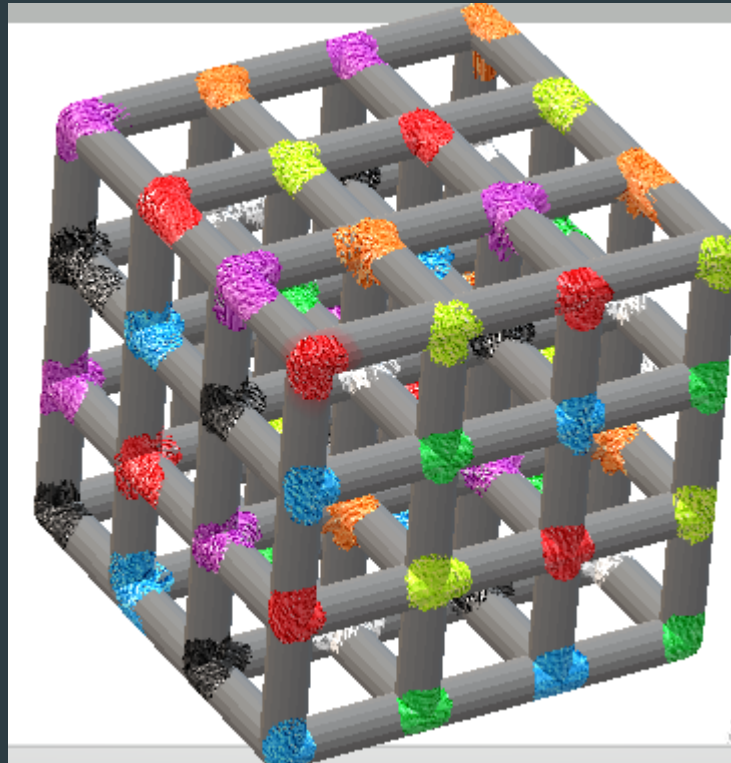


# Il modello di Ising

Arianna Grossi, Elisa Iris Marieni



# Introduzione

Lo scopo della trattazione è quello di sviluppare una tecnica Montecarlo per lo studio di un sistema di Meccanica Statistica costituito da un reticolo che modella un ferromagnete, detto appunto modello di Ising.

In particolare, l'algoritmo utilizzato è detto algoritmo di Metropolis, parte dei metodi Montecarlo basati sulla costruzione di una catena di Markov.

# Il metodo di Metropolis

L'idea alla base del metodo di Metropolis consiste nel costruire una catena di Markov che, partendo da una configurazione iniziale casuale, porti, dopo un gran numero di passi della catena, ad una distribuzione di equilibrio che coincida con la distribuzione di probabilità del sistema in esame.

Per arrivare a tale distribuzione di equilibrio, ad ogni iterazione si propone una mossa di modifica della configurazione, accettata o rigettata dall'algoritmo in base alla sua probabilità.

Nel caso del modello di Ising, la distribuzione di probabilità è quella di Gibbs, per cui la probabilità che il sistema si trovi in una configurazione  $j$  è

$$P_j = \frac{1}{Z} e^{-\beta S_j}$$

# Il metodo di Metropolis (2)

Consideriamo ora il caso di un sistema discreto come un reticolo, i cui gradi di libertà  $\varphi(n)$  siano definiti sui nodi  $n$  del reticolo e risentano di accoppiamenti solo tra i primi vicini.

Partendo da una configurazione iniziale arbitraria  $\varphi_1$ , si costruisce nel seguente modo una successione di configurazioni  $\varphi_1, \dots, \varphi_N \dots$  che porti alla configurazione di equilibrio: si visitano tutti i siti del reticolo, proponendo di cambiare il valore della variabile  $\varphi$  legata al sito  $n$ -esimo

$$\varphi(n) = \varphi'(n) = \varphi(n) + \delta\varphi$$

La mossa viene accettata se l'azione diminuisce o aumenta leggermente, secondo la seguente probabilità

$$\begin{cases} P_{accept} = \min(1, e^{-\delta S}) \\ P_{reject} = 1 - P_{accept} \end{cases}$$

# Errori legati al metropolis

Il metodo di Metropolis risente di vari tipi di errori:

- Errori statistici, che vanno come  $\frac{1}{\sqrt{N}}$
- Errori sistematici dovuti all'autocorrelazione: infatti i campioni generati non sono tutti statisticamente indipendenti tra loro, per il fatto che l'algoritmo stesso proponga di volta in volta piccole modifiche rispetto alla configurazione precedente.

# Calcolo degli errori

Quindi, per calcolare l'errore legato ad una quantità  $O$ , bisogna conoscere il numero di configurazioni effettivamente statisticamente indipendenti, dato dal rapporto  $\frac{sweeps}{skip}$ :  $skip$  è un parametro settato opportunamente in modo che,

all'interno del ciclo di evoluzione ripetuto un numero  $sweeps$  di volte, ogni  $skip$  si annoti solo un valore delle quantità cercate.

L'errore della quantità  $O$  risulta quindi essere

$$std(O) \sqrt{sweeps \backslash skip}$$

# Il modello di Ising

Il modello di Ising riguarda un reticolo sui cui nodi si definisce una variabile casuale  $s$ , ossia uno spin avente due possibili orientazioni e due possibili valori,  $\pm 1$ .

Si assume che gli spin risentano di accoppiamento solo tra primi vicini, e che quindi l'energia dovuta all'interazione tra due spin  $s_1$  e  $s_2$  sia pari a

$$E = -J s_1 \cdot s_2$$

dove  $J$  rappresenta la costante di accoppiamento.

Inoltre, poiché il reticolo deve modellizzare un ferromagnete, inserendo un campo magnetico gli spin tenderanno ad allinearsi ad esso.

In un tale sistema il peso di Gibbs  $P(s)$  e la funzione di partizione  $Z$  risultano essere

$$Z(J, B, \beta) = \sum_{s_i = \pm 1} e^{-\beta S}$$

$$P(s) = e^{-\beta S(J, B)} = e^{\beta J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j + \beta B \sum_j s_j}$$

# Osservabili studiate

- Magnetizzazione media  $\langle M \rangle$  per spin

$$\frac{\langle M \rangle}{N^d} = \frac{1}{N^d} \left\langle \sum_i s_i \right\rangle$$

- Energia media  $\langle E \rangle$  per spin (nel caso in cui  $B = 0$ )

$$\frac{\langle E \rangle}{N^d} = \frac{1}{2N^d} \left\langle -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \right\rangle$$

- Capacità termica isocora  $C_v$  per spin

$$\frac{C_v}{N^d} = \frac{\beta}{TN^d} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

- Suscettività magnetica  $\chi$  per spin

$$\frac{\chi}{N^d} = \frac{\beta}{N^d} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

$N$  è il numero di nodi su un lato del reticolo e  $d = 1, 2, 3$  la dimensione considerata.



# Modello di Ising in una dimensione

Il reticolo da considerare è in questo caso unidimensionale, formato da  $N$  nodi e dotato di condizioni di periodicità al contorno (lo spin  $s_1$  coincide con lo spin  $s_{N+1}$ ).

La soluzione analitica di tale modello è stata individuata da E. Ising attraverso il seguente metodo:

- Si riscrive la funzione di partizione  $Z$  come un prodotto fra  $N$  matrici  $2 \times 2$

$$Z = \sum_{s_i = \pm 1} \prod_i \exp \left( \beta J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \beta B (s_i + s_{i+1}) \right) = \sum_{s_i = \pm 1} \langle s_1 | P | s_2 \rangle \langle s_2 | P | s_3 \rangle \dots \langle s_N | P | s_1 \rangle$$

- Si ricava poi l'espressione per la matrice  $P$ , avente come indici di riga gli spin  $s_i = \pm 1$  e di colonna  $s_{i+1} = \pm 1$ .

$$P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-B)} \end{pmatrix}$$

# Modello di Ising in una dimensione (2)

- Si nota che, per la condizione di periodicità, la sommatoria che definisce la funzione di partizione  $Z$  coincide con la traccia della potenza  $n$ -esima di  $P$

$$Z = \text{Tr}(P^N)$$

- Poiché la traccia è data dalla somma degli autovalori di  $P$  elevati alla  $N$ , determinando tali autovalori si determina la funzione di partizione

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

- Nota la funzione di partizione, si può determinare un'espressione per le osservabili cercate, tra cui la magnetizzazione media

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial B} \ln(Z(\beta)) = \frac{\sinh(\beta B)}{\sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta B)}}$$

# Il codice Matlab

Per ottenere una buona efficienza del programma è comodo utilizzare due array, uno per i nodi pari e uno per i nodi dispari, ed effettuare le *sweeps* del Metropolis prima sull'uno e poi sull'altro.

$$even = 2 * randi(2,1, N) - 3$$

$$odd = 2 * randi(2,1, N) - 3$$

Per l'individuazione dei primi vicini pari e dispari si utilizza una permutazione verso destra e una verso sinistra

$$odd\_nnb = circshift(odd, -1)$$

$$even\_nnb = circshift(even, 1)$$

# Il codice Matlab (2)

Nel caso del modello di Ising la proposta di mossa consiste nell'invertire di volta in volta lo spin, per cui la probabilità di accettazione della mossa è

$$P_{accept} = \min(1, e^{-\delta E}) = e^{-2E}$$

Si genera poi un numero  $r$  normalmente distribuito fra 0 e 1 con il comando *rand*

$$r = rand(1, N)$$

e la mossa viene accettata se  $r < P_{accept}$ .

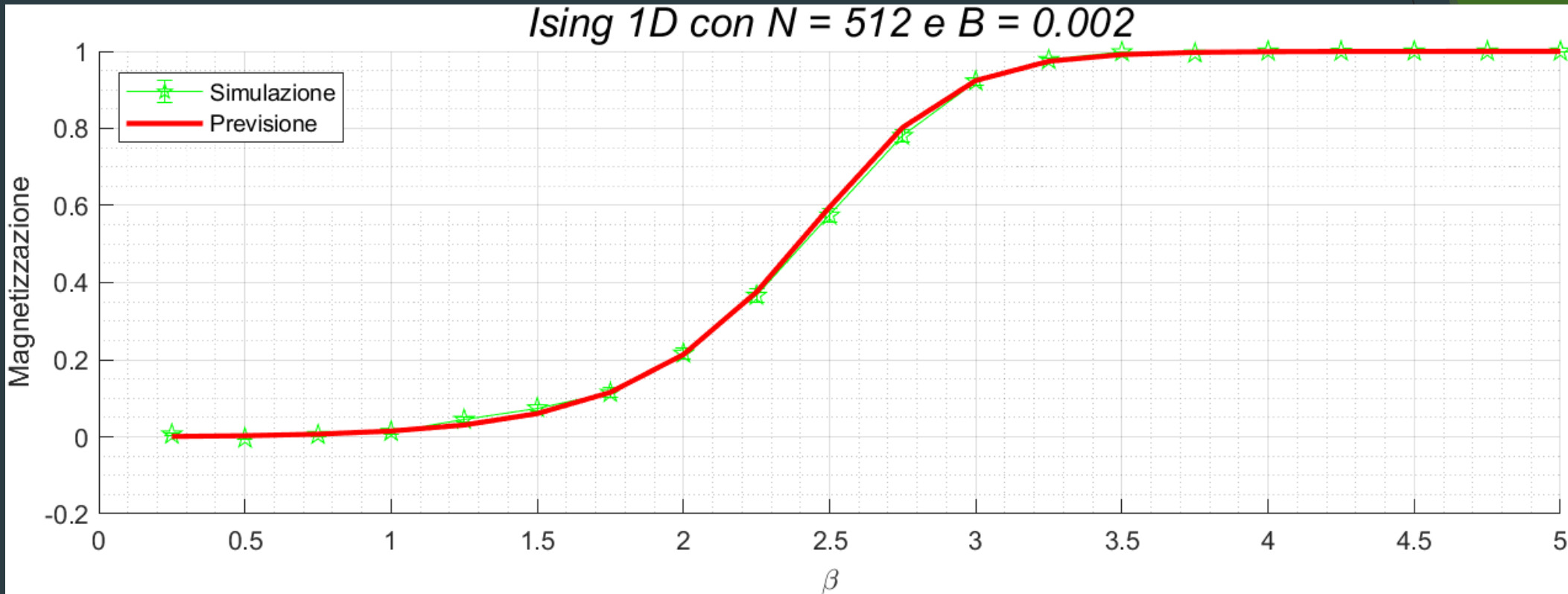
Ad esempio, nel caso della mossa sui nodi pari:

$$accept = r < \exp(-2 * b .* (odd + odd\_nnb + B) .* even)$$

$$even(accept) = -even(accept)$$

# Magnetizzazione al variare di $\beta$ (1D)

Simulazione con  $10^5$  sweeps e  $10^3$  cicli di termalizzazione



Si nota che il sistema non presenta transizioni di fase, in quanto la magnetizzazione è una funzione regolare di  $\beta$ .

# Modello di Ising in due dimensioni

Il modello in due dimensioni comprende un reticolo piano di  $N \times N$  nodi, con condizioni di periodicità al contorno.

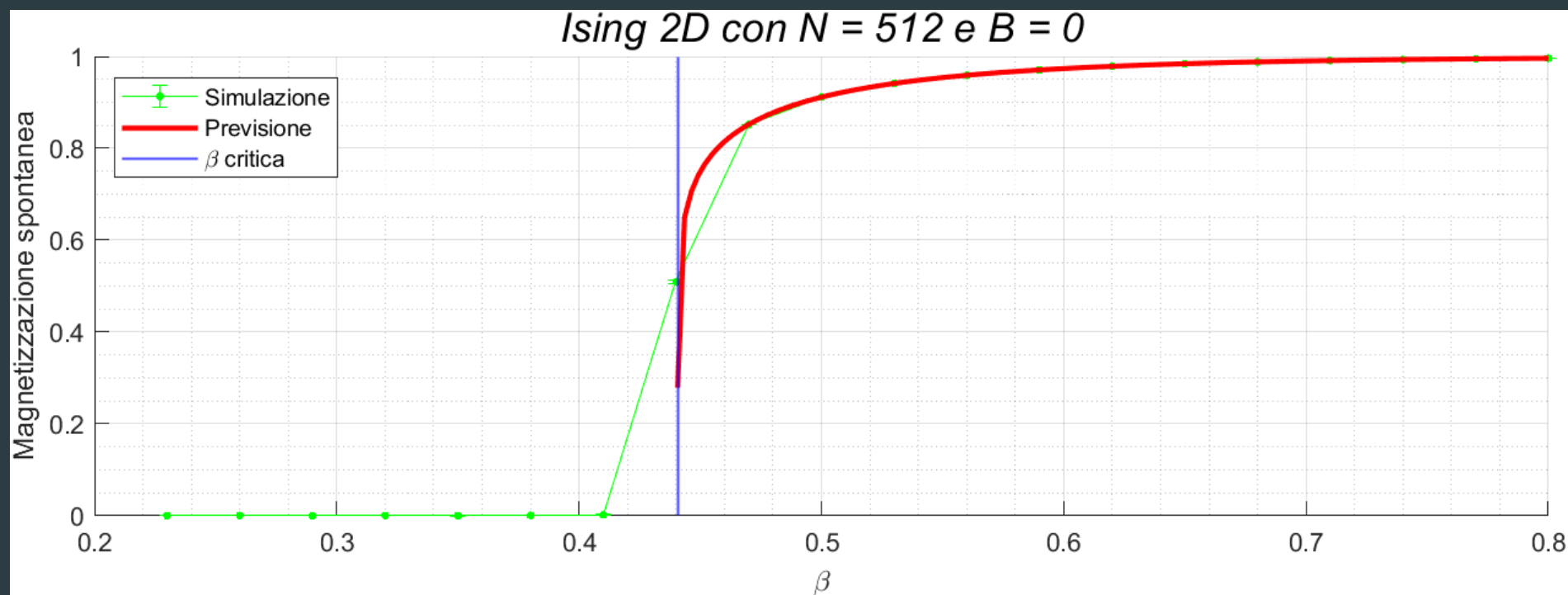
A differenza del modello in 1D, si ha una transizione di fase a  $\beta_c \approx 0,44$ : per  $\beta < \beta_c$ , ossia ad alte temperature, il materiale è paramagnetico, mentre per  $\beta > \beta_c$ , ossia a basse temperature, il materiale diventa ferromagnetico e si ha magnetizzazione spontanea.

L'espressione per la magnetizzazione risulta essere

$$M = (1 - \sinh(2\beta J)^{-4})^{\frac{1}{8}}$$

# Magnetizzazione al variare di $\beta$ (2D)

Simulazione con  $10^4$  sweeps e  $10^3$  cicli di termalizzazione



Come previsto, nella zona in cui il materiale è paramagnetico la magnetizzazione è nulla, per poi salire rapidamente attorno al valore di  $\beta_c$  e assestarsi ad 1 nella zona in cui è ferromagnetico.

# Il codice Matlab

Come nel caso in una dimensione, conviene dividere il reticolo in sottoreticoli:

immaginare il reticolo come una matrice, si utilizzano quattro sottoreticoli individuati dalle entrate pari-pari, dispari-dispari, pari-dispari e dispari-pari.

Ad esempio, il sottoreticolo pari-pari:

$$S.ee = \text{sign}(\text{randn}(N, N))$$

I primi vicini di ogni spin di un determinato sottoreticolo sono individuati servendosi degli array  $e2o$  e  $o2e$

$$e2o = [N, 1:N-1]$$

$$o2e = [2:N, 1]$$

Ad esempio, nel caso dei primi vicini del sottoreticolo pari-pari:

$$NN = S.oe + S.oe(e2o,:) + S.eo + S.eo(:,e2o)$$



## Il codice Matlab (2)

Per quanto riguarda la proposta e la rispettiva probabilità di accettazione, esse sono le stesse del modello monodimensionale.

Ad esempio, nel caso del sottoreticolo pari-pari:

$$R = rand(N, N)$$

$$accept = R < \exp(-2 * b * ((NN + B) * S. ee))$$

$$S. ee(accept) = - S. ee(accept)$$

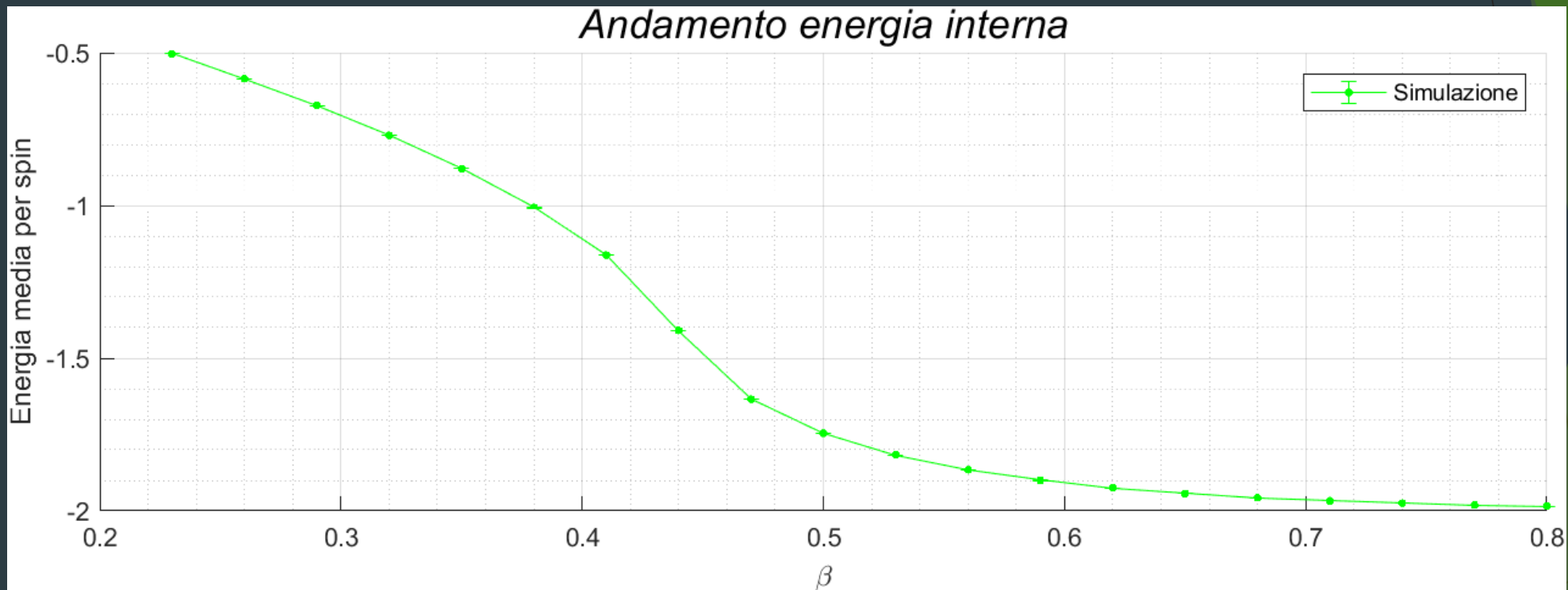
Nel caso bidimensionale, si decide inoltre di salvare in un vettore l'energia interna per valutarne l'andamento.

Sempre nel caso del sottoreticolo pari-pari avremo:

$$E = (NN + B) * S. ee$$

# Energia interna al variare di $\beta$ (2D)

Simulazione con  $10^4$  sweeps e  $10^3$  cicli di termalizzazione



L'energia tende a  $-2J$  per temperature inferiori alla temperatura critica, quando il materiale si comporta come un ferromagnete.

# Modello di Ising in tre dimensioni

Nel caso in 3D si considera un reticolo con  $N \times N \times N$  nodi, con condizioni di periodicità al contorno.

Per il modello di Ising in 3D non esiste una soluzione analitica, ma studi numerici hanno permesso di individuare la transizione di fase a  $\beta_c \approx 0,22165$ .

In questo caso, oltre a calcolare l'andamento della magnetizzazione e dell'energia interna, si calcolano anche capacità termica e suscettività magnetica.

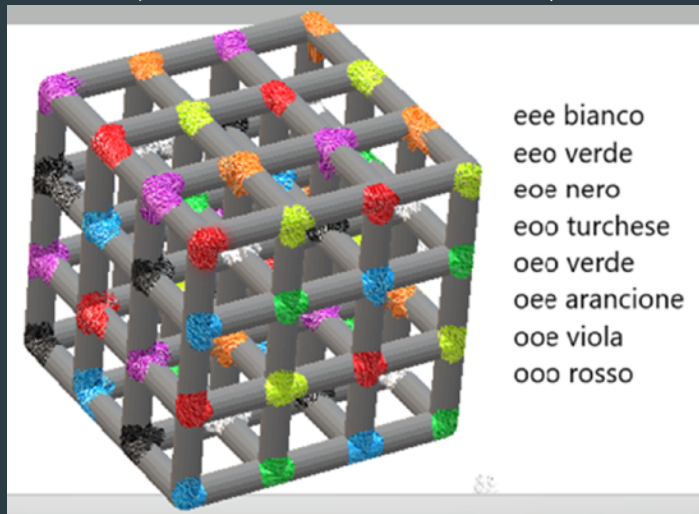
# Il codice Matlab

In questo caso si immagina il reticolo come un tensore tridimensionale con tre differenti indici, che possono essere pari o dispari: si hanno quindi  $2^3 = 8$  combinazioni possibili, e quindi 8 sottoreticoli.

Ogni nodo ha quindi sei primi vicini, individuati servendosi degli array *e2o* e *o2e* come nel caso in due dimensioni.

Ad esempio, nel caso del sottoreticolo pari-pari-pari:

$$NN = S.oeo + S.oeo(e2o, :, :) + S.eoe + S.eoe(:, e2o, :) + S.eeo + S.eeo(:, :, e2o)$$



## Il codice Matlab (2)

Anche in questo caso la proposta e la rispettiva probabilità di accettazione sono del tutto analoghe ai casi precedenti

Nel caso del sottoreticolo pari-pari-pari:

$$R = rand(N, N, N)$$

$$accept = R < \exp(-2 * b * ((NN + B) * S.eee))$$

$$S.eee(accept) = -S.eee(accept)$$

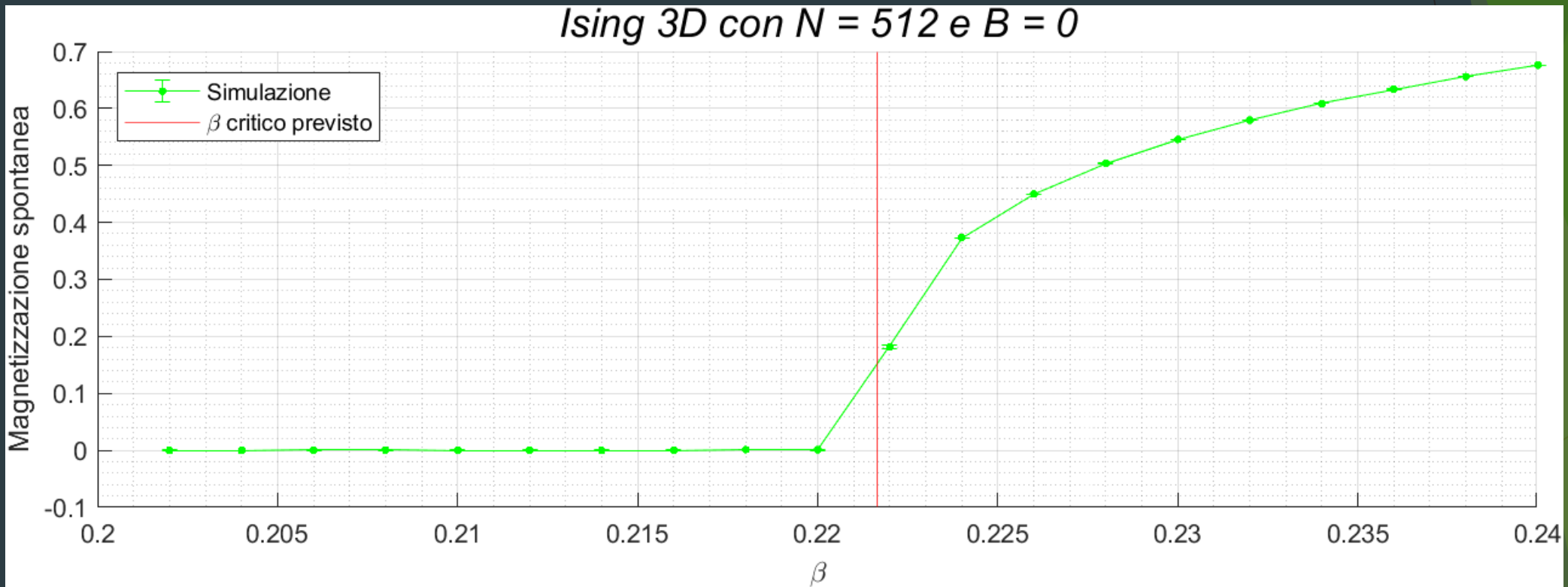
Per il calcolo di capacità termica e suscettività magnetica sono stati utilizzati rispettivamente i seguenti codici

$$cv(i) = b^2 * (mean(Eq) - mean(AvgE))^2 / (8 * N^3)$$

$$chi(i) = b * (mean(Magq) - mean(Mag))^2 / (8 * N^3)$$

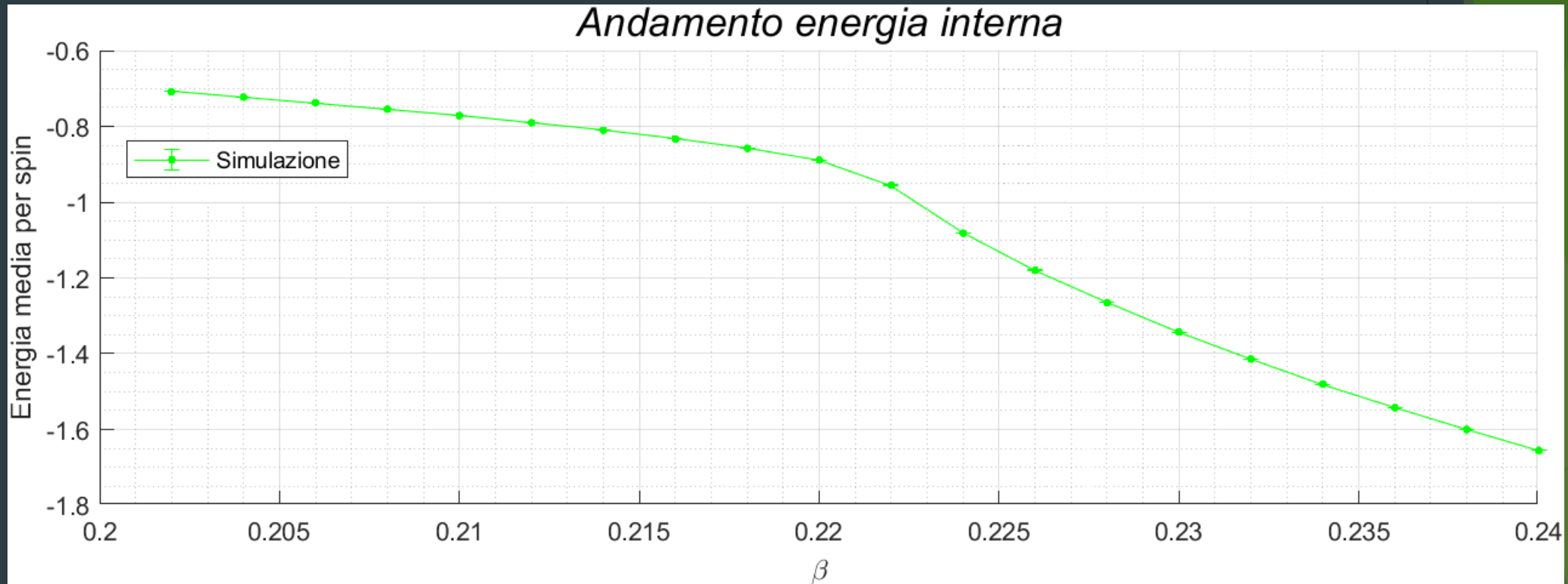
# Magnetizzazione al variare di $\beta$ (3D)

Simulazione con  $10^5$  sweeps e  $10^3$  cicli di termalizzazione



# Energia interna al variare di $\beta$ (3D)

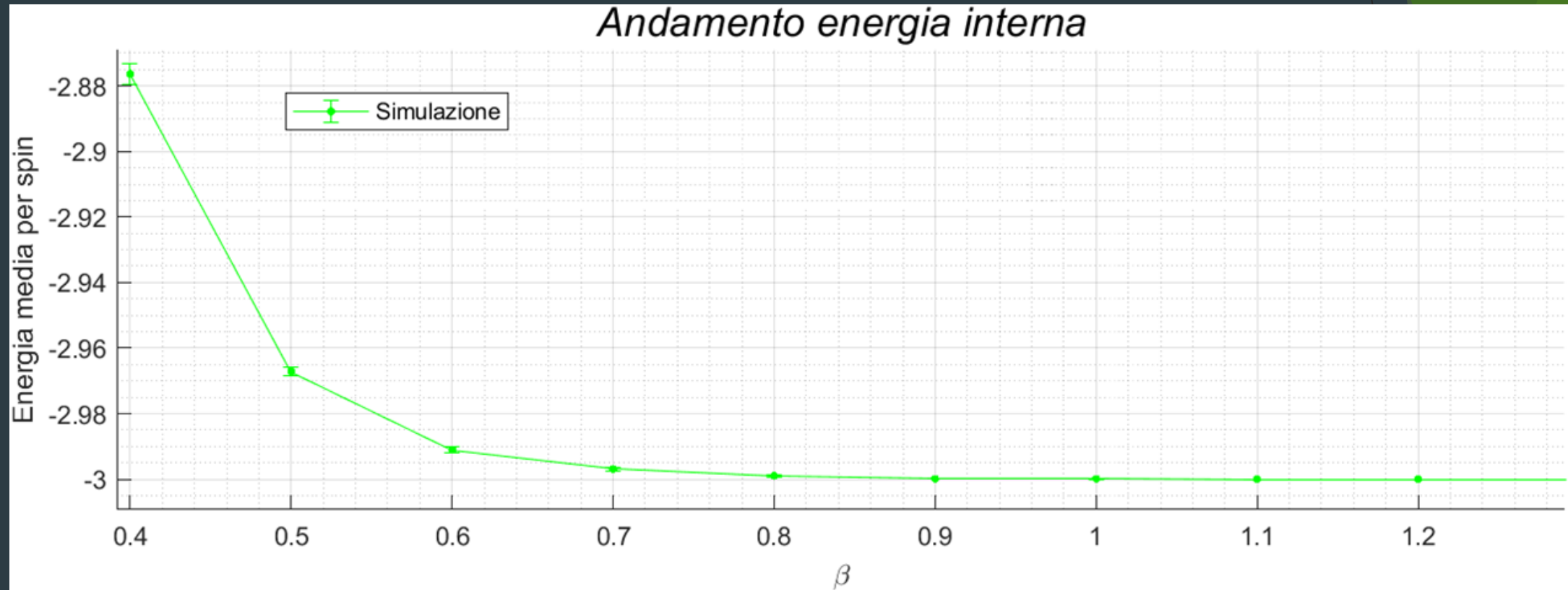
Simulazione con  $10^5$  sweeps e  $10^3$  cicli di termalizzazione



L'andamento dell'energia rispecchia quello atteso, ossia

$$\begin{cases} E \rightarrow 0 & \text{se } \beta \rightarrow 0 \\ E \rightarrow -3J & \text{se } \beta \rightarrow \infty \end{cases}$$

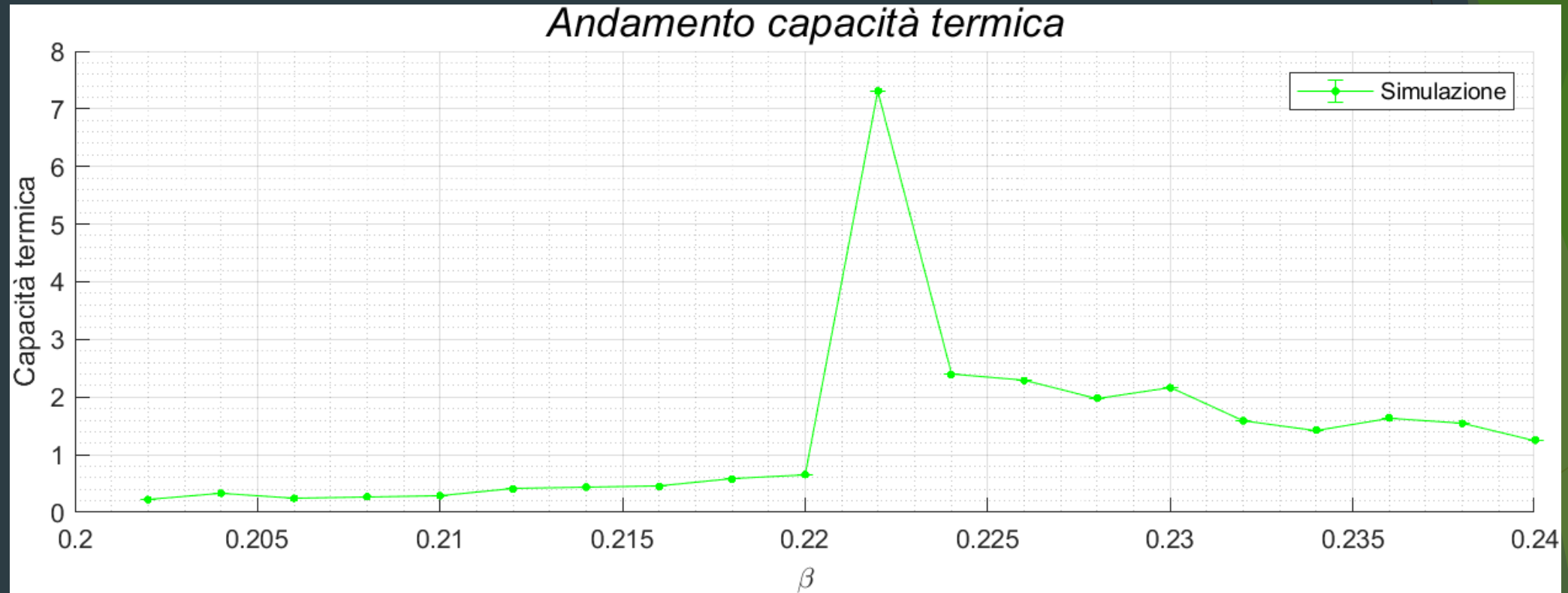
# Verifica del limite per $\beta \rightarrow \infty$





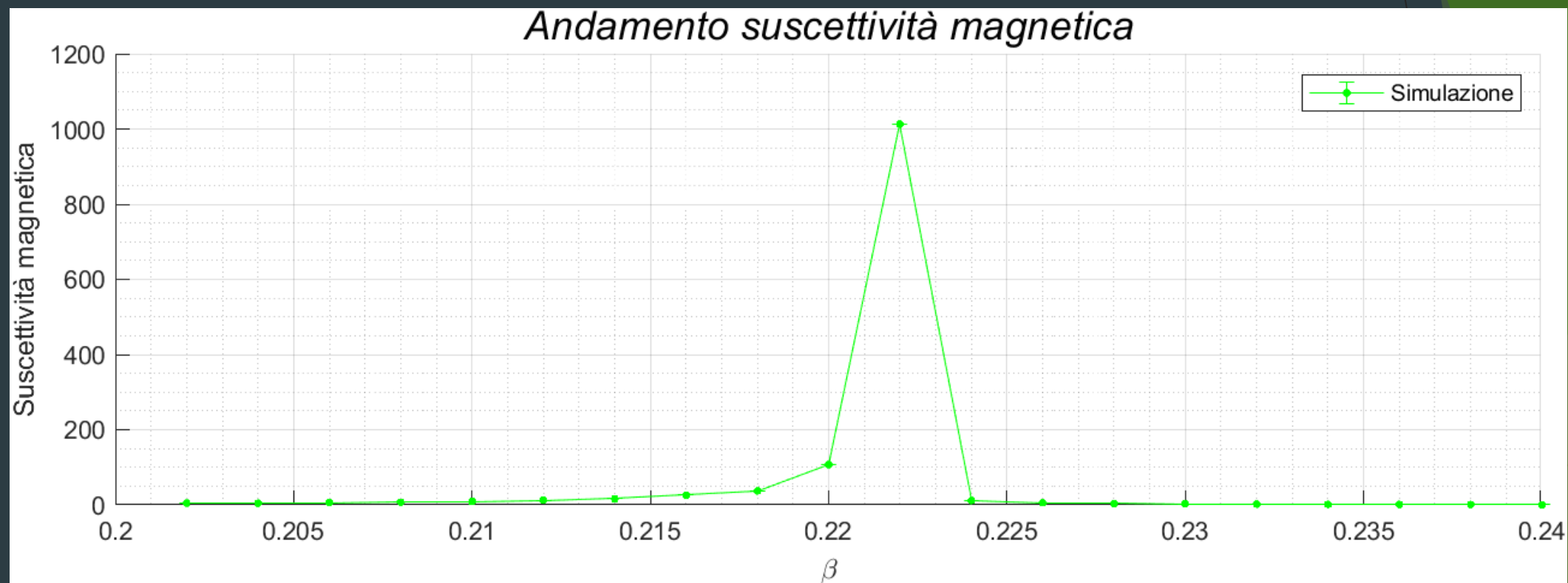
# Capacità termica al variare di $\beta$ (3D)

Simulazione con  $10^5$  sweeps,  $10^3$  cicli di termalizzazione e  $N = 512$



# Suscettività magnetica al variare di $\beta$ (3D)

Simulazione con  $10^5$  sweeps,  $10^3$  cicli di termalizzazione e  $N = 512$



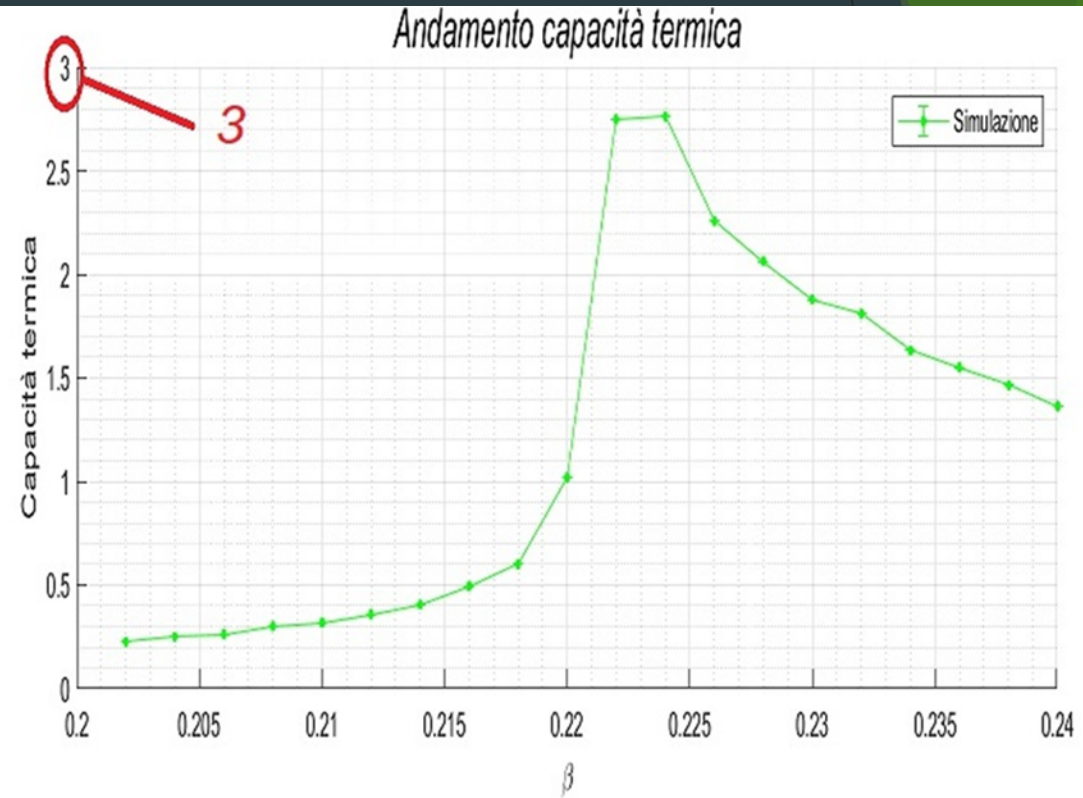
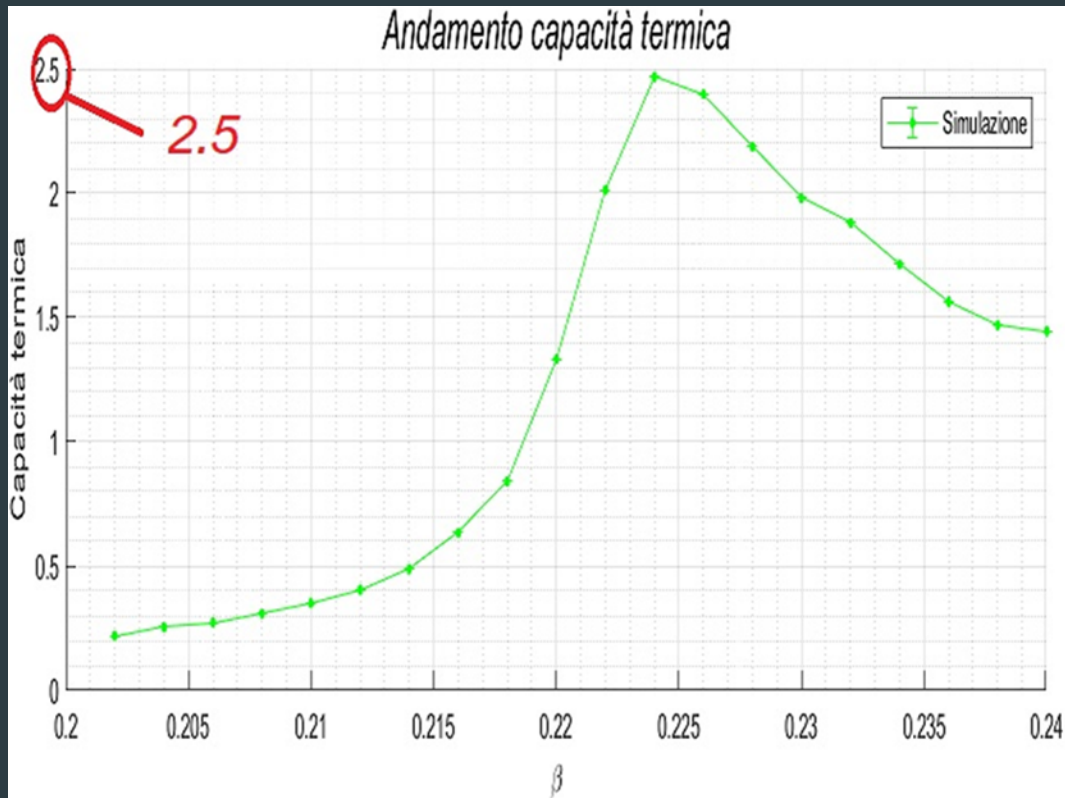
# Il picco alla $\beta$ critica

Nei grafici per l'andamento di capacità termica e suscettività magnetica si può notare un picco in prossimità della  $\beta$  critica, dovuto al fatto che a tale temperatura il materiale cambi natura.

Idealmente il comportamento delle due curve dovrebbe presentare un asintoto verticale in corrispondenza di tale valore di  $\beta$ , con divergenza all'infinito, ma ciò non accade in quanto si ha a disposizione un campionamento discreto.

# Confronto capacità termiche (3D)

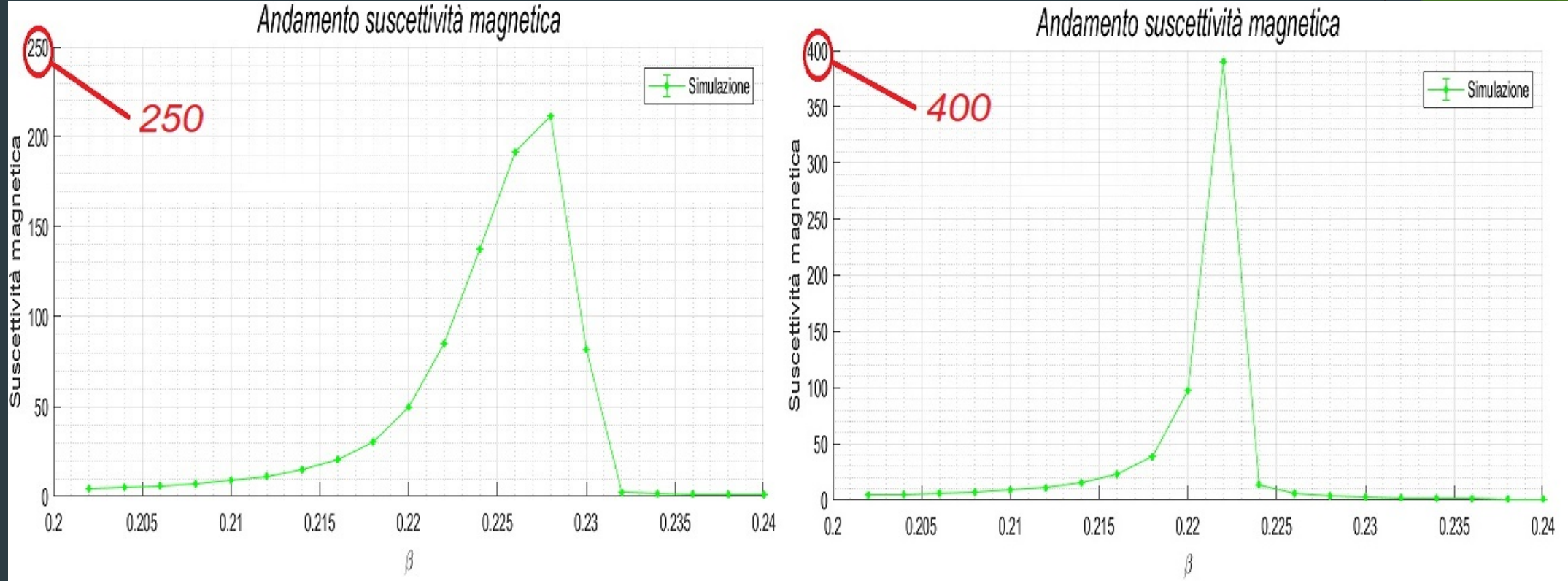
Simulazioni effettuate aumentando  $N$ :  $N = 32$  a sinistra,  $N = 256$  a destra



All'aumentare del numero  $N$  di nodi il picco si alza, in quanto aumentando la precisione con cui il modello descrive la realtà ci si avvicina sempre di più alla divergenza.

# Confronto suscettività magnetiche (3D)

Simulazioni effettuate aumentando  $N$ :  $N = 32$  a sinistra,  $N = 256$  a destra



Per le stesse motivazioni che nel caso della capacità termica, anche in questo caso all'aumentare del numero  $N$  di nodi il picco si alza.

# L'autocorrelazione

L'autocorrelazione è definita come

$$C_{ff} = \langle f(t)f(t + \tau) \rangle - \langle f \rangle^2$$

Per non calcolare tali valori medi, ci si può ricondurre ad una convoluzione ( $f(t)f(t + \tau)$ ) grazie al Teorema di Wiener-Khintchine

$$\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(|f(t)|^2)) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t + \tau)f^*(t)d\tau$$

Essendo  $f$  reale,  $f(t) = f^*(t)$ , e quindi si ottiene che

$$C_x = \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(|f(t)|^2)) - \langle f \rangle^2$$

# Come valutare l'autocorrelazione?

L'autocorrelazione si può stimare effettuando un certo numero di esperimenti nel seguente modo:

Si compie inizialmente un ciclo di termalizzazione, per poi effettuare un certo numero di esperimenti, per ognuno dei quali si compie un ciclo di evoluzione in cui si annota ogni volta la configurazione di spin.

Le mosse del ciclo sono le stesse di quelle descritte in Ising 3D.

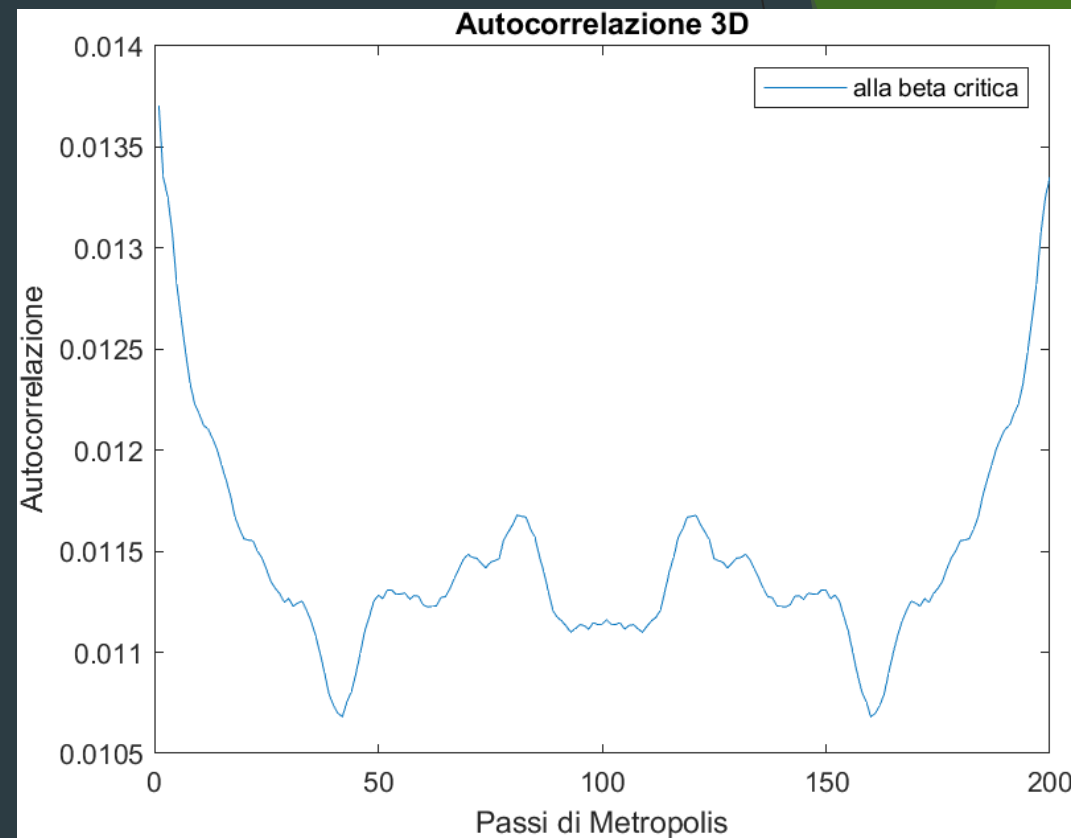
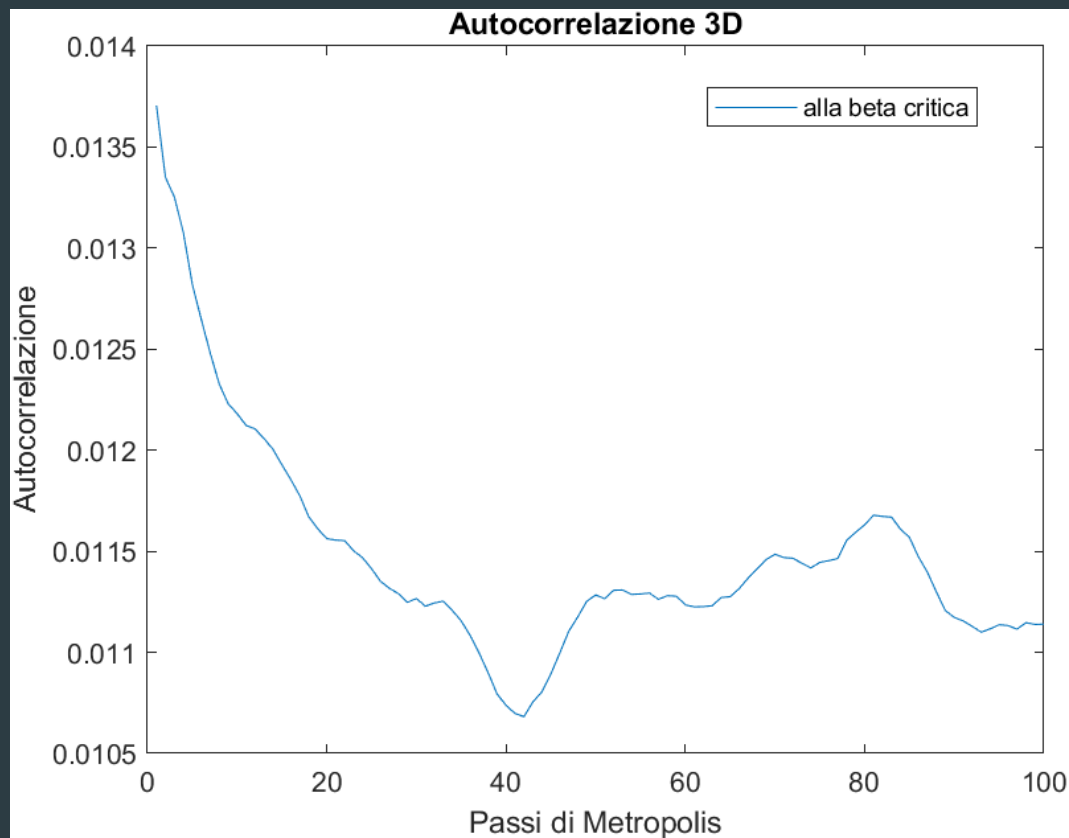
Facendo la media fra tutti gli esperimenti effettuati, si ottiene un set di dati contenente l'informazione della configurazione degli spin ad ogni *sweep*, a cui applicare le trasformate di Fourier con il seguente comando Matlab

$$c = \text{fft}(\text{data}(:))$$

$$ac = \text{ifft}(c .* \text{conj}(c)) - (\text{mean}(\text{data}(:)))^2$$

## Autocorrelazione (3D)

Calcolata su  $N = 512$  in 20 esperimenti, con  $\beta = 0,22$



Si nota che l'autocorrelazione sembra assestarsi a 30 passi del Metropolis (fatta salva qualche oscillazione).



# Un'ulteriore complicazione: Potts

Un modello simile a quello di Ising è il modello di Potts, con alcune differenze:

- In Ising gli spin potevano assumere solo due orientazioni, mentre in Potts si hanno  $q$  orientazioni possibili. Per questo motivo, nel modello di Potts gli spin ( $s$ ) vanno immaginati come vettori equispaziati sulla circonferenza unitaria del piano complesso, aventi coordinate  $x$  e  $y$  e modulo unitario

$$s = x + iy$$

$$x = \cos\left(\frac{2k\pi}{q}\right)$$

$$y = \sin\left(\frac{2k\pi}{q}\right)$$

Sommando poi gli spin come numeri complessi e prendendone il modulo si ottiene la magnetizzazione.

- Se presente, campo magnetico contribuisce all'energia con un fattore  $-B$  se lo spin è allineato alla direzione del campo, altrimenti con 0.
- L'interazione tra gli spin primi vicini è  $-J$  se sono paralleli, altrimenti è nulla.

L'espressione per l'energia risulta

$$V = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\hat{s}_i \hat{s}_j)$$

# Il codice Matlab

Consideriamo il codice del modello di Potts in 3 dimensioni (il modello in 2 dimensioni è del tutto analogo).

- Come nel caso del modello di Ising, il reticolo viene suddiviso in 8 sottoreticoli e i primi vicini di ogni nodo vengono individuati tramite gli array  $e2o$  e  $o2e$ . In questo caso però i valori degli spin sono generati casualmente tra 1 e  $q$ .

Ad esempio, per il sottoreticolo pari-pari-pari avremo:

$$S.eee = randi(q, N, N, N)$$

- Per quanto riguarda invece la proposta di mossa, stavolta si propone di ruotare lo spin in senso orario o antiorario.

Sempre per il sottoreticolo pari-pari-pari avremo:

$$mossa = Shift(S.eee + sign(randn(N)) + q)$$

# Il codice Matlab (2)

- La probabilità di accettazione della mossa corrisponde a

$$P_{accept} = e^{-\delta E}$$

dove  $\delta E = E_1 - E_0$  è la differenza fra l'energia della configurazione in cui si propone di muoversi e quella iniziale.

Energie nel caso del sottoreticolo pari-pari-pari:

$$\begin{aligned} E1 &= ((mossa == S.oeo) + (mossa == S.oeo(e2o, :, :))) + ... \\ &\quad (mossa == S.eoe) + (mossa == S.eoe(:, e2o, :)) + ... \\ &\quad (mossa == S.eeo) + (mossa == S.eeo(:, :, e2o)) + ... \\ &\quad H(mossa)) \\ E0 &= ((S.eeo == S.oeo) + (S.eeo == S.oeo(e2o, :, :))) + ... \\ &\quad (S.eeo == S.eoe) + (S.eeo == S.eoe(:, e2o, :)) + ... \\ &\quad (S.eeo == S.eeo) + (S.eeo == S.eeo(:, :, e2o)) + ... \\ &\quad H(S.eeo)) \end{aligned}$$

## Il codice Matlab (3)

- Le modalità di accettazione della mossa sono le stesse che nel modello di Ising.

Ad esempio, considerando il sottoreticolo pari-pari-pari:

$R = rand(N, N, N)$

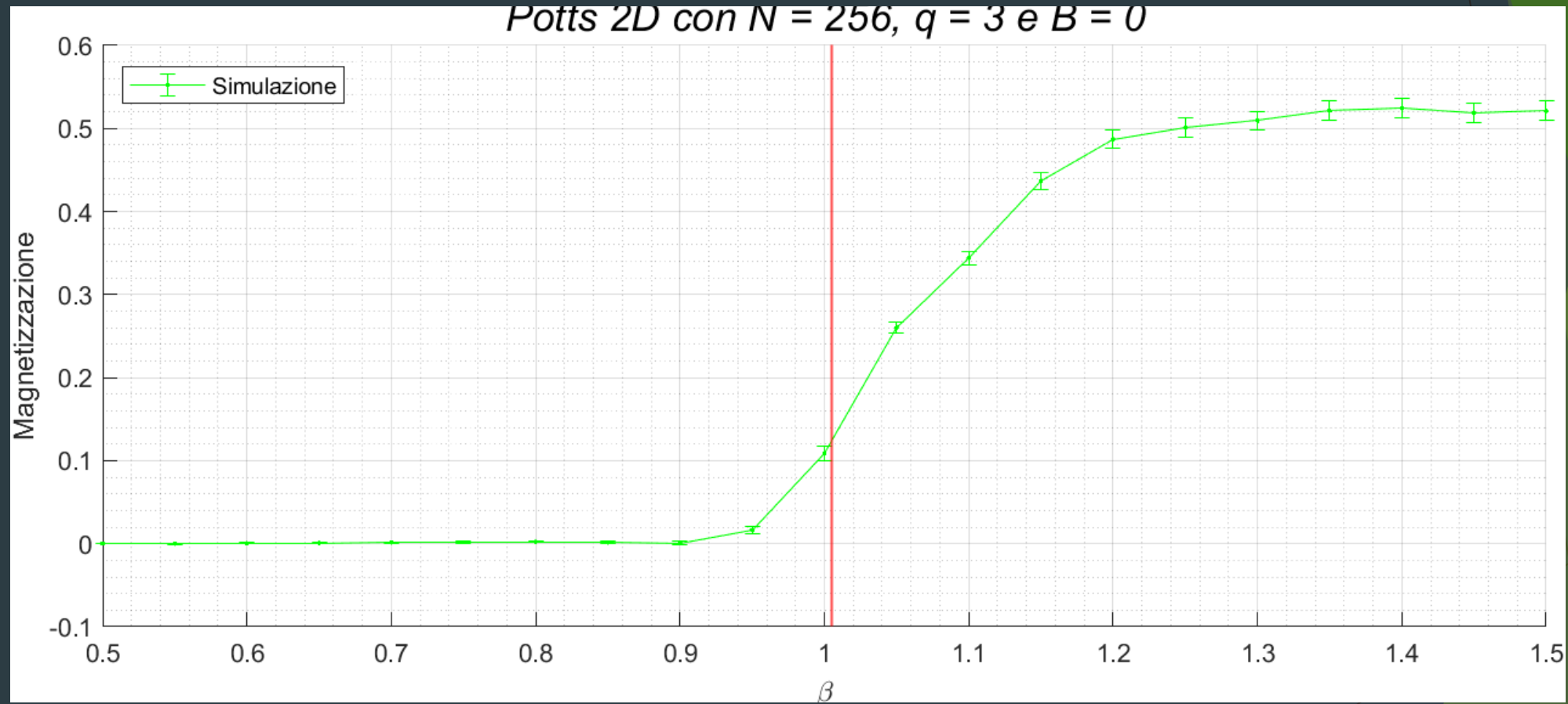
$\Delta = E1 - E0$

$accept = R < \exp(b * \Delta)$

$S.see(accept) = mossa(accept)$

# Magnetizzazione al variare di $\beta$ (2D, Potts)

Simulazione con  $2 \cdot 10^3$  sweeps, 100 cicli di termalizzazione



Nel caso bidimensionale si ha una transizione di fase a  $\beta_c = \ln(1 + \sqrt{q})$ .

Nel caso  $q = 3 \rightarrow \beta_c \approx 1,005$

# Magnetizzazione al variare di $\beta$ (2D, Potts)

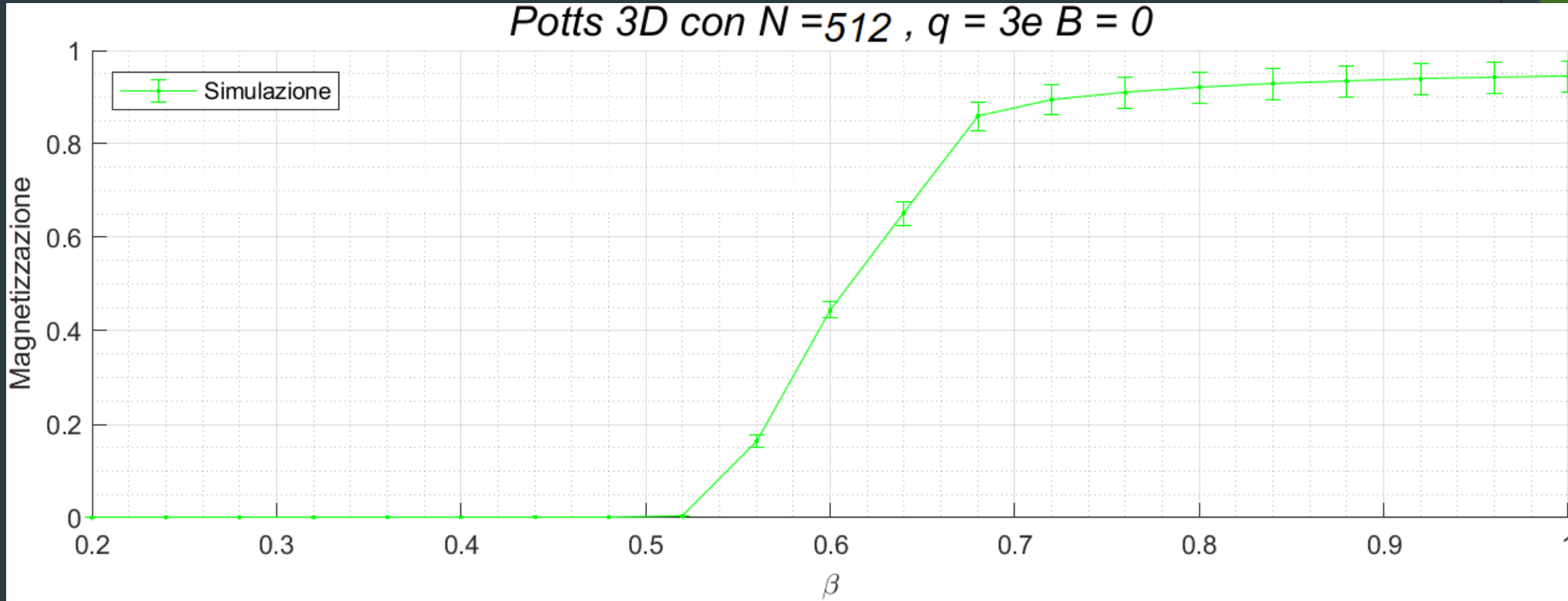
Simulazione con  $2 \cdot 10^3$  sweeps, 100 cicli di termalizzazione



Nel caso  $q = 4 \rightarrow \beta_c \approx 1,09$

# Magnetizzazione al variare di $\beta$ (3D, Potts)

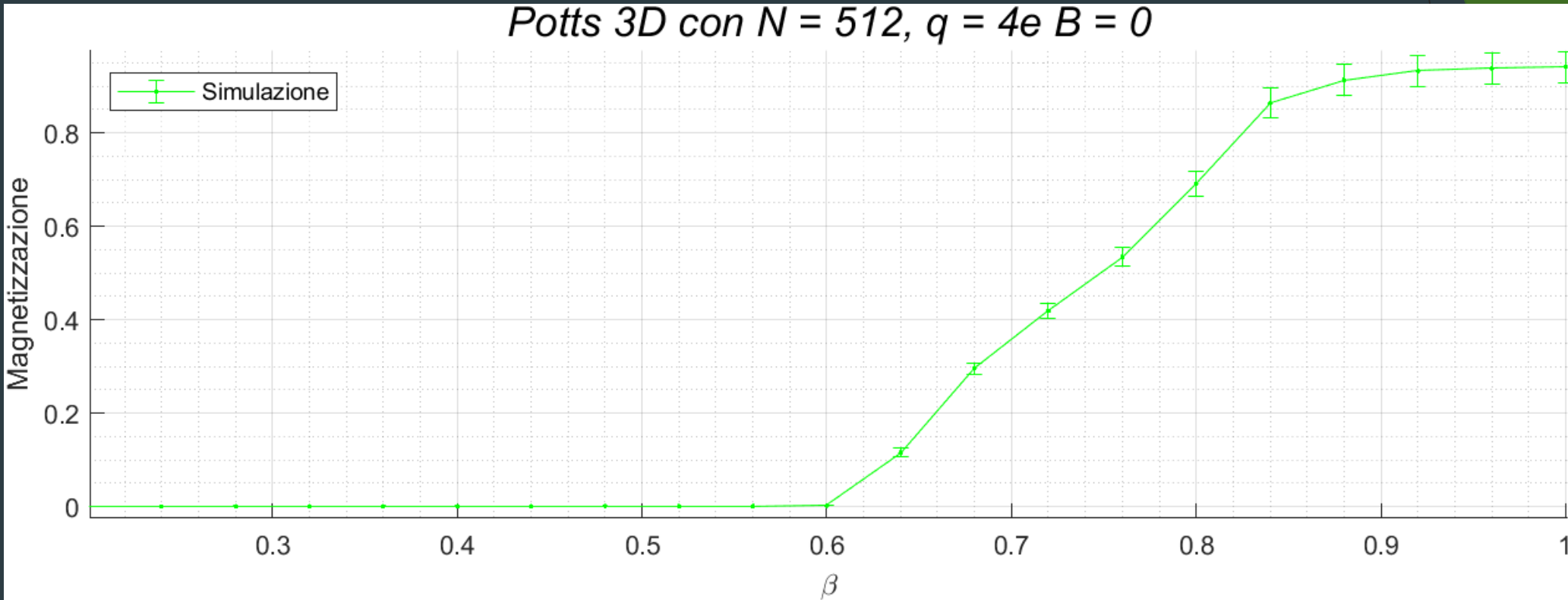
Simulazione con  $2 \cdot 10^3$  sweeps, 100 cicli di termalizzazione



Nel caso di  $q = 3$ , la transizione di fase è collocata a  $\beta \approx 0,55$  (secondo il lavoro di A. Yamagata)

# Magnetizzazione al variare di $\beta$ (3D, Potts)

Simulazione con  $2 \cdot 10^3$  sweeps, 100 cicli di termalizzazione

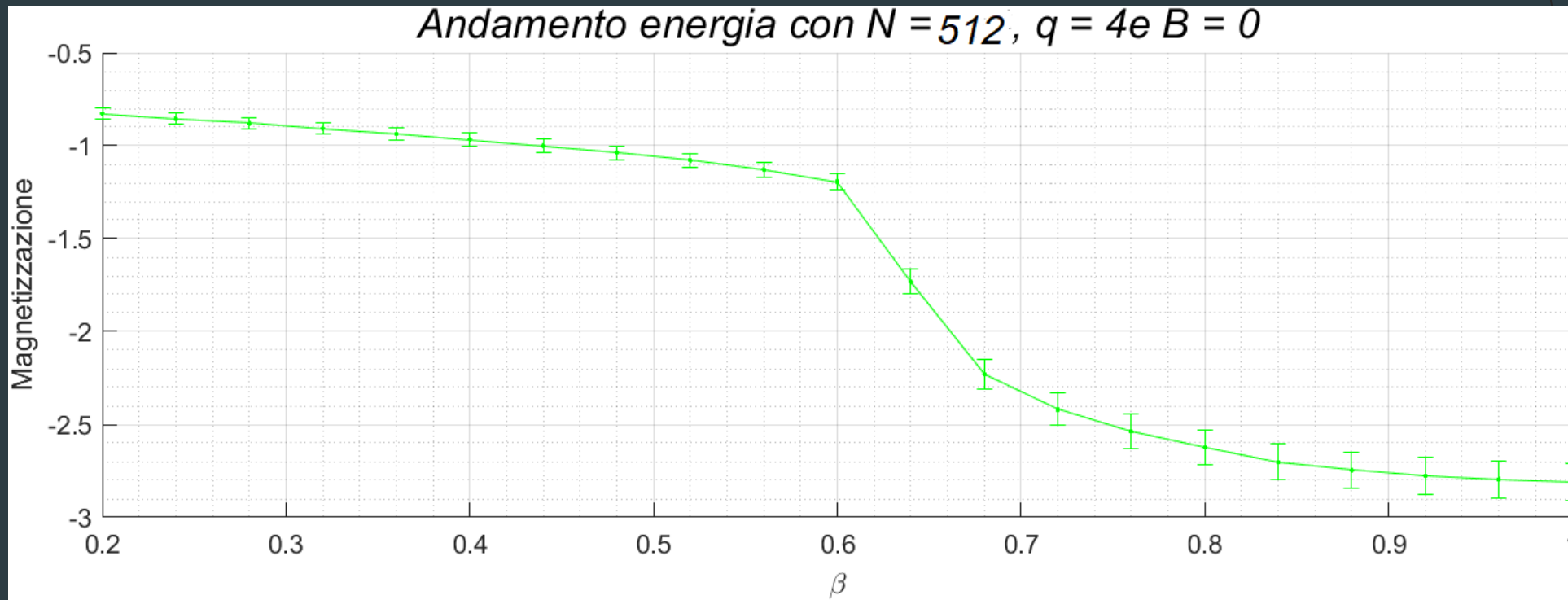


Nel caso di  $q = 4$  non si è trovata nessuna fonte con cui confrontare il valore trovato per la  $\beta$  di transizione, che tuttavia sembra essere ragionevolmente più alto di quello nel caso  $q = 3$ .



# Energia interna al variare di $\beta$ (3D, Potts)

Simulazione con  $N = 512$  e  $q = 4$



Si nota come l'energia segua lo stesso andamento descritto in Ising, con un cambio di concavità in prossimità della  $\beta$  critica.

# Suscettività magnetica al variare di $\beta$ (3D, Potts)

Simulazione con  $N = 32$  e  $q = 3$

