

# Simulazione Monte Carlo

“Monte Carlo” è un’insieme di metodi computazionali che permette di risolvere problemi anche molto complessi traendo stime attraverso simulazioni di random.

## Evoluzione random

“Monte Carlo” è sinonimo di Random. Per questo il metodo porta il nome della popolare location di gioco d’azzardo e casinò.





# Approcci Monte Carlo

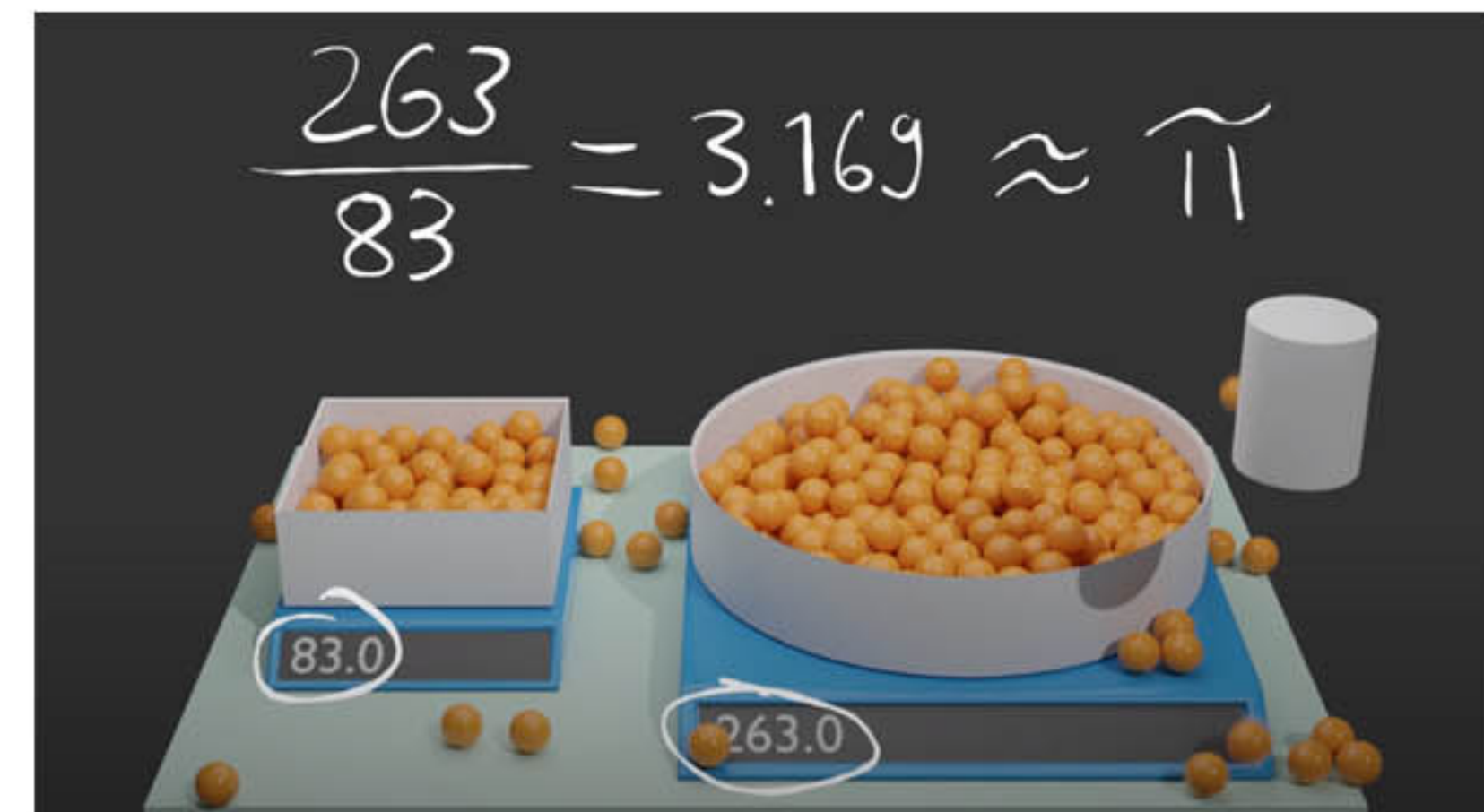
- Definire un dominio di possibili dati in input.
- Generare input casuali dal dominio con una certa distribuzione di probabilità determinate.
- Eseguire un calcolo deterministico utilizzando i dati in ingresso (input).
- Aggregare i risultati dei calcoli singoli nel risultato finale.





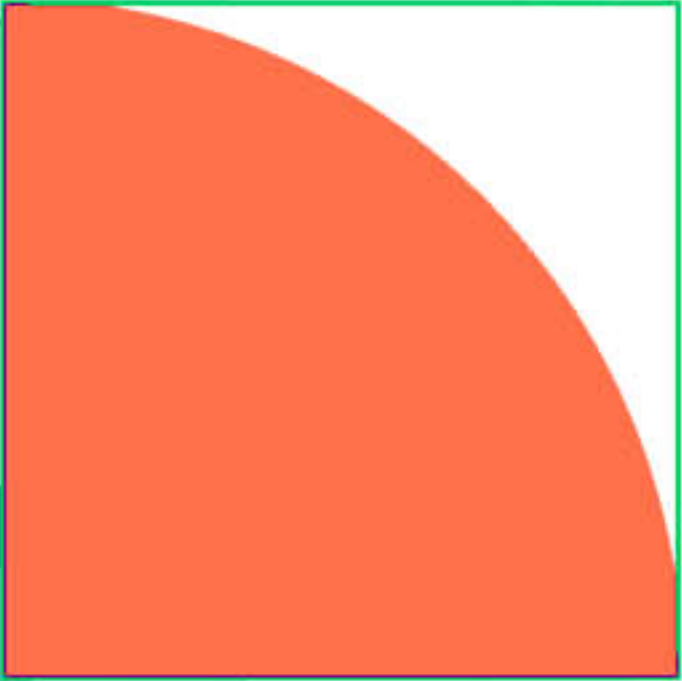
# Monte Carlo per calcolare $\pi$

Il metodo "Monte Carlo" è quindi una strategia di risoluzione di problemi che utilizza la statistica: se la probabilità di un certo evento è  $P$  possiamo simulare in maniera random questo evento e ottenere  $P$  facendo (numero di volte in cui il nostro evento è avvenuto)/(simulazioni totali).





# Monte Carlo per calcolare $\pi$



In questo modo sappiamo che l'area del quadrato è 1 e l'area dell'area arancio è  $\pi/4$ .

Se generiamo  $N$  numeri random all'interno del quadrato, il numero di punti che cadono nel cerchio  $M$  diviso il numero totale di numeri generati  $N$  dovrà approssimare appunto l'area del cerchio e quindi  $\pi/4$ .

$$\pi = 4 * M / N$$

```
var rand = new Random();
var pointsNumber = 1000000;

var insideCircle = 0;
var outsideCircle = 0;

for (int i = 0; i < pointsNumber; i++)
{
    var x = rand.NextDouble();
    var y = rand.NextDouble();

    if (x * x + y * y < 1)
        insideCircle++;
    else
        outsideCircle++;
}

var pi = 4.0 * insideCircle / pointsNumber;
```



# Utilità del metodo Montecarlo

Gli algoritmi Monte Carlo tendono ad essere semplici, flessibili e scalabili. Quando applicate a sistemi fisici, le tecniche Monte Carlo possono ridurre i modelli complessi a un insieme di eventi e interazioni di base.

Infatti, questa tecnica viene utilizzata per riprodurre e risolvere numericamente un problema in cui sono coinvolte anche variabili aleatorie, e la cui soluzione per via analitica risulta troppo complessa o impossibile. Inoltre, consente di testare più facilmente e con elevato grado di dettaglio gli effetti di modificazioni nelle variabili.

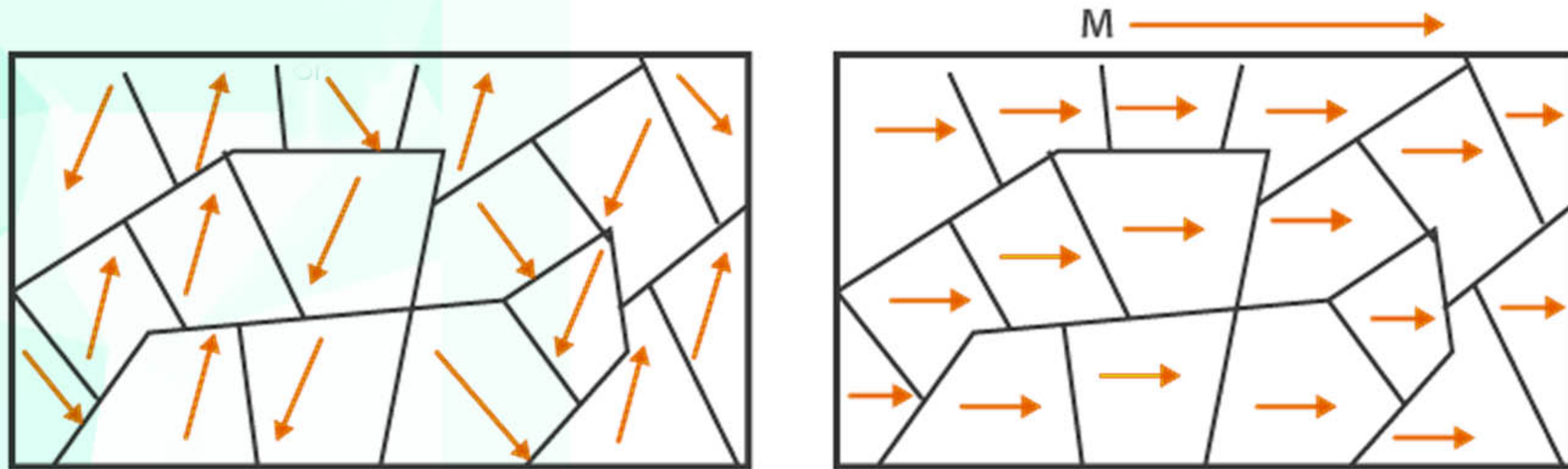




# Applicazione:

## Spiegare il ferromagnetismo

Il ferromagnetismo è la proprietà di alcuni materiali, detti materiali ferromagnetici, di magnetizzarsi molto intensamente sotto l'azione di un campo magnetico esterno e di restare a lungo magnetizzati quando il campo si annulla, diventando così magneti.



A. Random domain orientation

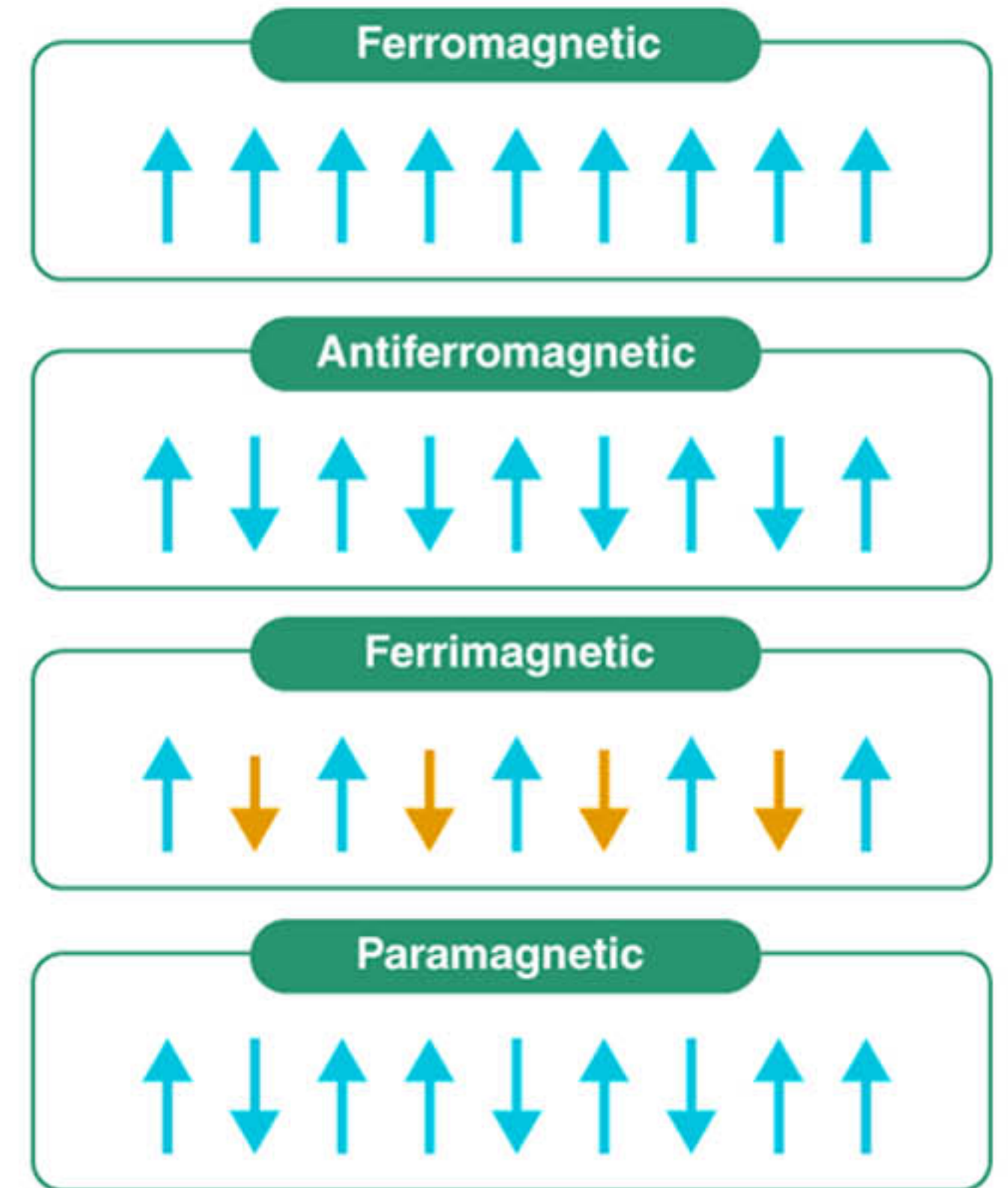
B. After magnetization



# Comportamento magnetico

Il paramagnetismo e il ferromagnetismo sono proprietà legate alla presenza di un momento di dipolo magnetico permanente, orbitale o di spin, associato agli atomi.

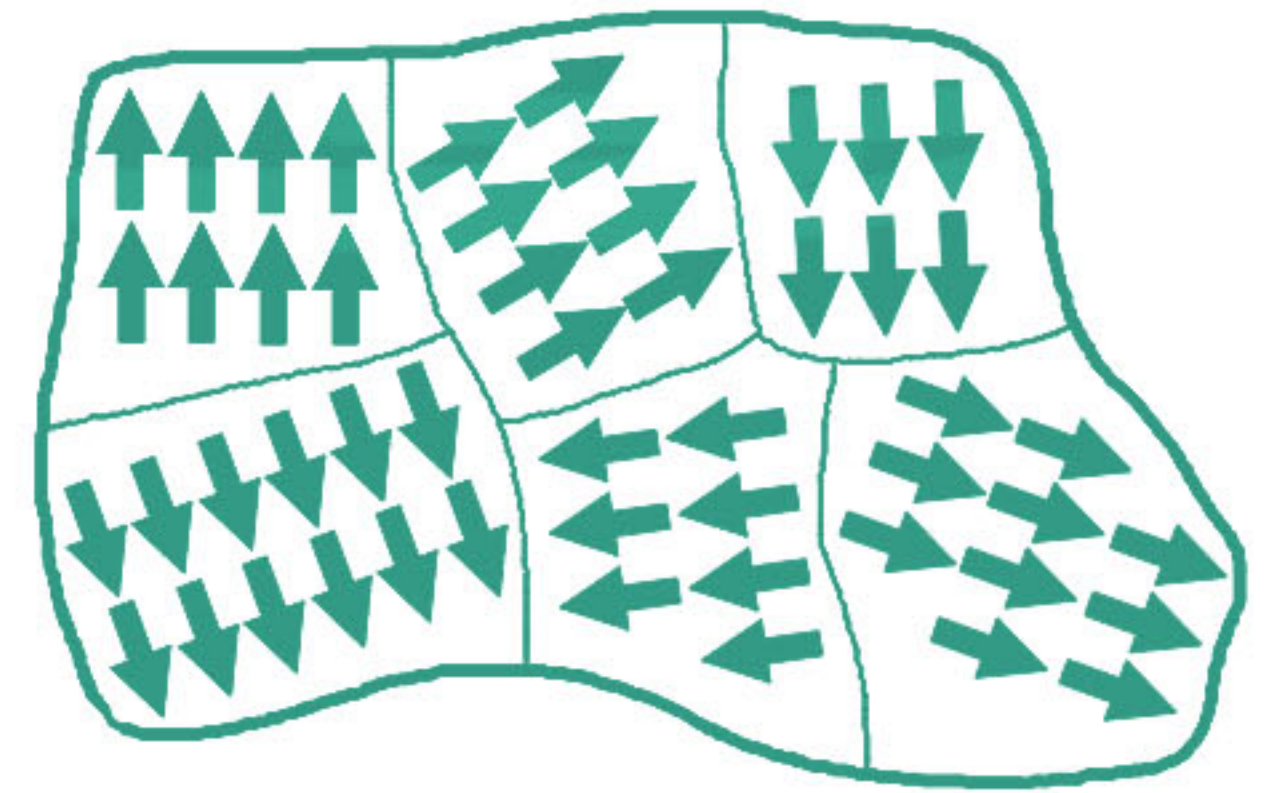
Nelle sostanze ferromagnetiche, l'interazione di scambio tra i momenti di dipolo magnetico degli atomi tra loro vicini dà origine a delle regioni, dette domini magnetici o domini di Weiss, nelle quali tutti i momenti di dipolo hanno lo stesso orientamento.





# Comportamento magnetico

In assenza di un campo magnetico esterno e quando il ferromagnete non è ancora stato magnetizzato, il momento di dipolo magnetico risultante associato a un dominio ha direzione casuale; tuttavia il momento totale risulta nullo poiché un materiale contiene tipicamente un elevato numero di domini.

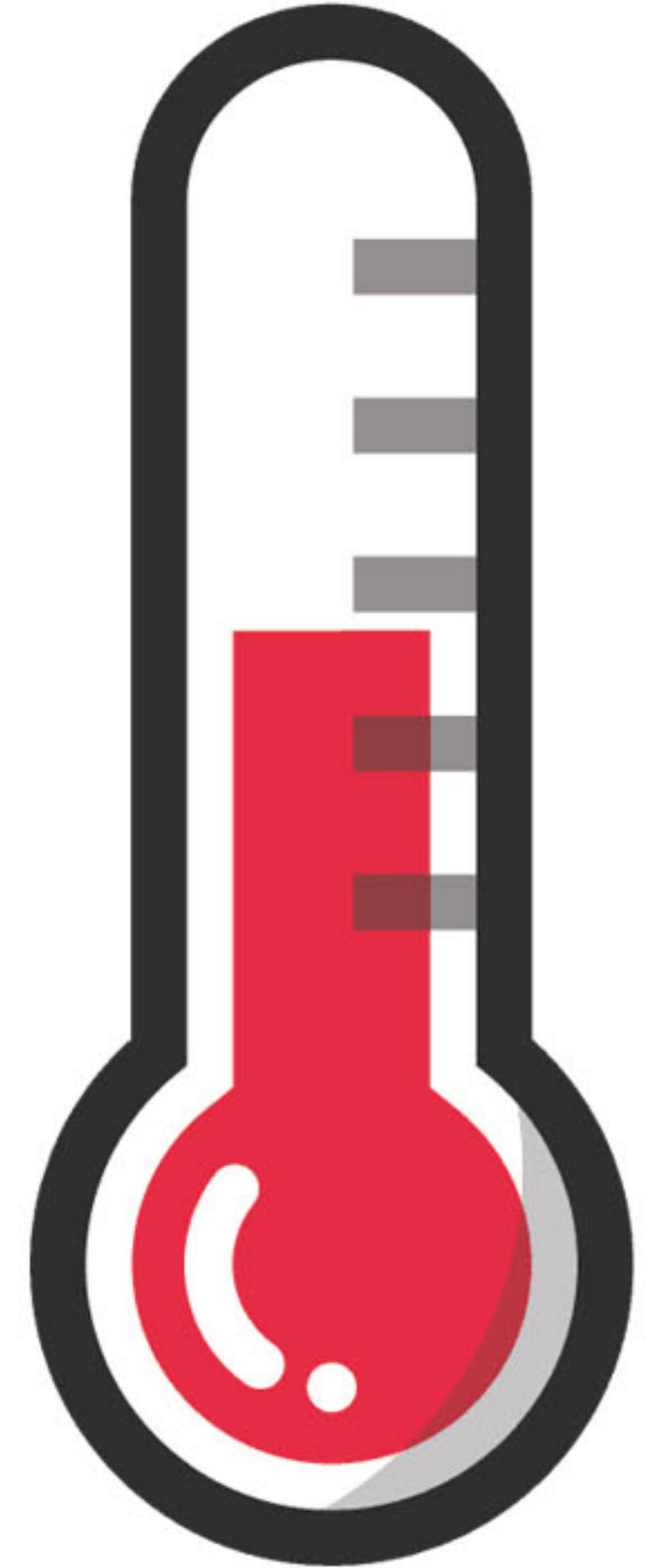


In presenza di un campo magnetico esterno si avrà invece l'insorgere di un momento di dipolo magnetico totale non nullo, in quanto i domini si orientano disponendosi mediamente lungo la direzione del campo magnetico esterno.



# Comportamento magnetico

La proprietà principale che differenzia i materiali ferromagnetici da quelli paramagnetici e diamagnetici consiste nella permanenza di una magnetizzazione totale del materiale, detta magnetizzazione residua, anche quando si riporta il campo magnetico esterno a zero. E' possibile eliminare la magnetizzazione residua innalzando la temperatura sopra la cosiddetta temperatura di Curie.





# Comportamento magnetico

La comparsa del ferromagnetismo al di sotto della temperatura di Curie è un caso di transizione di fase.

L'interazione che governa questo fenomeno, come già accennato, è l'interazione di scambio, di origine quanto-meccanica, che deriva dalla natura antisimmetrica della funzione d'onda descrivente una coppia di elettroni. Trascurando la repulsione coulombiana, il potenziale d'interazione associato a questo processo è:

$$I_{ij} = \int \Psi_j^*(1) \Psi_i^*(2) U_{ij} \Psi_j(2) \Psi_i(1) d^3 r_1 d^3 r_2$$



# Modello di Ising

Il modello di Ising fu introdotto per la prima volta da Ernst Ising nel 1925, nel tentativo di riprodurre le proprietà dei solidi ferromagnetici applicando la meccanica statistica a un reticolo di "magneti microscopici" ideali (Reticolo di Spin).

Nel 1936, R.Pereils dimostrò l'esistenza di un punto critico nel modello bidimensionale, ma furono le scoperte nel decennio successivo a portare il modello alla sua attuale popolarità.

Il calcolo esatto della temperatura critica nella formulazione bidimensionale fu compiuto da A.Kramers e H.Wannier nel 1941 tramite un ingegnoso approccio geometrico.



# Modello di Ising

Sempre in quegli anni Kramers e Wannier pubblicarono una serie di articoli riguardanti un approccio tramite le matrici di trasferimento al modello bidimensionale. Con il loro lavoro aprirono la strada a quello che è considerato uno dei risultati più importanti nella fisica delle transizioni di fase: la soluzione esatta di L. Onsager al modello bidimensionale.

Negli anni successivi alla pubblicazione della soluzione di Onsager la comunità scientifica era convinta che questo metodo potesse essere esteso al reticolo tridimensionale e al reticolo bidimensionale in presenza di un campo magnetico. Tuttavia, nonostante i numerosi sforzi, nessuna soluzione esatta è stata trovata fino ad ora, anche se molte proprietà sono note da approssimazioni e simulazioni numeriche.



# Modello di Ising

La proprietà più importante di questo modello è la sua transizione di fase ordine-disordine. Al di sopra di una temperatura critica la magnetizzazione per sito  $m$  è piuttosto piccola, mentre al di sotto di essa la magnetizzazione è diversa da zero e spesso prossima al suo valore massimo di 1. Sappiamo che alle alte temperature tutti gli spin sono allineati casualmente, mentre a temperature basse essi sono allineati in stati Up-Up e Down-Down.

Quando però ci avviciniamo a una temperatura critica, abbiamo una variazione repentina del comportamento del materiale.



# Definizione del modello di Ising

Il modello di Ising è costituito da un reticolo  $\Omega$  n-dimensionale periodico con una geometria ben definita, dove ad ogni nodo del reticolo è associata una variabile che rappresenta lo spin di una particella.

$$H_N = -H \sum_{i=1}^N s_i - \sum_{i,j \in \Omega, i \neq j} J_{ij} s_i \cdot s_j$$

Il sistema è descritto da una hamiltoniana formata da due termini: un primo termine rappresentante l'accoppiamento degli spin con un campo magnetico esterno  $H$  (considerato costante e uniforme) e un secondo termine rappresentante l'interazione reciproca tra gli spin del reticolo.



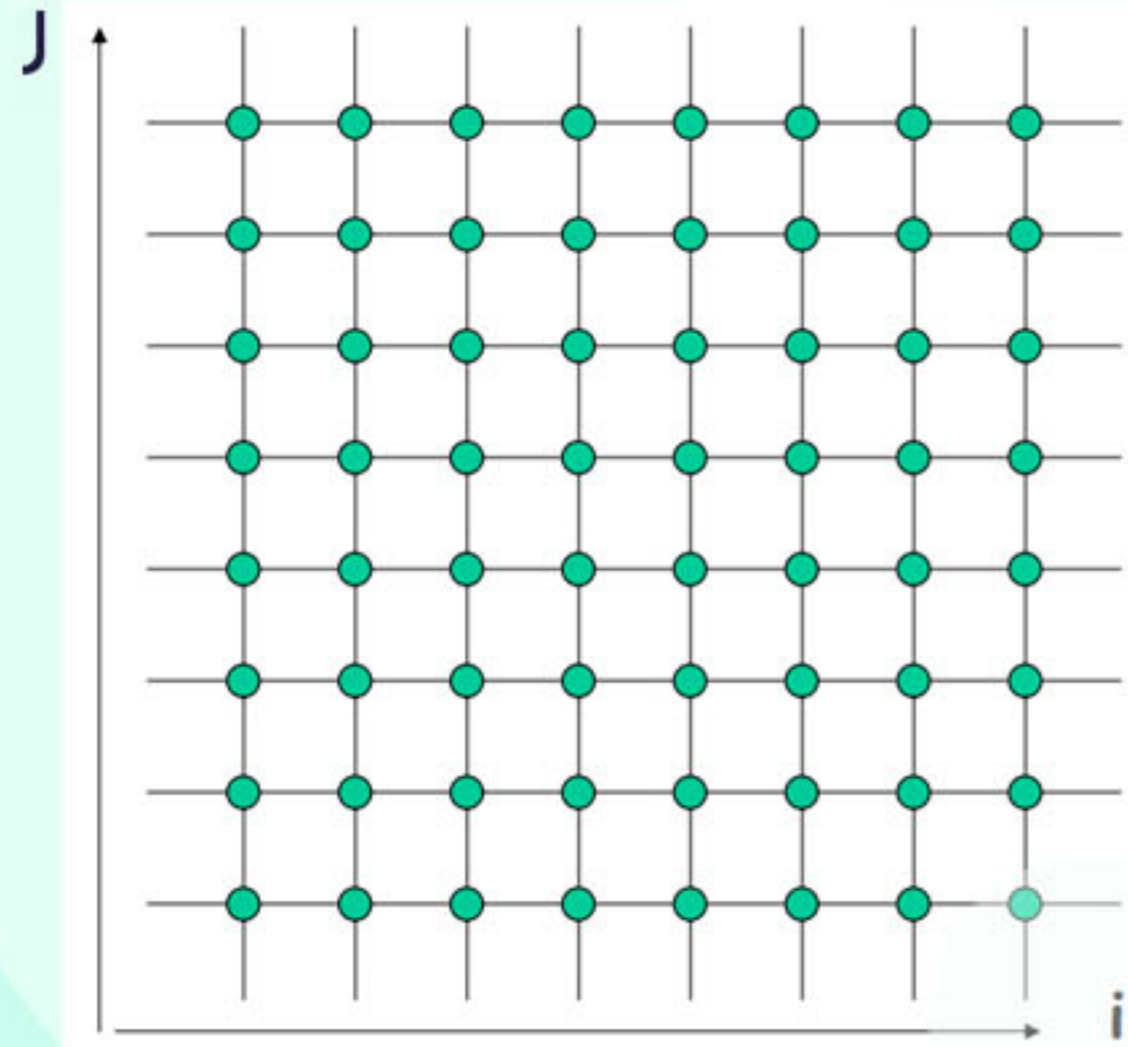
# Definizione del modello di Ising

Ogni coppia di spin paralleli dà un contributo all'energia totale pari  $-J_{ij}$ , mentre ogni coppia di spin antiparalleli contribuisce per un valore pari a  $+J_{ij}$ . Un valore positivo  $J_{ij} > 0$  corrisponde a un comportamento ferromagnetico, mentre un valore negativo  $J_{ij} < 0$  a un comportamento antiferromagnetico.

Un materiale ferromagnetico raggiungerà quindi una configurazione a energia minore tramite un allineamento parallelo dei propri spin, mentre un materiale antiferromagnetico tramite un allineamento antiparallelo.



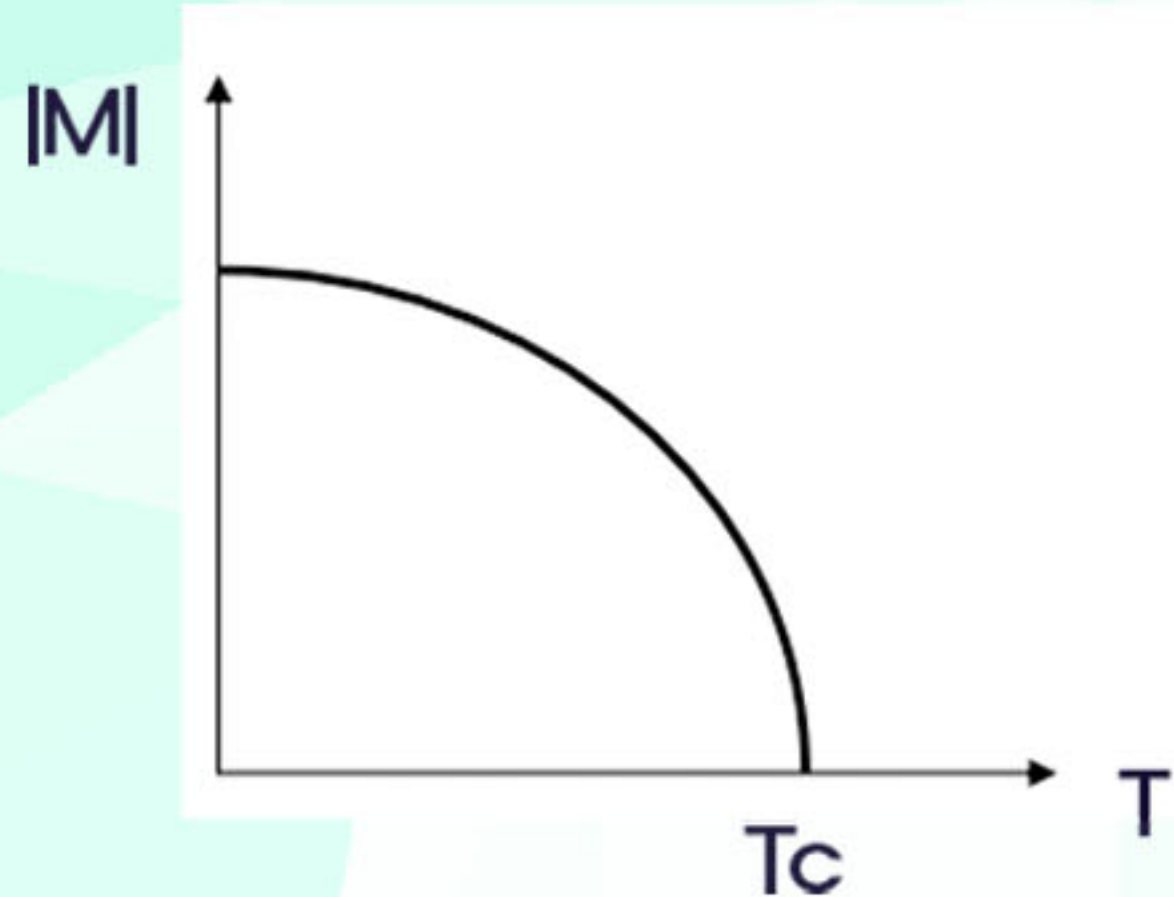
# Modello di Ising in 2D



Ogni sito è occupato da uno spin.

$$S_{ij} = \pm 1$$

In 1 dimensione non sono previste transizioni di fase del modello, in 2 dimensioni esiste una fase ferromagnetica.



$$M(T, H \rightarrow 0) \neq 0 \quad \text{per } T < T_c$$

Esiste una magnetizzazione spontanea per  $T < T_c$

Inoltre, si trova che  $T^*$ :  $\frac{kT_c}{J} = 2.269$



# Modello di Ising

Partendo da una configurazione ordinata, per  $T > T^* = \frac{kT_c}{J} = 2.269$  ci aspettiamo che il sistema vada in una fase disordinata.

Al contrario, per  $T < T^*$  il sistema dovrebbe rimanere in una fase ordinata.



# Simulazione

È un algoritmo ampiamente utilizzato che genera una sequenza di stati microscopici. Supponiamo di provare a calcolare  $\langle A \rangle$  con campionamento casuale, ovvero generando  $n$  stati random.

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n A(s_i) e^{-H(s_i)/kT}}{\sum_{i=1}^n e^{-H(s_i)/kT}}$$

Ciò porterebbe a una scarsa convergenza della stima di  $\langle A \rangle$  perché per molti degli  $n$  stati il  $P_{eq}$  sarebbe piccolo.

Un'alternativa a questo approccio sarebbe campionare gli stati in modo tale che si verificano con una distribuzione non casuale  $P(s_i)$

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n A(s_i) e^{-H(s_i)/kT}}{p(s_i) \sum_{i=1}^n \frac{e^{-H(s_i)/kT}}{p(s_i)}}$$



# Simulazione

La scelta migliore è scegliere la funzione di distribuzione di probabilità di Boltzmann come  $P(s_i)$ .

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n A(s_i)}{n}$$

Questa scelta porta rapidamente a una stima convergente di  $\langle A \rangle$ . L'algoritmo di Metropolis aiuta a generare una sequenza di stati secondo una probabilità di transizione:

$$W(S(t_l) \rightarrow S(t_{l+1})) = W_{l,l+1},$$

dove  $W$  è la probabilità di passare dallo stato  $S(l)$  a  $S(l+1)$ . Gli stati sono generati stocasticamente secondo la probabilità di cui sopra. Questa sequenza di stati è chiamata "catena di Markov".



# Simulazione

1. Applicare condizioni al contorno periodiche al sistema in modo che tutti gli spin abbiano lo stesso ambiente.
2. Scegliere un sito a caso chiamando due numeri casuali  $r1$  e  $r2$  e impostando  $[x, y] = [r1, r2]$ .
3. Fare un campio di rotazione utilizzando MonteCarlo.  
Se prima il sito ha uno spin-up, va cambiato in spin-down.
4. Calcolare la variazione del valore dell'hamiltoniana utilizzando

$$\Delta E = -2J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$



# Simulazione

5. Determinare se accettare la rotazione in base alle seguenti:

5a. Se  $\Delta H \leq 0$  accetta la rotazione.

5b. Se  $\Delta H \geq 0$  prendi un numero random  $r$  tra 0 e 1.

b1 - Se  $r \leq e^{-\Delta H/kT}$  accetta la manovra.

b2 - Se  $r \geq e^{-\Delta H/kT}$  rifiuta la manovra.

6. Aggiornare i dati.

6a - Se la rotazione è accettata, cambiare il reticolo.

6b - Se accettata, aggiorna l'energia.

6c - Incrementa il tempo di 1.



# Simulazione

5. Determinare se accettare la rotazione in base alle seguenti:

5a. Se  $\Delta H \leq 0$  accetta la rotazione.

5b. Se  $\Delta H \geq 0$  prendi un numero random  $r$  tra 0 e 1.

b1 - Se  $r \leq e^{-\Delta H/kT}$  accetta la manovra.

b2 - Se  $r \geq e^{-\Delta H/kT}$  rifiuta la manovra.

6. Aggiornare i dati.

6a - Se la rotazione è accettata, cambiare il reticolo.

6b - Se accettata, aggiorna l'energia.

6c - Incrementa il tempo di 1.



# Simulazione

Questa è una simulazione del modello di Ising.

I siti scuri puntano verso il basso, mentre i siti chiari puntano verso l'alto. La temperatura si abbassa lentamente dal 10% al di sopra della temperatura critica al 10% al di sotto della temperatura critica.

