sia inoltre $P(C)$ la misura stazionaria del sistema. Data una osservabile f , indichiamo con $\langle \cdot \rangle$ l'aspettazione rispetto alla misura stazionaria, a priori incognita, e con $\bar{\cdot}$

la media temporale sulla realizzazione $\{C_1, \dots, C_n\}$:

$$\langle f \rangle \equiv \sum_C P(C) f(C) \quad \bar{f} \equiv \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(C_i).$$

L'ergodicità del processo garantisce che $\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{f} = \langle f \rangle$. Nella pratica, si misurano solo medie su tempi finiti e con queste si stima $\langle f \rangle$. Queste medie finite sono esse stesse variabili aleatorie, che fluttuano da una realizzazione all'altra del processo con una certa distribuzione: occorre stimare la varianza di tale distribuzione per assegnare un'incertezza al risultato della misura. Esporremo ora a grandi linee il metodo che abbiamo usato per effettuare questa stima: per maggiori dettagli si vedano [42, 45].

Un'osservazione preliminare. La sequenza di configurazioni prodotta dalla simulazione è distribuita secondo la misura stazionaria, ma non in modo temporalmente casuale: dato che le configurazioni sono prodotte in successione lungo l'evoluzione del sistema, la sequenza dei campionamenti di una osservabile presenterà in generale delle correlazioni temporali. Anche se il metodo che descriveremo ora permette di eliminare l'effetto di queste correlazioni, è buona norma lasciare trascorrere un adeguato intervallo di tempo N_{wait} tra due campionamenti successivi, in modo da non sprecare risorse per calcolare campioni che poi risultano inutili perché fortemente correlati; nelle nostre misure abbiamo scelto $N_{wait} = 1000$ *sweep*, intervallo che nella maggior parte dei casi (lontano dalla zona di metastabilità, come vedremo) si rivela adeguato.

Indichiamo con x_i la variabile aleatoria che rappresenta il risultato del campionamento di una osservabile al tempo i della simulazione. La media su una sequenza di n configurazioni è la variabile aleatoria

$$m \equiv \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i,$$

di cui vogliamo stimare la varianza

$$\sigma^2(m) = \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2.$$

Da queste definizioni segue subito che

$$\sigma^2(m) = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j=1}^n \tilde{\gamma}_{i,j} \quad \Rightarrow \quad \sigma^2(m) \geq \gamma_0/n, \quad (3.5)$$

dove si è posto $\tilde{\gamma}_{i,j} \equiv \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle$ e $\tilde{\gamma}_{i,j} \equiv \gamma_{|i-j|}$. La grandezza γ_0/n è una sottostima della varianza, che diviene tanto più precisa quanto più i dati sono temporalmente scorrelati: infatti nel limite $\{\gamma_t \rightarrow 0, \forall t \geq 1\}$ si ha che $\gamma_0/n \rightarrow \sigma^2(m)$. Invece di γ_0 è conveniente considerare la grandezza c_0 , definita come

$$c_0 \equiv \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})(x_k - \bar{x}),$$

che ha media $\langle c_0 \rangle = \gamma_0 - \sigma^2(m)$; si può riscrivere la stima (3.5) come

$$\sigma^2(m) \geq \left\langle \frac{c_0}{n-1} \right\rangle.$$

Se abbiamo una sequenza di dati sufficientemente scorrelata, possiamo misurare la variabile $c_0/(n-1)$ su questa sequenza: indicando con $c'_0/(n-1)$ il valore ottenuto, possiamo prenderlo come stima per $\langle c_0/(n-1) \rangle$, e porre³

$$\sigma(m) \simeq \sqrt{\frac{c'_0}{n-1}} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{2(n-1)}} \right). \quad (3.6)$$

Ora resta solo il problema di come assicurarsi che la sequenza su cui si calcola la stima per $\sigma(m)$ sia effettivamente indipendente; questo si ottiene col metodo *jackknife* iterativo, che consiste in una procedura di “rinormalizzazione” a blocchi dei dati.

Data la sequenza $\{x_i\}$, produciamo una sequenza più regolare, definendo n variabili $\{\tilde{x}_j\}$ “simili” alla media:

$$\tilde{x}_j = \frac{1}{n-1} \sum_{k \neq j} x_k, \quad (3.7)$$

e su di essa calcoliamo la (3.6); il fatto è che, se i dati sono correlati, il valore che troviamo è una sottostima di $\sigma(m)$. Generalizziamo la procedura (3.7), definendo per ogni valore di $m = 1, \dots, n/2$ una sequenza di n/m nuove variabili, escludendo

³La deviazione standard della nostra stima $c'_0/(n-1)$ per $\sigma^2(m)$ è data da $\sqrt{2(n-1)} \cdot c'_0/(n-1)$, perché se i dati sono scorrelati le variabili x_i diventano indipendenti e gaussiane: da questo segue l'incertezza per $\sigma(m)$ che compare nella (3.6).

dalla sommatoria m valori consecutivi anziché uno solo:

$$\begin{aligned}\tilde{x}_1 &= \frac{1}{n-m} \sum_{k=m+1}^n x_k \\ &\vdots \\ \tilde{x}_j &= \frac{1}{n-m} \left[\sum_{k=1}^n - \sum_{k=(j-1)m+1}^{jm} \right] x_k \\ &\vdots \\ \tilde{x}_{n/m} &= \frac{1}{n-m} \sum_{k=1}^{n-m} x_k.\end{aligned}$$

Questa procedura genera sequenze sempre più brevi e più scorrelate: calcolando la (3.6) a ogni passo, si osserva che la stima per $\sigma(m)$ cresce fino a stabilizzarsi su un certo valore, quando la sequenza diventa approssimativamente indipendente: è questo il valore da associare a $\sigma(m)$ (per grandi valori di m , la stima tende a fluttuare maggiormente, a causa del minor numero di dati disponibili).

Come già detto, il nostro obiettivo non è la misura di qualche quantità, e dunque l'uso che faremo di questa tecnica sarà abbastanza limitato; in un certo senso, essa ci servirà soprattutto in negativo, evidenziando la presenza in alcune regioni dei parametri di correlazioni temporali decisamente consistenti, che non ci permetteranno di dare una stima ragionevole per le nostre osservabili.

3.2 Analisi del modello

L'idea di studiare il modello Q1DLG₂ è stata suggerita da un'osservazione relativa al modello KLS: tra le proprietà critiche che questo sistema presenta, peculiare è lo *scaling fortemente anisotropo* (per una discussione approfondita, si veda [7]). Questo consiste nel fatto che l'andamento vicino al punto critico di una osservabile del sistema non è in generale caratterizzabile con un solo esponente.

Per un sistema statistico d -dimensionale "ordinario", la teoria dello *scaling* prevede la seguente forma per l'andamento della funzione di correlazione⁴ a due punti in prossimità del punto critico:

$$G(\mathbf{x}, t; \tau) = \mu^{d-2+\eta} G(\mu\mathbf{x}, \mu^z t; \mu^{-1/\nu} \tau),$$

⁴Le considerazioni che seguono sono facilmente estendibili a una generica osservabile $O(\mathbf{x}, t)$.

dove μ indica una generica scala di impulsi, $\tau \propto T - T_c$ e η , z , ν sono gli ordinari esponenti critici (si veda [25]); questa formula si può anche riscrivere

$$G(\mathbf{x}, t; \tau) = \tau^{\nu(d-2+\eta)} \tilde{G}(\mathbf{x}/\tau^{-\nu}, t/\tau^{-\nu z}),$$

avendo posto $\tilde{G}(\mathbf{x}, t) \equiv G(\mathbf{x}, t; 1)$. Da questo segue che la lunghezza di correlazione (intesa come scala di lunghezza tipica del sistema, che controlla il decadimento esponenziale della funzione a due punti) diverge come $\tau^{-\nu}$ per $T \rightarrow T_c$.

Quando la dinamica microscopica presenta una marcata anisotropia, può accadere che le diverse componenti di una stessa osservabile scalino con esponenti differenti⁵; ad esempio, se il sistema presenta un asse di anisotropia, la forma di scala sopra descritta va modificata nel seguente modo:

$$G(\mathbf{x}_\perp, \mathbf{x}_\parallel, t; \tau) = \mu^{d-2+\eta} G(\mu \mathbf{x}_\perp, \mu^{1+\Delta} \mathbf{x}_\parallel, \mu^z t; \mu^{-1/\nu} \tau),$$

dove \perp e \parallel indicano le direzioni rispettivamente ortogonali e parallela all'asse, ed è stato introdotto l'*esponente di anisotropia* Δ . Questo comporta che, nella regione critica, il sistema presenta due distinte scale di lunghezza rilevanti, il cui comportamento singolare è differente; procedendo come sopra, appare naturale introdurre due diverse lunghezze di correlazione ξ_\parallel , ξ_\perp che per $T \rightarrow T_c$ divergono come

$$\xi_\perp \sim \tau^{-\nu}, \quad \xi_\parallel \sim \tau^{-\nu(1+\Delta)}.$$

Questi ragionamenti si applicano in particolare alle varie osservabili del modello KLS. A prima vista, in questo caso può sembrare strano parlare di lunghezza di correlazione, quando nel Capitolo 1 abbiamo mostrato che le correlazioni nella fase disordinata decadono algebricamente anche lontano dalla regione critica. In realtà (si ricordi la discussione in fondo al Paragrafo 1.3.3) “nascosto” sotto questo decadimento algebrico è possibile rintracciare un effettivo decadimento esponenziale. Mediante un'attenta analisi del comportamento del fattore di struttura statico attorno all'origine, è anche possibile definire una formula per il calcolo della lunghezza di correlazione in sistemi finiti: per maggiori dettagli, si veda [41].

In effetti un problema fondamentale è quello di mettere in relazione le proprietà del sistema nel limite termodinamico con le misurazioni che, necessariamente,

⁵Una forma più lieve di anisotropia è quella in cui le diverse componenti scalano con lo stesso esponente, ma con ampiezze a moltiplicare differenti; questo tipo di anisotropia può essere eliminata con una ridefinizione delle costanti di accoppiamento (ossia, nel linguaggio del gruppo di rinormalizzazione, con l'aggiunta di operatori marginali).

vengono effettuate su sistemi finiti. In un approccio fenomenologico (che può essere formalizzato in un contesto di gruppo di rinormalizzazione) a questo problema, si può supporre che, in un sistema “ordinario”, le osservabili a volume finito siano funzioni omogenee della lunghezza di correlazione e della dimensione del sistema, senza dipendenza esplicita dalla temperatura: questa è l’ipotesi fondamentale su cui si fondano le potenti tecniche delle Correzioni di Taglia Finita (FSS, *Finite Size Scaling*); tali funzioni omogenee sono anche dette *forme di scala*.

Il fatto significativo che emerge nei sistemi che presentano anisotropia forte è che queste forme di scala non dipendono solo dalla dimensione del sistema, ma anche dalla particolare geometria del reticolo, attraverso il *fattore anisotropo di forma* definito come $S \equiv L_{\parallel}^{1/(1+\Delta)}/L_{\perp}$; questa dipendenza sensibile dal modo in cui viene effettuato il limite termodinamico rientra tra le caratteristiche generali dei sistemi fuori dall’equilibrio: si veda in merito la discussione nel Paragrafo 1.3.2.

Essendo il modello KLS così sensibile alla forma del reticolo, è sembrato interessante studiarne il comportamento nel caso estremo in cui solo una delle direzioni viene mandata all’infinito: in particolare, si voleva capire se la fase ordinata del sistema, caratterizzata dall’aggregazione delle particelle in una striscia parallela al campo (cfr. figura 1.1 (g,h)), sarebbe sopravvissuta a tale limite.

3.2.1 Considerazioni sul modello

Prima di passare a discutere ciò che emerge dalle simulazioni, esponiamo alcune considerazioni preliminari sul modello Q1DLG₂.

Per sistemi fuori dall’equilibrio non esiste una Hamiltoniana che determina la statistica; nondimeno a livello locale le frequenze di transizione (3.1) sono costruite in funzione di “differenze di energia”, e sembra plausibile che considerazioni di natura energetica possano permettere di comprendere qualitativamente il comportamento termodinamico. Quando la temperatura è bassa (ossia per grandi valori di β) la dinamica penalizza sensibilmente le transizioni che comportano un aumento di energia, e ci si aspetta che le configurazioni tipiche per il sistema siano quelle meno energetiche (compatibilmente con i vincoli entropici): ciò corrisponde ad avere particelle organizzate in domini compatti, che presentino una interfaccia⁶ ridotta. In questa ottica, la formazione di una striscia di particelle parallela al campo per alti

⁶Con interfaccia si intende l’insieme dei legami che connettono siti occupati con siti vuoti; in una configurazione “compatta” essa è tipicamente una linea che separa le particelle dalle vacanze.

valori di β e di E nel modello KLS è facilmente comprensibile: infatti un'interfaccia in direzione parallela al campo sarebbe instabile sotto l'azione della dinamica.

Da queste considerazioni si intuisce che, per avere qualche speranza di osservare una fase ordinata dello stesso tipo nel modello Q1DLG₂ (cfr. figura 3.1 (a)), la dimensione trasversa T del reticolo non può essere troppo bassa: in una configurazione compatta, infatti, la dinamica agisce sui siti all'interfaccia e le fluttuazioni che ne risultano possono arrivare a rompere la striscia⁷, anche in bassa temperatura, se questa non è sufficientemente spessa. Questa previsione è in effetti confermata dalle simulazioni, in cui abbiamo osservato che la striscia è instabile per $T < 6$. Abbiamo considerato sistemi in cui la densità di particelle è pari a $1/2$, poiché è per questo valore che nel modello bidimensionale la transizione di fase diventa del secondo ordine; inoltre ci siamo limitati a dimensioni trasverse pari, in modo che sia possibile la configurazione “totalmente ordinata”, in cui i siti della metà inferiore del sistema sono tutti occupati e quelli della metà superiore sono pieni. Alla luce di tutto ciò e dopo diverse prove, abbiamo deciso di concentrare la nostra analisi sul caso $T = 8$, che rappresenta un compromesso tra garantire stabilità alla striscia e mantenere la dimensione trasversa a un valore basso (condizione importante affinché i sistemi simulabili siano il più possibile “vicini” al limite termodinamico).

Prima di passare all'esposizione dei risultati, analizziamo la forma che assume il nostro modello nei casi limite.

- Per $\beta = 0$ scompare il termine hamiltoniano dalle frequenze di transizione (3.1) e si ottiene un processo di esclusione semplice con condizioni al bordo periodiche, in cui le particelle saltano con frequenza unitaria in direzione del campo e in direzione trasversa, mentre i salti opposti al campo avvengono con frequenza e^{-E} . Come si verifica per sostituzione diretta nella Master Equation, la misura invariante del sistema è semplicemente quella uniforme, in cui tutte le configurazioni hanno uguale peso.
- Il caso $\beta = \infty$ è singolare: le transizioni che comportano un aumento di energia sono soppresse e la dinamica non è più irriducibile. Lo stato del sistema per grandi tempi dipende dalla configurazione di partenza: questo caso non è molto significativo.

⁷A meno che non sia espressamente indicato il contrario, quando nel seguito parleremo genericamente di “striscia”, intenderemo sempre “striscia in direzione del campo”.

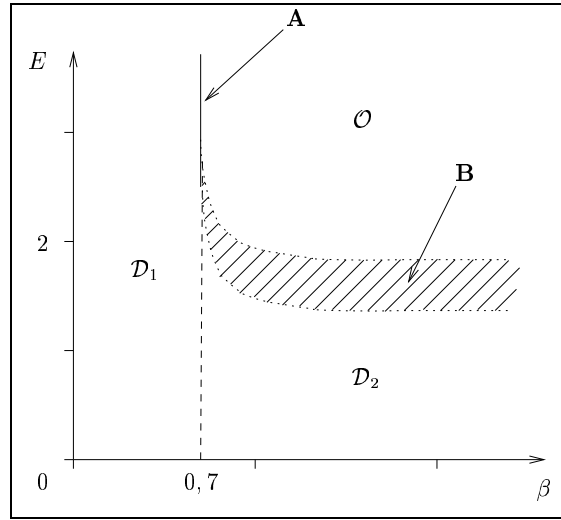


Figura 3.2: Diagramma di fase per il modello Q1DLG₂. La regione \mathcal{O} corrisponde alla fase ordinata del sistema, caratterizzata dalla formazione di una striscia di particelle in direzione del campo, mentre la regione $\mathcal{D} = \mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2$ corrisponde alla fase disordinata. Come spiegato nel testo, i confini delle regioni sono solo indicativi.

- Per $E = 0$ la dinamica è *reversibile* (si veda il Paragrafo 1.1.5): il modello diventa semplicemente un sistema di Ising all'equilibrio e le frequenze di transizione soddisfano il bilancio dettagliato rispetto alla misura stazionaria canonica $e^{-\beta\mathcal{H}_I}$. Il limite quasi unidimensionale per il modello di Ising è analogo a quello strettamente unidimensionale: il sistema *non* si ordina e non si osservano transizioni di fase.
- Infine, il caso $E = \infty$ non presenta proprietà particolari, se non che i salti in direzione opposta al campo sono proibiti. In un certo senso che chiariremo nel seguito, il limite $E \rightarrow \infty$ non è un vero limite per il nostro modello, dal momento che, oltre un certo valore di E , la dinamica non cambia sensibilmente.

3.2.2 Risultati dell'analisi

Il risultato principale della nostra analisi è quello di poter affermare che il modello Q1DLG₂ presenta, in una regione dello spazio dei parametri relativa a valori elevati di β ed E , una fase ordinata \mathcal{O} , in corrispondenza della quale f_{01} assume un valore prossimo al suo massimo: le configurazioni tipiche sono caratterizzate dalla

presenza di una striscia di particelle nella direzione del campo; all'esterno di tale regione, il sistema è in una fase disordinata \mathcal{D} (il diagramma di fase è riportato schematicamente in figura 3.2).

Ritorniamo nel seguito sul significato preciso dell'aggettivo "disordinata": in effetti, nella regione \mathcal{D}_2 le configurazioni tipiche che si osservano nelle simulazioni sono caratterizzate dall'aggregazione di particelle in strisce orientate *perpendicolarmente* al campo, che spesso collassano in un'unica striscia (cfr. figura 3.1 (b)); tuttavia ci sono ragioni per ritenere che il numero di tali strisce tenda a crescere indefinitamente nel limite termodinamico, producendo a tutti gli effetti una fase disordinata. Per comodità di notazione, definiamo le costanti $\beta_0 \equiv 0.7$ e $E_0 \equiv 2.0$, che corrispondono indicativamente ai confini interni della fase \mathcal{O} (ossia per $\beta \geq \beta_0$, $E \geq E_0$ il sistema è nella fase \mathcal{O}).

C'è un problema essenziale che emerge quando si studia un modello statistico mediante simulazioni al computer: da un lato si vogliono fare affermazioni circa il comportamento del sistema nel limite termodinamico, dall'altro lato "le risorse computazionali di cui disponiamo sono irrimediabilmente (!) finite". Questa difficoltà è tanto più significativa quanto più ci si avvicina alla regione critica del sistema, dove nel limite termodinamico si osserva la divergenza di quantità come la suscettività e la lunghezza di correlazione, testimoniando l'instaurarsi di correlazioni su scale spaziali e temporali macroscopiche, molto più grandi delle scale associate ai processi microscopici del sistema. Il solo modo per estrapolare dai dati osservati in volume finito informazioni sul sistema infinito è quello di analizzare attentamente il modo in cui cambiano i valori delle osservabili di interesse al variare della grandezza del reticolo⁸.

Purtroppo non ci è stato possibile determinare con elevata precisione i contorni della regione ordinata perché, come vedremo in dettaglio tra poco, il nostro sistema manifesta un avvicinamento lento al limite termodinamico. Comunque, dai dati emergono indicazioni abbastanza chiare in favore del fatto che la linea A nel diagramma di figura 3.2 sia una linea di transizione di fase di seconda specie, in corrispondenza della quale nel limite termodinamico si verifica una non analiticità

⁸Questa di per sé è un'affermazione abbastanza vaga; il suo contenuto può essere precisato in un contesto di gruppo di rinormalizzazione, e conduce alle semplici ma potenti tecniche delle Correzioni di Taglia Finita (FSS, *Finite Size Scaling*), a cui abbiamo accennato in precedenza. Queste tecniche permettono di estrapolare, a partire dai dati misurati su sistemi finiti, il valore che assumono le quantità di interesse nel limite termodinamico: si veda [44] per una trattazione delle tecniche e [42] per una loro applicazione al calcolo della lunghezza di correlazione nel modello KLS bidimensionale.

del parametro d'ordine f_{01} . Per quanto riguarda la regione B , la questione è più delicata: mentre dall'analisi in volume finito risulta chiaro il comportamento del sistema al di sopra (striscia orizzontale) e al di sotto (striscia/strisce verticali) di tale regione, in B si osservano fenomeni di *metastabilità*, in cui il sistema oscilla tra le configurazioni “estreme” ordinate verticalmente e orizzontalmente; le incertezze sull'effettiva presenza di questa regione nel limite termodinamico sono notevoli, come discuteremo in seguito. I tempi di permanenza del sistema in ciascuna di queste due “fasi” tende a essere molto lungo (dell'ordine di 10^6 sweep, cfr. figura 3.7) e corrispondentemente cresce la correlazione temporale dei campioni delle misure: ciò ha reso impossibile - in relazione alle risorse di cui disponevamo - una misura delle osservabili f_{01} , f_{10} con un soddisfacente grado di accuratezza. Ma procediamo a una rassegna sistematica dei risultati ottenuti.

3.2.3 La fase ordinata

Dopo aver capito qualitativamente la collocazione della fase ordinata, abbiamo proceduto a esplorare il diagramma di fase. Più precisamente, nella parte alta del diagramma ($E \geq E_0$) abbiamo effettuato le simulazioni lungo linee orizzontali: scegliendo alcuni valori fissati per E , abbiamo campionato le osservabili al variare di β (questo naturalmente per intercettare la linea di demarcazione tra le fasi), per valori via via crescenti della taglia del sistema; viceversa, per la parte bassa del diagramma abbiamo tenuto fisso β , misurando le grandezze al variare di E . Gli esiti dei due tipi di esplorazione si sono rivelati alquanto differenti: descriveremo ora i risultati ottenuti per $E > E_0$, che costituiscono una prima prova per l'esistenza della fase \mathcal{O} nel limite termodinamico, rimandando alla prossima sezione l'analisi della parte bassa del diagramma.

Definiamo come MCS (*Monte Carlo Step*) la nostra unità di tempo per le simulazioni, che corrisponde a effettuare $N_{wait} = 10^3$ sweep e quindi campionare le osservabili. In figura 3.3 riportiamo i grafici con le misure del parametro d'ordine f_{01} al variare di β , per fissati valori di $E = 2.0$, $E = \infty$ e per diverse geometrie reticolari tra 64×8 e 1024×8 ; non abbiamo riportato il grafico relativo a $E = 4.0$, che risulta qualitativamente molto simile a questi. I risultati sono stati ottenuti in un ciclo di 10^4 MCS a partire da una configurazione tipica per la misura stazionaria (ciò è stato ottenuto “tagliando” il transiente iniziale nella traccia temporale delle misure: si veda la figura 3.5); l'analisi dei dati è stata effettuata col metodo *jackknife* esposto

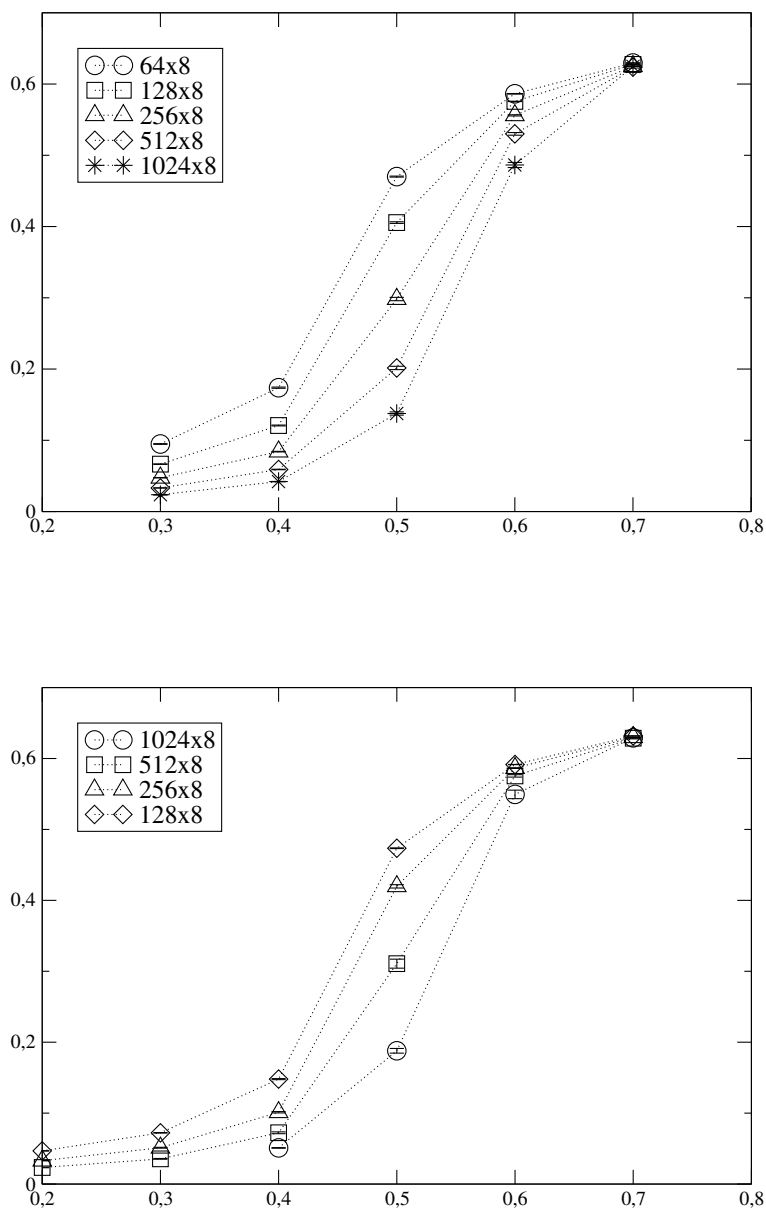


Figura 3.3: Grafici del parametro d'ordine f_{01} in funzione di β , al valore fissato di $E = 2.0$ (sopra) e $E = \infty$ (sotto), per diverse geometrie reticolari. I dati sono ottenuti da campioni di 10^4 MCS.

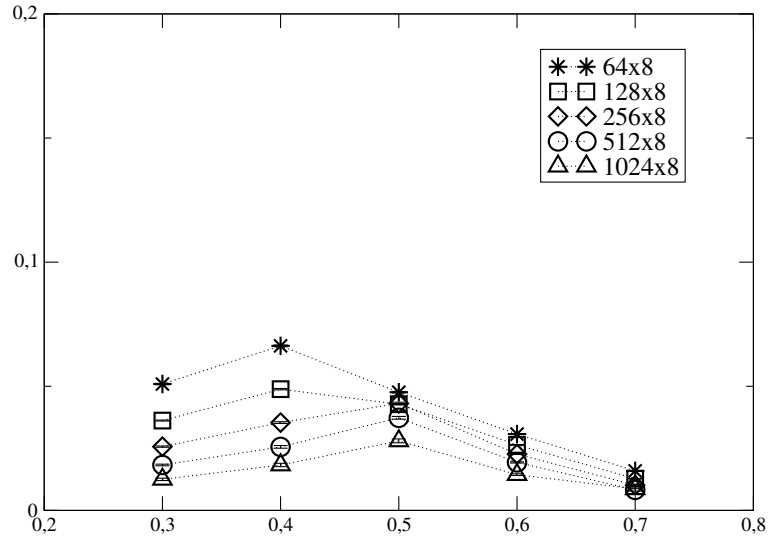


Figura 3.4: Grafico dell'osservabile f_{10} in funzione di β , al valore fissato di $E = 2.0$ e per diverse geometrie reticolari; rispetto ai grafici di figura 3.3 è cambiata la scala nelle ordinate per motivi di chiarezza. I dati sono ottenuti da campioni di 10^4 MCS.

nel Paragrafo 3.1: i campioni sono risultati sufficientemente decorrelati (tempi di autocorrelazione dell'ordine di qualche MCS), come mostrano anche le piccole barre di errore.

Dai grafici appare chiaramente come per $\beta = 0.7$ i sistemi di ogni taglia siano nella fase ordinata caratterizzata dalla striscia orizzontale: i valori misurati di f_{01} per i diversi sistemi risultano molto vicini al valore massimo (3.4); per esempio, nel caso del reticolo 256×8 con $E = \infty$ si ha $f_{01} = 0.6299 \pm 0.0004$, e una configurazione tipica è quella riportata in figura 3.1 (a). Per bassi valori di β invece entrambe le osservabili f_{10} , f_{01} assumono valori bassi (il grafico per f_{10} è riportato in figura 3.4), sintomo dell'assenza di disomogeneità spaziali nella densità: il sistema è in una fase disordinata.

Si osservi come, all'aumentare della grandezza del reticolo, i profili di f_{01} via via si abbassino facendosi sempre più inclinati, ma *mantenendo all'incirca fisso il valore per $\beta = 0.6$* . Per avere una ulteriore conferma a sostegno di questa tesi, abbiamo effettuato alcune simulazioni per $\beta = 0.7$ su un sistema 2048×8 , sia iniziando il sistema casualmente sia facendolo partire da una configurazione "sfavorevole", in cui le particelle sono assemblate in una striscia verticale, come in figura 3.1 (b);

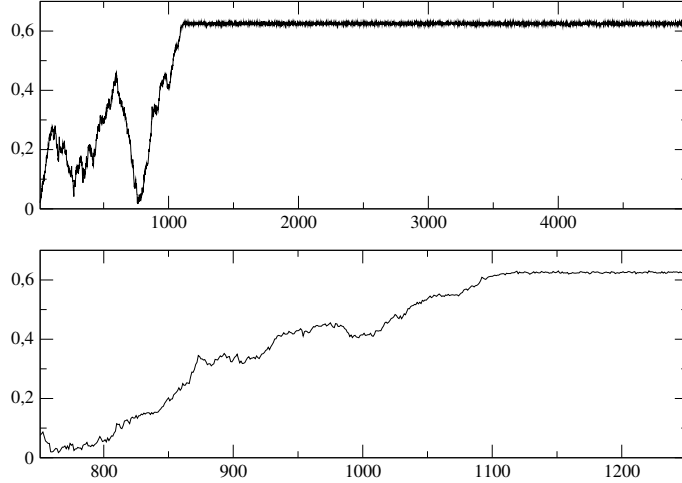


Figura 3.5: Traccia temporale per l’osservabile f_{01} , campionata in un sistema con $E = 2.0$, $\beta = 0.7$ su reticolo 2048×8 , a partire da una “configurazione verticale” come in figura 3.1 (b); sopra è rappresentata la traccia nei primi 5000 MCS, sotto è riportato un ingrandimento della medesima.

in entrambi i casi, dopo un transiente iniziale, si è osservato un rilassamento del sistema verso la fase ordinata: riportiamo in figura 3.5 la traccia temporale di f_{01} per $E = 2.0$. Il valore $\beta = 0.7$ si è dunque rivelato stabile per la fase ordinata in tutte le simulazioni effettuate per valori di $E \geq 2.0$.

Questa osservazione per cui, a E fissato, il “valore minimo” β_0 a cui si osserva la fase ordinata sia grossomodo lo stesso per sistemi di taglia differente è di fondamentale importanza: quello che in generale potrebbe infatti accadere, prendendo in considerazione sistemi via via più grandi, è che β_0 cresca indefinitamente, nel qual caso la fase ordinata non si osserverebbe nel limite termodinamico in nessuna regione dei parametri. Dai dati sembra emergere che, nel nostro caso, ciò non accada.

Vedremo nel seguito come un’ulteriore conferma provenga da considerazioni di tutt’altra natura, derivanti dallo studio dei processi microscopici che determinano la stabilità della fase ordinata.

3.2.4 La parte inferiore del diagramma di fase

Passiamo ora allo studio del diagramma di fase per $E < E_0$: per effettuare l’analisi, abbiamo campionato le osservabili tenendo fisso questa volta il valore di β e facendo

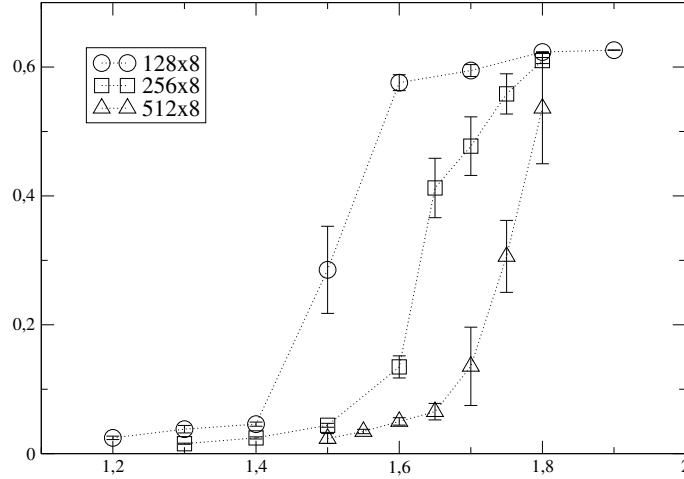


Figura 3.6: Grafico di f_{01} in funzione di E , al valore fissato di $\beta = 0.7$ e per diverse geometrie reticolari; l'elevato valore dell'incertezza sui dati intermedi è dovuto dall'elevata autocorrelazione temporale dei campioni (dell'ordine di qualche centinaia di MCS). I dati sono ottenuti da campioni di 10^4 MCS.

variare E . Per bassi valori di β , il comportamento è quello che si può intuire osservando i grafici discussi nel paragrafo precedente: il sistema è in una fase disordinata, segnalata dal fatto che entrambe le osservabili assumono valori vicini a 0.

Ben diversa è invece la situazione per valori di $\beta > \beta_0$. Rispetto alle simulazioni descritte in precedenza compare qui una novità: variando E dall'alto al basso, si attraversa una fascia di parametri in corrispondenza della quale le configurazioni oscillano tra una striscia orizzontale e una striscia verticale (ciò è evidenziato dall'andamento reciprocamente altalenante di f_{10} e f_{01} , cfr. figura 3.7). Questa peculiare regione, che corrisponde alla regione B del diagramma di fase di figura 3.2, sarà denominata “zona di metastabilità”.

L'analisi dei dati campionati in questa regione (cfr. figura 3.6) si è rivelata poco fruttuosa, per le seguenti due ragioni:

- da un lato le misure che abbiamo ricavato dall'analisi risultano poco significative a causa di un'elevato valore dell'incertezza, dovuto a un'autocorrelazione temporale dei campioni di notevole entità;

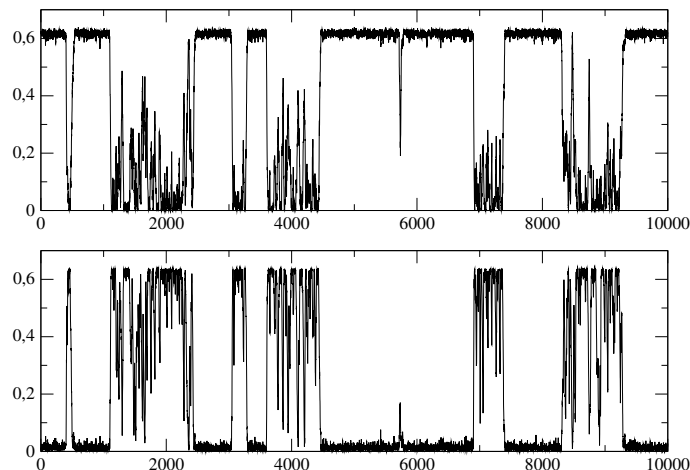


Figura 3.7: Tracce temporali di f_{01} (in alto) e di f_{10} (in basso), campionate in un sistema con $\beta = 0.7$ e $E = 1.65$ su reticolo 256×8 ; come si intuisce anche a vista, il tempo di autocorrelazione di questo campione è elevato, pari a 251 MCS

- dall'altro lato, anche prestando fede ai risultati dell'analisi, si osserva che all'aumentare della grandezza del sistema i profili di f_{01} si spostano, all'incirca della stessa quantità, segnale che siamo ancora “distanti” dal limite termodinamico.

Per poter effettuare un'analisi dei dati abbastanza accurata, sarebbe stato necessario aumentare il numero di campioni almeno di un ordine di grandezza: non ci è parso sensato impiegare una grande quantità di risorse per migliorare campioni che si preannunciano viziati da effetti di volume finito (considerare sistemi più grandi avrebbe reso l'operazione computazionalmente proibitiva). Abbiamo effettuato misure anche per valori più alti di β (0.75 e 0.85): esse risultano ancora meno affidabili, perché questi effetti vengono accentuati dal rallentamento della dinamica in bassa temperatura.

La presenza di forti autocorrelazioni dei campioni è strettamente connessa con la comparsa della nuova tipologia di configurazione metastabile, costituita dalla striscia verticale: come si vede chiaramente dalle tracce temporali riportate in figura 3.7, i tempi di permanenza nelle differenti fasi del sistema diventano infatti macroscopici; avremo modo di tornare sulla questione nel prossimo paragrafo.

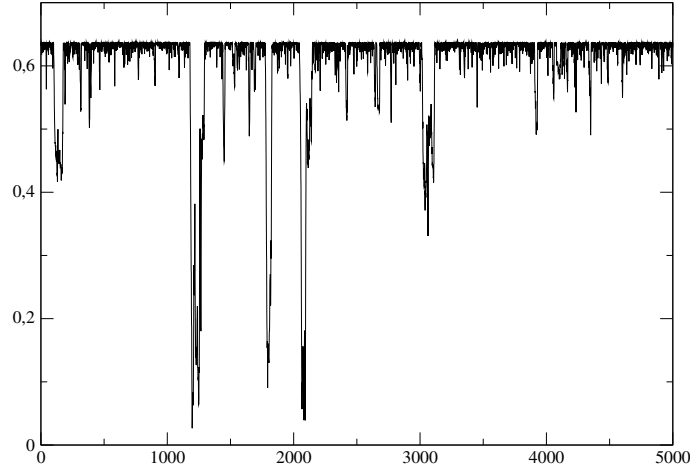


Figura 3.8: Traccia temporale di f_{10} , campionata in un sistema con $\beta = 0.7$ e $E = 1.1$ su reticolo 128×8 ; sono valori dei parametri per cui si osserva la formazione di strisce verticali.

Le considerazioni esposte sollevano due questioni interessanti. Innanzitutto, come si è già notato, scendendo al di sotto della zona di metastabilità si osservano configurazioni caratterizzate da strisce di particelle in direzione ortogonale al campo, spesso da una striscia soltanto: all'inizio credevamo alla possibilità che questa regione dei parametri potesse dare origine nel limite termodinamico a una vera e propria fase, individuata da un elevato valore dell'osservabile f_{10} . In realtà, riconsiderando meglio la questione, ci sono motivi di ritenere che ciò non si verifichi: innanzitutto le tracce temporali per l'osservabile f_{10} per parametri del sistema che dovrebbero corrispondere alla presunta fase (cfr figura 3.8) non sono così nitide come quelle per f_{01} (cfr. figura 3.5). Ma soprattutto si tenga presente che, nel caso estremo $E = 0$, nel limite termodinamico il sistema *non* si ordina, come discusso a pag. 88; se tuttavia si osserva l'evoluzione in volume finito e per valori di β sufficientemente elevati, si vede che le particelle tendono ad aggregarsi in strisce verticali, che spesso collassano in una sola striscia, esattamente come nel nostro caso. Passando a sistemi sempre più grandi, questa striscia è fatalmente destinata a scindersi in più strisce, il cui numero cresce tanto da dare origine nel limite termodinamico a una fase effettivamente disordinata. Si consideri che un tentativo di dirimere la questione mediante una analisi Monte Carlo può richiedere uno sforzo computazionale non indifferente.

In secondo luogo, si vorrebbe capire che cosa succede alla regione di metastabilità nel limite termodinamico: essa si assottiglia fino a scomparire, oppure rimane di ampiezza finita? I nostri dati mostrano che, nel passare dal reticolo 128×8 al reticolo 512×8 , l'intervallo dei valori di E per cui si osserva la metastabilità si sposta ma resta di ampiezza costante, ma questo non costituisce una indicazione affidabile. Inoltre, se è vero che nel limite termodinamico le strisce verticali sono destinate a spezzarsi, in sistemi via via più grandi l'eventuale metastabilità dovrebbe risultare dall'alternanza tra la fase ordinata orizzontalmente e una pseudo-fase costituita da un certo numero di strisce verticali; questo fenomeno (che per sistemi fino a 512×8 non abbiamo osservato) potrebbe essere determinato in sistemi più grandi dalla rottura della striscia orizzontale in diversi punti, secondo il meccanismo che esporremo nel prossimo paragrafo.

Si potrebbe effettuare un'analisi attraverso simulazioni al computer, prendendo in considerazione l'andamento relativo dei tempi di permanenza nelle due diverse "fasi" per reticoli via via più grandi; anche in questo caso, una simile analisi richiederebbe un notevole sforzo computazionale.

Concludiamo la sezione con un'osservazione. Dal grafico riportato in figura 3.6, potrebbe sorgere il dubbio che il profilo di f_{01} si possa spostare indefinitamente nel limite termodinamico. Una risposta negativa a questa eventualità viene data dai risultati discussi nel paragrafo precedente, in cui abbiamo visto che, quando $\beta > \beta_0$, per $E > E_0$ si osserva la fase ordinata in una striscia orizzontale.

Più in generale, se siamo sicuri che per un certo valore di $\tilde{\beta}$ e per $E = \infty$ il sistema si ordina in una striscia parallela al campo, il fatto che usiamo la dinamica di Metropolis ci dà buone garanzie sul fatto che il medesimo ordinamento si osservi per tutti i valori di $E \gg 24\tilde{\beta}$ (e dunque esiste un'intera regione dei parametri in cui si manifesta l'ordinamento). Direttamente dalla definizione delle frequenze segue infatti che, se $E > 24\tilde{\beta}$, il salto di una particella in direzione del campo viene sempre accettato, indipendentemente dalla differenza di energia tra le configurazioni iniziale e finale: $24\tilde{\beta}$ è proprio il valore massimo che può assumere la differenza di energia tra due configurazioni connesse dal salto di una particella. Quindi la dinamica di un sistema con $E > 24\tilde{\beta}$ differisce da quella di un sistema con $E = \infty$ solo per quanto riguarda i salti in direzione opposta al campo, che nel secondo caso sono proibiti, mentre nel primo caso avvengono con frequenza $\sim \exp[-\tilde{\beta}\Delta\mathcal{H} - E]$; tuttavia, per alti valori di E questa frequenza diventa trascurabile.

3.2.5 Meccanismi microscopici di instabilità

Cercheremo ora di comprendere meglio il comportamento del sistema nella zona di metastabilità mediante un approccio di tipo fenomenologico, basato sull'osservazione diretta delle configurazioni del sistema durante l'evoluzione della simulazione. Abbiamo già descritto ciò che avviene in questa regione: il sistema trascorre periodi di tempo nella striscia orizzontale alternati a periodi nella striscia verticale, e i passaggi dall'una all'altra avvengono in modo brusco, come si evince facilmente dall'analisi delle tracce temporali in figura 3.7.

C'è tuttavia un particolare molto significativo che salta all'occhio osservando direttamente l'evoluzione e che sfugge invece alla semplice traccia temporale: il passaggio dalla configurazione orizzontale a quella verticale *avviene sempre con lo stesso meccanismo*, di cui è fornito un esempio nella successione di immagini riportata in figura 3.9. Una semplice descrizione del meccanismo è la seguente: la dinamica agisce sull'interfaccia della striscia rendendola frastagliata, a causa delle particelle che entrano ed escono dalla medesima. Queste irregolarità dell'interfaccia determinano la distruzione della striscia soltanto se si viene a formare una “configurazione a T”, come in figura 3.9 (2): non è sufficiente che la striscia si spezzi, occorre anche che all'estremità destra della frattura le particelle si organizzino in una struttura ad anello, che abbraccia il reticolo nella direzione trasversa (si ricordino le condizioni al bordo periodiche). La formazione di questa T instaura un processo a cascata in cui le particelle che si staccano dalla striscia vanno ad accumularsi sul lato sinistro della struttura ad anello, fino a formare una configurazione compatta verticale. Ciò è possibile perché nella zona di metastabilità l'intensità del campo non è troppo elevata, e dunque l'interfaccia verticale che si forma sul lato sinistro della struttura ad anello mantiene in genere la sua stabilità per il tempo sufficiente a formare la striscia verticale.

Naturalmente anche la configurazione verticale formatasi non risulta stabile, ma il meccanismo con cui essa decade nella striscia orizzontale, sebbene altrettanto interessante, si rivela meno semplice e non sarà qui discusso. Cercheremo ora di trarre le conseguenze da questo approccio.

Se la nostra spiegazione qualitativa è corretta e le fluttuazioni dell'interfaccia sono “senza memoria”, dobbiamo aspettarci che la formazione di una T a partire da una configurazione a striscia orizzontale sia analoga al processo di decadimento di una sostanza instabile: se in un istante si osserva la striscia orizzontale ancora

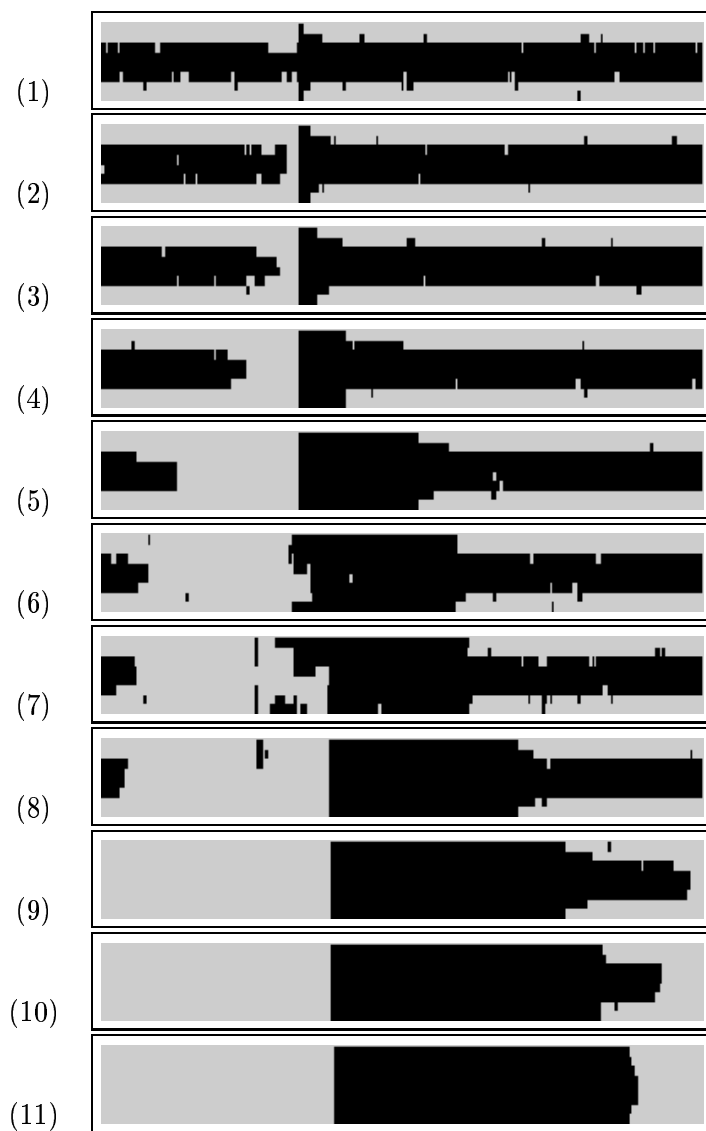


Figura 3.9: Rottura della striscia orizzontale causata dalla formazione di una T , su reticolo 256×8 ; se si guarda ai siti neri come particelle, il campo punta verso sinistra. Le immagini non sono equidistanziate temporalmente.

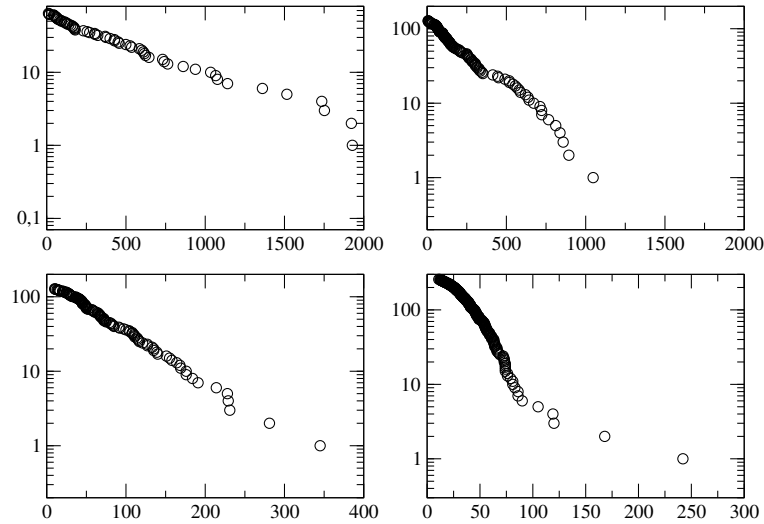


Figura 3.10: Tempi di formazione di una T a partire da una striscia orizzontale, per $\beta = 0.75$, $E = 1.36$ e per i reticoli 96×8 e 128×8 (parte alta), 256×8 e 512×8 (parte bassa); il numero iniziale di sistemi è $N_0 = 64$ per il reticolo 96×8 , $N_0 = 128$ per i sistemi 128×8 e 256×8 e $N_0 = 256$ per il reticolo 512×8 . Si osservi che i grafici hanno scale differenti, e che le ordinate sono in scala logaritmica.

intera, il tempo che mediamente occorrerà attendere per la formazione di un T non dovrebbe dipendere da quanto la striscia ha già vissuto. In queste ipotesi, partendo da un ensemble di strisce orizzontali al tempo 0 che evolvono indipendentemente, il numero di strisce ancora intatte al tempo t dovrebbe presentare un andamento esponenziale decrescente in funzione di t .

Abbiamo effettuato questo tipo di simulazione, su reticoli lunghi 96, 128, 256 e 512: i risultati sono riportati in figura 3.10. Come si vede, l'accordo risulta discreto, a parte per il reticolo 512×8 , che presenta una lunga coda che al momento non siamo in grado di spiegare; si osservi comunque che i dati fuori dalle aspettative sono in numero molto ridotto, in rapporto a un campione iniziale di 256 sistemi. Una semplice osservazione dei grafici mostra che i tempi medi di formazione della T tendono a diminuire col crescere della dimensione del reticolo: questo appare sensato, dal momento che la formazione di una T è essenzialmente un fenomeno locale (interessa cioè una regione di grandezza fissata, che non aumenta con l'aumentare

del volume del sistema) e dunque la sua probabilità per unità di tempo aumenta col crescere del numero di siti (si ricordi che l'unità di tempo del Monte Carlo scala con il volume del sistema). Comunque, i dati di cui disponiamo non permettono di discutere quantitativamente la dipendenza di questo tempo medio dalla dimensione del sistema.

Concludiamo infine questa esposizione con alcune considerazioni che, sebbene a livello solo qualitativo, mostrano come una comprensione dei meccanismi microscopici di instabilità possa fornire preziose informazioni sul comportamento del sistema su grande scala.

A un sistema nella regione di metastabilità corrisponde un valore di $\beta \gtrsim \beta_0$, e un valore di $E \lesssim E_0$; se ora immaginiamo di aumentare il campo elettrico, il sistema si porterà nella regione \mathcal{O} del diagramma di fase, e in generale non si osserverà più il decadimento della striscia orizzontale, nel limite termodinamico, se tale striscia è veramente stabile. Generalizzando in un certo senso le nostre osservazioni precedenti, avanziamo l'ipotesi che, anche per questi valori dei parametri, un'eventuale distruzione della striscia si generi sempre a partire da una T. In questa ipotesi, risulta significativo studiare l'evoluzione del sistema al variare di E , a partire da una configurazione a T costruita artificialmente. Una prima analisi si rivela interessante: si scopre infatti che, considerando valori di E sempre maggiori, la configurazione iniziale a T conduce sempre più di rado alla striscia verticale e viene invece sempre più spesso "riassorbita", ripristinando la striscia orizzontale; sembra inoltre che il valore di soglia per E , oltre il quale le T vengono sempre riassorbite, *non* si sposti col crescere della lunghezza del sistema. Se questo fatto fosse confermato da una analisi quantitativa, esso potrebbe essere considerato alla stregua di una prova di stabilità per la striscia orizzontale, rispetto a perturbazioni che la porterebbero alla distruzione: avremmo in definitiva un'ulteriore conferma dell'esistenza della fase ordinata nel limite termodinamico.

3.3 Conclusioni e prospettive

Abbiamo dunque raggiunto l'obiettivo di evidenziare la presenza di una fase ordinata per il modello Q1DLG₂, in corrispondenza di valori elevati dei parametri E e β : questa fase, caratterizzata dalla formazione di una striscia compatta di particelle in direzione parallela al campo, non è altro che il corrispettivo quasi unidimensionale della fase ordinata che si osserva nel modello KLS bidimensionale.

Abbiamo quindi iniziato uno studio sistematico del diagramma di fase; nel corso dell'analisi, sono state sollevate alcune questioni che non hanno trovato qui risposta, in particolare quella legata all'esistenza nel limite termodinamico della regione di metastabilità.

Si è poi visto come uno studio a livello locale dei meccanismi di instabilità del sistema, a partire da configurazioni "ordinate", possa rivelare interessanti regolarità e contribuire a una comprensione più profonda del comportamento su larga scala.

Come primo passo per lo studio di un modello che non è mai stato considerato in letteratura, questo lavoro ha dovuto necessariamente assumere il carattere di un'analisi preliminare. Ora che il comportamento del sistema nelle diverse regioni del diagramma di fase è stato qualitativamente compreso, sarà possibile procedere ad uno studio più accurato, al costo di uno sforzo computazionale tale da andare al di là delle risorse normalmente a disposizione per una tesi di laurea; ciò consentirà di caratterizzare più precisamente i risultati già ottenuti e, possibilmente, di dare risposta alle questioni rimaste aperte.

Infine, sarebbe interessante poter affiancare alle simulazioni una descrizione del nostro sistema di tipo idrodinamico, in cui i gradi di libertà microscopici siano sostituiti da parametri di carattere mesoscopico, quali tensione superficiale, conducibilità, ecc. Avendo in mente i fenomeni collettivi che abbiamo discusso nel corso della nostra analisi, come la formazione e la rottura delle strisce (e anche quelli su cui non ci siamo soffermati, come la corrente di particelle che attraversa il sistema nelle sue diverse fasi), si comprende come una simile descrizione possa rendere conto di tali fenomeni a una differente scala di osservazione, contribuendo a una comprensione più profonda della fisica del sistema.

Appendice A

Questioni tecniche

Raccogliamo in questa appendice alcuni calcoli e alcune derivazioni di carattere tecnico.

A.1 Costruzione del processo di Markov

Procediamo a formalizzare il metodo alternativo di costruzione per i processi di particelle su reticolo, accennato nella conclusione del paragrafo 1.1.3.

Supponiamo sempre che lo spazio delle configurazioni \mathcal{X} sia finito, e numeriamo le configurazioni: C_1, \dots, C_N , con $N = \#\mathcal{X}$.

Sia $\boldsymbol{\tau}$ un vettore di N variabili aleatorie reali indipendenti, in cui τ_i è distribuita esponenzialmente con tempo caratteristico $\bar{\tau}(C_i)$. Sia \mathbf{Y} un altro vettore di N variabili aleatorie indipendenti, ciascuna a valori nell'insieme finito $\{1, \dots, N\}$: la legge di \mathbf{Y}_i sia data da

$$\text{Prob}(\mathbf{Y}_i = j) = \frac{w_{C_i \rightarrow C_j}}{\bar{\tau}(C_i)}, \quad i, j = 1, \dots, N.$$

Indichiamo con $(\boldsymbol{\tau}, \mathbf{Y})$ la coppia di questi due vettori aleatori, dove $\boldsymbol{\tau}$ e \mathbf{Y} sono presi indipendenti.

Consideriamo ora una successione di variabili aleatorie $\{(\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}, \mathbf{Y}^{(\alpha)}), \alpha \in \mathbb{N}\}$ indipendenti e identicamente distribuite, ciascuna con la legge di $(\boldsymbol{\tau}, \mathbf{Y})$. Lo spazio di arrivo di questa successione è $\mathcal{W} \equiv [\mathbb{R}^N \times \{1, \dots, N\}^{\mathbb{N}}]^{\mathbb{N}}$; su di esso è definita la misura immagine indotta dalla successione. Ora costruiremo un'applicazione Υ , da \mathcal{W} in $T([0, +\infty), \mathcal{X})$: la misura immagine indotta da Υ sullo spazio delle

traiettorie sarà proprio la misura del nostro processo stocastico.

$$(\Omega, \mathbb{P}) \xrightarrow{\{(\tau^{(\alpha)}, \mathbf{Y}^{(\alpha)})\}} \mathcal{W} \xrightarrow{\Upsilon} T([0, +\infty), \mathcal{X})$$

Definiamo dunque l'applicazione. Dato un elemento $\omega = \{(\tau^{(\alpha)}, \mathbf{Y}^{(\alpha)}), \alpha \in \mathbb{N}\}$ di \mathcal{W} , ad esso associamo la traiettoria ζ_t costruita come segue:

- si parte con la configurazione iniziale fissata C_{i_0} , fino all'istante $t_0 \equiv \tau_{i_0}^{(0)}$:

$$\zeta_t = C_{i_0} \quad \text{per } t \in [0, t_0);$$

- si prosegue quindi con la configurazione C_{i_1} , dove $i_1 = Y_{i_0}^{(0)}$, per un intervallo di tempo $t_1 \equiv \tau_{i_1}^{(1)}$:

$$\zeta_t = C_{i_1} \quad \text{per } t \in [t_0, t_0 + t_1),$$

e così via.

In altri termini, se la configurazione del sistema dopo l' α -esima mossa elementare è C_k , bisogna attendere un intervallo di tempo $\tau_k^{(\alpha)}$ per la mossa successiva: dopo questa mossa, la nuova configurazione del sistema è C_i , con $i = Y_k^{(\alpha)}$.

A.2 Rappresentazioni dell'algebra del TASEP

Affrontiamo il problema di come costruire esplicitamente rappresentazioni per l'algebra del processo di esclusione totalmente asimmetrico: occorre determinare due matrici D , E e due vettori $|V\rangle$, $|W\rangle$ di uno spazio di Hilbert ausiliario che soddisfino le seguenti relazioni algebriche:

$$DE = D + E \tag{A.1}$$

$$D|V\rangle = \frac{1}{\beta}|V\rangle \tag{A.2}$$

$$\langle W|E = \frac{1}{\alpha}\langle W|. \tag{A.3}$$

Mostriamo innanzitutto che, escludendo il caso $\alpha + \beta = 1$ in cui è possibile la già menzionata rappresentazione unidimensionale $D = 1/\beta$, $E = 1/\alpha$, le matrici devono necessariamente essere infinito-dimensionali. Distinguiamo due casi:

- (i) se le matrici *commutano*, dalle (A.1)-(A.3) abbiamo che

$$\frac{1}{\alpha\beta}\langle W|V\rangle = \langle W|DE|V\rangle = \langle W|D + E|V\rangle = \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta}\right)\langle W|V\rangle,$$

e dunque deve essere $\alpha + \beta = 1$. Quindi, se $\alpha + \beta \neq 1$, le matrici non possono commutare;

(ii) se due matrici *non commutanti* soddisfano le relazioni (A.1)-(A.3), esse sono infinito-dimensionali. Infatti, da queste relazioni segue che $E - I$ è iniettiva:

$$E|x\rangle = |x\rangle \Rightarrow D|x\rangle = DE|x\rangle = (D + E)|x\rangle = D|x\rangle + |x\rangle \Rightarrow |x\rangle = 0.$$

Se E fosse finito-dimensionale, dall'iniettività seguirebbe l'invertibilità e per la (A.1) si avrebbe $D = E(E - I)^{-1}$: ma allora D sarebbe funzione di E e dunque commuterebbe con essa, contro l'ipotesi.

Per fornire una rappresentazione esplicita dell'algebra, si noti che ancora dalla relazione (A.1) segue che $DE^n = (D + E)E^{n-1} = DE^{n-1} + E^n$, e per iterazione $DE^n = D + E + E^2 + \dots + E^n$; scegliendo quindi come base per lo spazio ausiliario $\{|V\rangle, E|V\rangle, E^2|V\rangle, \dots\}$ si è condotti alla seguente forma per le matrici:

$$D = \begin{pmatrix} 1/\beta & 1/\beta & 1/\beta & 1/\beta & \dots \\ 0 & 1 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad E = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

È facile verificare che, scegliendo i seguenti vettori

$$(|W\rangle = \left(1, \left(\frac{1}{\alpha}\right), \left(\frac{1}{\alpha}\right)^2, \dots \right) \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

sono soddisfatte le relazioni algebriche. Diverse altre scelte per le matrici e i vettori sono possibili, come mostrano in dettaglio Derrida et al. in [22]; noi ci limitiamo a riportarne una che ha il pregio di evidenziare la simmetria particelle-buche del modello, e che corrisponde alle scelte

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

$$(W| = \kappa \left(1, \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right), \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right)^2, \dots \right) \quad |v) = \kappa \begin{pmatrix} 1 \\ \left(\frac{1-\beta}{\beta} \right) \\ \left(\frac{1-\beta}{\beta} \right)^2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

dove $\kappa = \sqrt{(\alpha + \beta - 1)/\alpha\beta}$.

A.3 Formule asintotiche per il TASEP

La derivazione della formula (2.14), che riscriviamo

$$(W| C^L |V) = \sum_{p=1}^L \frac{p(2L-1-p)!}{L!(L-p)!} \frac{(1/\beta)^{p+1} - (1/\alpha)^{p+1}}{(1/\beta) - (1/\alpha)}, \quad (\text{A.8})$$

a partire dalle relazioni (A.1)-(A.3) non presenta particolari difficoltà. Il punto cruciale è che la relazione (A.1) permette di esprimere le potenze della matrice $C \equiv D + E$ in termini dei soli monomi della forma $E^a D^b$ grazie a un processo di riduzione del grado, che è poi il meccanismo che genera le relazioni di ricorsione per le misure stazionarie relative a reticoli di differenti grandezze. Ci si rende conto di ciò analizzando “con le mani” i primi casi:

$$\begin{aligned} C^2 &= D^2 + DE + ED + E^2 = D + E + D^2 + ED + E^2 \\ C^3 &= C^2(D + E) = \dots = 2D + 2E + \\ &\quad + 2D^2 + 2ED + 2E^2 + D^3 + ED^2 + E^2D + E^3. \end{aligned}$$

Si ottiene la seguente formula generale:

$$C^n = \sum_{p=1}^n \frac{p(2n-1-p)!}{n!(n-p)!} \sum_{q=0}^p E^q D^{p-q}, \quad (\text{A.9})$$

che può (con un po' di fatica) essere dimostrata per induzione. Da questa, prendendo gli elementi di matrice con i vettori $|V)$, $|W)$ e ricordando le (A.2),(A.3), segue immediatamente la (A.8).

Lo sviluppo asintotico della (A.8) si ottiene isolando dalla sommatoria il termine che dà maggior contributo nel limite termodinamico: se introduciamo la funzione

$$F_n(x) \equiv \sum_{p=2}^{L+1} a_{p,n} x^p \quad a_{p,n} \equiv \frac{(p-1)(2L-p)!}{L!(L-p+1)!},$$

abbiamo che $(W|C^n|V) = (1/\beta - 1/\alpha)^{-1}\{F_n(1/\beta) - F_n(1/\alpha)\}$; occorre dunque determinare il massimo in p di $a_{p,n}$, nel limite termodinamico. Si ricava facilmente che

$$\begin{aligned}
 F_n\left(\frac{1}{\beta}\right) &\simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}(2\beta-1)^2} \frac{4^n}{n^{3/2}} && \text{per } \beta > \frac{1}{2} \\
 &\frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{4^n}{n^{1/2}} && \text{per } \beta = \frac{1}{2} \\
 &(1-2\beta) \left(\frac{1}{\beta(1-\beta)}\right)^{n+1} && \text{per } \beta < \frac{1}{2},
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

da cui seguono le espressioni asintotiche cercate per $(W|C^L|V)$, che elenchiamo qui di seguito: da esse si ottiene immediatamente il diagramma di fase per la corrente di pag. 49. Essendo $(W|C^L|V)$ una funzione simmetrica di α e β , riportiamo le formule nel caso $\alpha < \beta$.

$$\begin{aligned}
 (W|C^L|V) &\simeq \frac{\alpha\beta}{\sqrt{\pi}(\beta-\alpha)} \left[\frac{1}{(2\alpha-1)^2} - \frac{1}{(2\beta-1)^2} \right] \frac{4^L}{L^{3/2}} && \text{per } \frac{1}{2} < \alpha < \beta \\
 &\frac{\alpha^2}{\sqrt{\pi}(2\alpha-1)^3} \frac{4^{L+1}}{L^{3/2}} && \text{per } \frac{1}{2} < \alpha = \beta \\
 &\frac{2\beta}{\sqrt{\pi}(2\beta-1)} \frac{4^L}{L^{1/2}} && \text{per } \alpha = \frac{1}{2} < \beta \\
 &4^L && \text{per } \alpha = \beta = \frac{1}{2} \\
 &\frac{\beta(1-2\alpha)}{(\beta-\alpha)(1-\alpha)} \frac{1}{\alpha^L(1-\alpha)^L} && \text{per } \alpha < \frac{1}{2}, \alpha < \beta \\
 &\frac{(1-2\alpha)^2}{(1-\alpha)^2} \frac{L}{\alpha^L(1-\alpha)^L} && \text{per } \alpha = \beta < \frac{1}{2}.
 \end{aligned}$$

Consideriamo infine le formule (2.15) e (2.16): la loro derivazione non presenta particolari difficoltà; esse seguono immediatamente dalla seguente relazione, anch'essa dimostrabile per induzione a partire dalle (A.1)-(A.3).

$$DC^n = \sum_{p=0}^{n-1} \frac{2p!}{p!(p+1)!} C^{n-p} + \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} D^p.$$

Desidero ringraziare innanzitutto il prof. Sergio Caracciolo, per avermi introdotto a questo ramo della fisica e per avermi seguito in questo lavoro di tesi.

Un grazie davvero speciale va a Massimiliano Gubinelli: senza il suo enorme aiuto e la sua disponibilità, il mio rapporto con il calcolatore e più in generale con la materia avrebbe preso una piega ben diversa...

Devo moltissimo ad Andrea Gambassi e Andrea Sportiello, per avermi seguito in questi mesi, con infinita pazienza e inesauribile ottimismo.

Grazie anche al prof. Franco Flandoli, per avermi fatto conoscere un affascinante ramo della matematica e per la sua grande disponibilità.

...è normale arrivare a scrivere i ringraziamenti proprio all'ultimo minuto?

Grazie ai miei genitori, a cui questa tesi è dedicata, per essermi sempre stati vicini in ogni situazione, e grazie alla mia sorellina, capace di sopportare un fratello talvolta lunatico.

Grazie a tutti i miei compagni d'anno, nonché alle mie compagne d'anno Katia (credevi che non ti avrei citato?) e Corinna, già oltreoceano, a Beppe, Vincenzo, Eleonora e a tutti gli abitanti dell'amato Thourar...

Grazie a tutti gli amici di casa che in questi anni pisani mi sono stati vicini, grazie ai compagni di In Cerca di Kau per un viaggio che prosegue, grazie ai vecchi amici del liceo, grazie Chiara, Erika, Dario, Ilaria... grazie Elena per il tuo sorriso, grazie Stefano per la tua fiducia...

Grazie a te, dolce Laura,
è bello camminare accanto a te,
è importante sentire che ci sei.

Bibliografia

- [1] D. Ruelle, *A departure from equilibrium*, Nature **414** 263 (15-09-2001)
- [2] E. Brézin, J. C. Le Guillou e J. Zinn-Justin in *Phase Transition and Critical Phenomena* vol.6, C. Domb e M. S. Green editori, Academic Press, London (1976)
- [3] C. Di Castro e G. Jona-Lasinio in *Phase Transition and Critical Phenomena* vol.6, C. Domb e M. S. Green editori, Academic Press, London (1976)
- [4] T. M. Liggett, *Interacting Particle Systems*, Springer-Verlag (1985)
- [5] N. Pintacuda, *Probabilità*, Zanichelli
- [6] S. Katz, J. L. Lebowitz e H. Spohn, *Phase transitions in stationary nonequilibrium states of model lattice systems*, Phys. Rev. **B28** 1655 (1983)
S. Katz, J. L. Lebowitz e H. Spohn, *Nonequilibrium Steady States of Stochastic Lattice Gas Models of Fast Ionic Conductors*, J. Stat. Phys. **34** 497 (1984)
- [7] B. Schmittmann and R. P. K. Zia, *Statistical mechanics of driven diffusive systems*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol.17, C. Domb and J. L. Lebowitz editors. Academic Press, London (1995)
- [8] M. B. Salamon, *Physics of Superionic Conductors* in *Topics in Current Physics* vol. 15, Springer, Berlin-Heidelberg-New York (1979)
- [9] W. Dietrich, P. Fulde e I. Peschel, *Theoretical models for superionic conductors*, Adv. Phys **29** 527 (1980)
- [10] G. Gallavotti, *Statistical Mechanics: a Short Treatise*, Springer-Verlag
- [11] H. Spohn, *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*, Springer-Verlag

- [12] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, L. P. Pitaevskij, *Fisica Statistica - parte prima* in *Fisica teorica*, vol. 5, Editori Riuniti - Edizioni Mir
- [13] M. Q. Zhang, J. -S. Wang, J. L. Lebowitz e J. L. Vallés, *Power Law Decay of Correlations in Stationary Nonequilibrium Lattice Gases with Conservative Dynamics*, J. Stat. Phys. **52** 1461 (1988)
- [14] P. L. Garrido, J. L. Lebowitz, C. Maes e H. Spohn, *Long-range correlations for conservative dynamics*, Phys. Rev. **A42** 1954 (1990)
- [15] G. Grinstein, *Generic scale invariance in classical nonequilibrium systems*, J. Appl. Phys. **69** 5441 (1991)
- [16] M. R. Evans, *Phase Transitions in one dimensional non equilibrium systems*, cond-mat/0007293 (2000)
- [17] Per una rassegna si veda *Traffic and Granular Flow '97*, M. Schreckenberg e D. Wolf ed. (1998) Springer
- [18] J. Krug, Adv. Physics **46** 139 (1997)
- [19] K. Heckmann, *Passive permeability of cell membranes, biomembranes* vol. 3, New York: Plenum Press
- [20] T. Chou e D. Lohse, Phys. Rev. Lett. **82** 3552 (1999)
- [21] C. T. MacDonald, J. H. Gibbs e A. C. Pipkin, *Kinetic of biopolymerization on nucleic acid templates*, Biopolymers **6** 1-25
- [22] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim e V. Pasquier, *Exact solution of a 1D asymmetric exclusion model using a matrix formulation*, J. Phys. A: Math. Gen. **26** 1493-1517 (1993)
- [23] B. Derrida, E. Domany e D. Mukamel, *An exact solution of a one dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries*, J. Stat. Phys. **69** 667-687 (1992)
- [24] B. Derrida e M. R. Evans, *Exact correlation functions in an asymmetric exclusion model with open boundaries*, J. Physique I **3** 311-322 (1993)
- [25] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd edition, John Wiley & Sons, Inc. (1987)

- [26] E. D. Andjel, M. Bramson e T. M. Liggett, *Shocks in the asymmetric simple exclusion process*, Prob. Theory Rel. Fields **78** 231-247 (1988)
- [27] K. Krebs e S. Sandow, *Matrix Product Eigenstates for One-Dimensional Stochastic Models and Quantum Spin Chains*, J. Phys. A: Math. Gen. **30** 3165 (1997)
- [28] F. H. L. Essler e V. Rittenberg, *Representations of the quadratic algebra and partially asymmetric diffusion with open boundaries*, J. Phys. A: Math. Gen. **29** 3375-3407 (1996)
- [29] T. Sasamoto, *One-dimensional partially asymmetric simple exclusion process with open boundaries: orthogonal polynomials approach*, J. Phys. A: Math. Gen. **32** 7109-7131 (1999)
- [30] R. A. Blythe, M. R. Evans, F. Colaiori e F. H. L. Essler, *Exact solution of a partially asymmetric exclusion model using a deformed oscillator algebra*, J. Phys. A: Math. Gen. **33** 2313-2332 (2000)
- [31] K. Klauck e A. Schadschneider, *On the ubiquity of matrix-product states in one dimensional stochastic processes with boundary interactions*, cond-mat/9812201 (1998)
- [32] K. Mallick, S. Mallick e N. Rajewsky, *Exact solution of an exclusion process with three classes of particles and vacancies*, cond-mat/9903248 (1999)
- [33] B. Derrida, S. A. Janowski, J. L. Lebowitz e E. R. Speer, *Exact solution of the totally asymmetric exclusion process: shock profiles*, J. Stat. Phys. **73** 813, (1993)
- [34] K. Mallick, *Shocks in the asymmetric exclusion model with an impurity*, J. Phys. A: Math. Gen. **29** 5375-5386 (1996)
- [35] H. W. Lee, V. Popkov e D. Kim, *Two-way traffic flow: Exactly solvable model of traffic jam*, J. Phys. A: Math. Gen. **30** 8497-8513 (1997)
- [36] S. A. Janowski e J. L. Lebowitz, *Finite size effects and shock fluctuations in the asymmetric simple exclusion process*, Phys. Rev. A **45** 618 (1992)

- [37] B. Derrida, J. L. Lebowitz e E. R. Speer, *Large Deviation of the Density Profile in the Steady State of the Open Symmetric Simple Exclusion Process*, `cond-mat/0109346` (2001)
- [38] B. Derrida, J. L. Lebowitz e E. R. Speer, *Exact Large Deviation Functional of a Stationary Open Driven Diffusive System: the Asymmetric Simple Exclusion Process*, `cond-mat/0205353` (2002)
- [39] W. B. Li, K. J. Zhang, J. V. Sengers, R. W. Gammon e J. M. Ortiz de Zàrate, *Concentration fluctuations in a polymer solution under a temperature gradient*, Phys. Rev. Lett. **81** 5580-5583 (1998)
- [40] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio e C. Landim, *Macroscopic fluctuation theory for stationary nonequilibrium states*, J. Stat. Phys. **107**, 635-675 (2002)
- [41] S. Caracciolo, A. Gambassi, M. Gubinelli e A. Pellissetto, *Finite-Size Critical Behaviour of the Driven Lattice Gas*, `cond-mat/0106221` (2001)
- [42] M. Gubinelli, *Leggi di Scala per Fenomeni Critici fuori dall'Equilibrio Termodinamico*, Rel. Prof. S. Caracciolo, Tesi di Laurea A. A. 1997/98, Università degli Studi di Pisa
- [43] A. Gambassi, *Determinazione Analitica delle Funzioni di Scala per Fenomeni Critici fuori dall'Equilibrio Termodinamico*, Rel. Prof. S. Caracciolo, Tesi di Laurea A. A. 1998/99, Università degli Studi di Pisa
- [44] M. N. Barber, *Finite size scaling*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol.5, C. Domb and M. S. Green editors, Academic Press, New York (1983)
- [45] B. Efron e R. J. Tibshirani, *An introduction to the bootstrap*, Chapman & Hall, London (1993)
- [46] G. Korniss, B. Schmittmann e R. K. P. Zia, *Long-range order in a quasi one-dimensional non-equilibrium three-state lattice gas*, Europhys. Lett. **45** (4) 431 (1999)