

Modello XY

Marco Caramanti

Massimo Cipressi Cecilia Riani

Indice

1 Metodo Monte Carlo

- Generalità sugli algoritmi Monte Carlo
- Equazione di Langevin

2 Modello XY

3 Studio Monte Carlo del modello XY: aspetti importanti

- Aspetti generali
- Passo dt
- Termalizzazione
- Autocorrelazione

4 Risultati

- Energia
- Magnetizzazione
- Vortici

5 Bibliografia

Indice

1 Metodo Monte Carlo

- Generalità sugli algoritmi Monte Carlo
- Equazione di Langevin

2 Modello XY

3 Studio Monte Carlo del modello XY: aspetti importanti

- Aspetti generali
- Passo dt
- Termalizzazione
- Autocorrelazione

4 Risultati

- Energia
- Magnetizzazione
- Vortici

5 Bibliografia

Metodo Monte Carlo

Il metodo Monte Carlo costituisce un'ampia classe di algoritmi per effettuare simulazioni di sistemi fisici e calcoli numerici basati sul campionamento casuale.

Supponiamo di voler calcolare un integrale del tipo

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_i d\varphi_i O e^{-\beta H(\varphi)}$$

con O una generica osservabile e Z funzione di partizione. Integrali di questo tipo sono frequenti in meccanica statistica e in meccanica quantistica.

Metodo Monte Carlo

L'approccio Monte Carlo trae ispirazione dalla meccanica statistica. In meccanica statistica il calcolo diretto di medie temporali

$$\overline{f(q, p)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int f(q(t), p(t)) dt$$

è infattibile perché non si riescono a risolvere le equazioni del moto se il numero di gradi di libertà è troppo alto.

Invece che la media temporale allora si calcola una media statistica

$$\langle f(q, p) \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \int d^n q d^n p f(q, p) e^{-\beta H(q, p)}$$

L'ipotesi ergodica garantisce l'equivalenza fra queste due medie.

Metodo Monte Carlo

La strategia del Monte Carlo ribalta questo approccio: il calcolo della media statistica viene sostituito con una media temporale. Il cuore dell'algoritmo è che non serve risolvere le equazioni del moto, ma basta scegliere un qualsiasi processo che ammetta la distribuzione di probabilità π scelta come distribuzione stazionaria.

In particolare, si sceglie solitamente un processo di Markov.

Processo di Markov

Un **processo di Markov** a valori nello spazio degli stati S è una successione di variabili aleatorie X_1, X_2, X_3, \dots in S tale che le probabilità di transizione sono statisticamente indipendenti.

Metodo Monte Carlo

In particolare, il processo scelto, caratterizzato dalla matrice di transizione P , deve soddisfare le condizioni di

- **Irriducibilità**: per ogni $X_i, X_j \in S$ deve esistere $n \geq 0$ tale che $(P^n)_{ij} > 0$, cioè il processo deve poter raggiungere in tempo opportuno ogni altro possibile stato.
- **Stazionarietà** per la distribuzione di equilibrio π , cioè

$$\sum_j P_{ij} \pi(j) = \pi(i)$$

Equazione di Langevin

Un metodo Monte Carlo può essere implementato attraverso lo studio numerico delle equazioni differenziali stocastiche.

Equazione di Langevin

$$dx(t) = b(x(t))dt + \sqrt{\sigma(x(t))}dw(t)$$

dove

- Il termine $b(x(t)) \in \mathbb{R}^n$ è detto *drift* del processo
- $\sigma(x(t))$ è una funzione reale positiva (di solito una costante)
- $w(t)$ è il *moto browniano standard* in n dimensioni ed è tale che
 - per ogni scelta di istanti $t_1 < \dots < t_n$ le variabili aleatorie $w(t_1), \dots, w(t_n)$ sono variabili mutuamente gaussiane;
 - se $\mathbb{E}(w(0)) = 0$ si ha $\mathbb{E}(w(t)) = 0$;
 - $\mathbb{E}(w_i(t), w_j(s)) = \delta_{ij} \min(t, s)$;

Equazione di Langevin come Monte Carlo

Sulla $x(t)$ si possono fare solo previsioni probabilistiche dato che a causa del termine browniano la traiettoria è soggetta a un'evoluzione casuale di cui conosciamo solo la probabilità di transizione tra due diversi istanti.

Per sfruttare l'equazione di Langevin come metodo Monte Carlo il problema è

Problema

Come trovare un drift $b(x, t)$ tale che la distribuzione stazionaria del processo sia quella desiderata (solitamente quella di Gibbs)?

Distribuzione di equilibrio

Si può provare che

Teorema (Equazione di Chapman-Kolmogorov)

Se un processo $x(t)$ soddisfa all'equazione di Langevin, la sua densità di probabilità verifica l'equazione di Chapman-Kolmogorov

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{D}{2} \nabla^2 P(x, t) - \nabla \cdot (b(x) P(x, t))$$

Distribuzione di equilibrio

Per fare in modo che la distribuzione di equilibrio sia quella di Gibbs

$$e^{-\beta S(x)}$$

scegliamo il drift b e la costante σ nell'equazione di Langevin tali che

$$b(x) = -\nabla S(x) \quad \sigma = \frac{2}{\beta}$$

Possiamo mostrare la correttezza di questa scelta sfruttando l'equazione di Chapman-Kolmogorov.

Distribuzione di equilibrio

Dimostrazione.

Supponiamo che la distribuzione di probabilità tenda a una distribuzione di equilibrio

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(x, t) = P_{\text{eq}}(x)$$

Allora dall'equazione di Chapman-Kolmogorov si ha

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{\beta} \nabla^2 P_{\text{eq}}(x) + \nabla \cdot (P_{\text{eq}}(x) \nabla S(x)) \\ &= \nabla \cdot \left(\frac{1}{\beta} \nabla P_{\text{eq}}(x) + P_{\text{eq}}(x) \nabla S(x) \right) \end{aligned}$$

ed è risolta da

$$P_{\text{eq}} = e^{-\beta S(x)}$$

Autocorrelazione

In generale l'errore statistico sui valori medi delle osservabili scala come

$$\frac{1}{\sqrt{N}}$$

dove N è il numero di misure.

Il problema è che le configurazioni prodotte dalla catena di Markov sfruttata per il Monte Carlo sono fortemente correlate fra loro, in quanto ottenute apportando piccole variazioni a una configurazione precedente. Questo porta a sottostimare la varianza dei valori calcolati attraverso la simulazione.

Pertanto è importante avere una stima del numero di passi necessario per generare una nuova configurazione indipendente.

Autocorrelazione

Definiamo

Funzione di autocorrelazione

La **funzione di autocorrelazione** per un'osservabile f è definita come

$$C(t) = \langle f(X_s)f(X_{s+t}) \rangle - \langle f \rangle^2$$

Solitamente ha un andamento esponenzialmente decrescente nel tempo

$$C(t) = C_0 e^{-t/\tau}$$

con τ definito **tempo di autocorrelazione**.

Ogni τ passi l'autocorrelazione diminuisce di un fattore $1/e$, quindi possiamo assumere che ogni τ passi si producano configurazioni non correlate.

Per il calcolo dei valori medi delle osservabili terremo conto solo delle configurazioni prodotte ogni **skip** passi, con **skip** $> \tau$.

Strategia

In sintesi la strategia da seguire sarà

- Scegliere il drift in base alla distribuzione di equilibrio desiderata;
- Scegliere una distribuzione di partenza;
- Lasciare evolvere il sistema seguendo l'equazione di Langevin per un numero **therm** di cicli in modo da raggiungere la configurazione di equilibrio;
- Fare evolvere il sistema all'equilibrio per un numero **sweep** di cicli e misurare il valore dell'osservabile interessata ogni **skip** passi (in modo da evitare di considerare configurazioni correlate)
- Mediare i risultati ottenuti: il risultato sarà il valor medio dell'osservabile considerata.

Metodo di Eulero

Per sfruttare l'equazione di Langevin occorre utilizzare un metodo di risoluzione numerica delle equazioni differenziali. Il più semplice è il **metodo di Eulero**.

- Fissiamo dt piccolo in modo arbitrario
- A partire da $x(0)$ costruiamo una soluzione calcolando

$$x(t + dt) \leftarrow x(t) + b(x(t))dt + \sqrt{D}dw(t)$$

La scelta del valore di dt incide sul risultato, che sarà effetto da un errore dell'ordine $\mathcal{O}(dt)$

Metodo dei trapezi

Un algoritmo più accurato è il **metodo dei trapezi**.

Integrando fra t e $t + dt$ l'equazione di Langevin si ottiene

$$x(t + dt) = x(t) + \frac{dt}{2}(b(x(t)) + b(x(t + dt))) + D(w(t + dt) - w(t))$$

Non conosciamo il valore di $x(t + dt)$ da inserire in b (è quello che vogliamo calcolare!), ma possiamo sostituirlo con una stima data dal metodo di Eulero

$$x^*(t + dt) \leftarrow x(t) + b(x(t))dt + \sqrt{D}dw(t)$$

Avremo quindi

$$x(t + dt) \leftarrow x(t) + \frac{dt}{2}(b(x(t)) + b(x^*(t + dt))) + D(w(t + dt) - w(t))$$

Questo algoritmo scala come $\mathcal{O}(dt^2)$.

Indice

1 Metodo Monte Carlo

- Generalità sugli algoritmi Monte Carlo
- Equazione di Langevin

2 Modello XY

3 Studio Monte Carlo del modello XY: aspetti importanti

- Aspetti generali
- Passo dt
- Termalizzazione
- Autocorrelazione

4 Risultati

- Energia
- Magnetizzazione
- Vortici

5 Bibliografia

Modello XY

Il modello XY è un modello di spin bidimensionale che costituisce una generalizzazione del modello di Ising, in cui ogni spin può assumere una qualsiasi orientazione sul piano.

Consideriamo il reticolo bidimensionale \mathbb{Z}_2 . A ogni punto j del reticolo è associato un angolo θ_j e quindi il vettore unitario

$$\mathbf{s}_j = (\cos(\theta_j), \sin(\theta_j))$$

L'interazione è solo fra i primi vicini e assume la forma

$$H(s) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \sum_j \mathbf{B} \cdot \mathbf{s}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - \sum_j B \cos(\theta_j)$$

dove $\langle i,j \rangle$ indica che i e j sono primi vicini, J è una costante di accoppiamento e $\mathbf{B} = (B, 0)$ è un campo esterno costante. Nel nostro caso porremo $J = 1$.

Teorema di Mermin-Wagner

Il modello presenta una notevole differenza rispetto al modello di Ising a causa del seguente teorema.

Teorema (di Mermin-Wagner)

Una simmetria continua non può essere rotta spontaneamente a temperatura finita in sistemi con interazioni a raggio sufficientemente corto e dimensione $d \leq 2$.

Dato che il modello XY con campo esterno nullo presenta simmetria $U(1)$ (circolare, cioè ruotando tutti gli spin di uno stesso angolo l'hamiltoniana non cambia), esso non mostra rottura spontanea della simmetria e quindi, ad esempio, non mostra magnetizzazione spontanea.

Vortici

Un aspetto interessante del modello XY è la formazione di strutture dette **vortici**.

Consideriamo una placchetta quadrata delimitata da quattro nodi del reticolo, cioè dagli spin $\mathbf{s}_{i,j}$, $\mathbf{s}_{i,j+1}$, $\mathbf{s}_{i+1,j}$, $\mathbf{s}_{i+1,j+1}$. Calcoliamo procedendo in senso antiorario la differenza fra spin adiacenti riportandole nell'intervallo $[-\pi, \pi]$ e sommiamole, cioè calcoliamo

$$q_{ij} = [f(\theta_{i+1,j} - \theta_{i,j}) + f(\theta_{i+1,j+1} - \theta_{i+1,j}) + f(\theta_{i,j+1} - \theta_{i+1,j+1}) + f(\theta_{ij} - \theta_{i,j+1})]$$

dove f è una funzione che riporta le differenze fra angoli nell'intervallo $[-\pi, \pi]$. Diciamo che

- È presente un **vortice** se $q_{ij} = 2\pi$;
- È presente un **antivortice** se $q_{ij} = -2\pi$.

Transizione di Kosterlitz-Thouless

Nonostante non possa verificarsi rottura spontanea di simmetria, il sistema mostra comunque una transizione di fase legata però ai vortici, detta **transizione di Kosterlitz-Thouless**.

Esiste una temperatura T_{KT} tale che

- Per $T < T_{KT}$ la formazione dei vortici è sfavorita e quando sono presenti, lo sono in coppie vortice-antivortice.
- Per $T > T_{KT}$ la formazione di vortici è favorita e sono liberi.

Questa transizione si può caratterizzare in modo quantitativo studiando la funzione di correlazione fra spin: sopra la temperatura critica la funzione di correlazione decade esponenzialmente, sotto decade con legge a potenza.

Indice

1 Metodo Monte Carlo

- Generalità sugli algoritmi Monte Carlo
- Equazione di Langevin

2 Modello XY

3 Studio Monte Carlo del modello XY: aspetti importanti

- Aspetti generali
- Passo dt
- Termalizzazione
- Autocorrelazione

4 Risultati

- Energia
- Magnetizzazione
- Vortici

5 Bibliografia

Aspetti generali

Le simulazioni sono state effettuate su reticoli $N \times N$ con $N = 8, 16, 32, 64, 128$ con condizioni al contorno periodiche. Le osservabili prese in considerazione sono

- L'energia media per spin

$$\overline{E} = \frac{\langle H \rangle}{N^2}$$

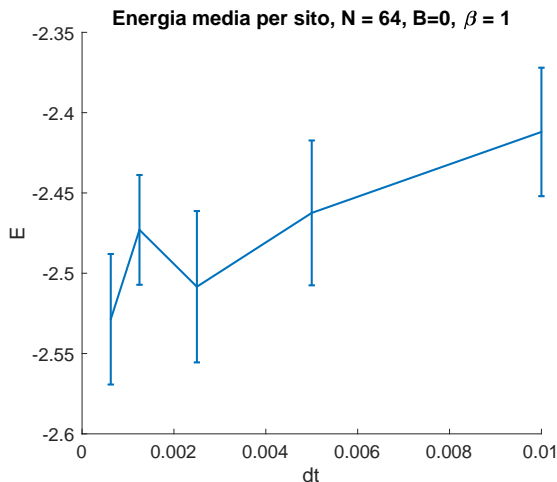
- La magnetizzazione media per spin

$$\overline{M}_x = \frac{\langle \cos \theta \rangle}{N^2} \quad \overline{M}_y = \frac{\langle \sin \theta \rangle}{N^2}$$

- Il numero di vortici e antivortici.

Passo dt

Andamento energia media per sito per $\beta = 1$, $N = 64$, $B = 0$.



Occorrerebbe estrapolare per $dt \rightarrow 0$. Osserviamo che a partire da $dt = 0.002$ i risultati convergono a un valore stabile. Prendiamo allora

$$dt = 0.002$$

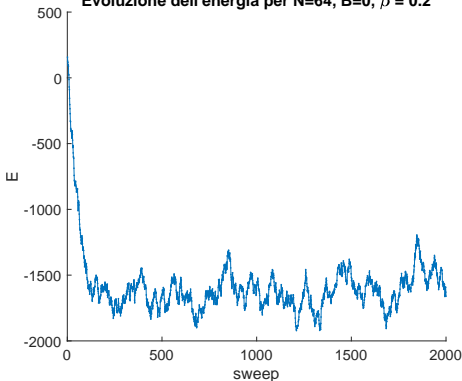
Termalizzazione

- La simulazione inizia "a caldo", cioè con una configurazione disordinata in cui a ogni spin è assegnato casualmente un angolo fra 0 e 2π .
- Vengono scartate le prime configurazioni in modo che il sistema raggiunga l'equilibrio termico. Il parametro **therm** può essere stimato graficando l'andamento di un'osservabile in funzione del numero di sweep e cercando il momento in cui i valori dell'osservabile si assestano all'equilibrio. È importante ripetere questo studio per varie configurazioni di partenza per evitare di finire in una configurazione metastabile.
- Inoltre è stata usata come configurazione di partenza per la temperatura successiva l'ultima configurazione della temperatura precedente: così il sistema parte più vicino all'equilibrio e lo raggiungerà più facilmente.

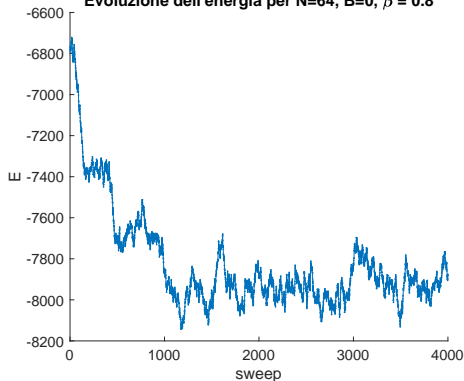
Termalizzazione

Evoluzione dell'energia per un reticolo 64×64 con $B = 0$, per $\beta = 0.2$ e $\beta = 0.8$.

Evoluzione dell'energia per $N=64$, $B=0$, $\beta = 0.2$



Evoluzione dell'energia per $N=64$, $B=0$, $\beta = 0.8$



Da varie prove effettuate si è scelto

$$\text{therm} = 500$$

Autocorrelazione

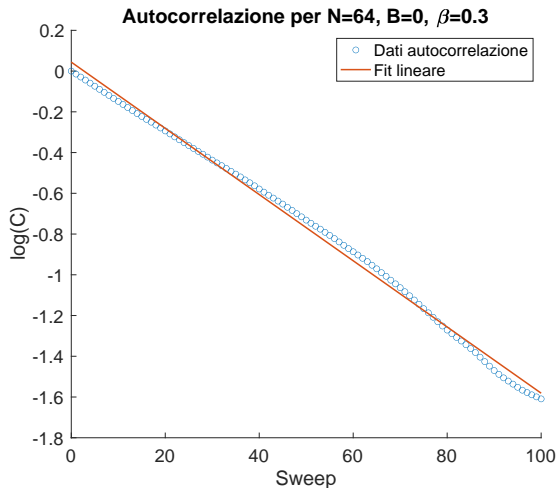
È stata calcolata l'autocorrelazione normalizzata a varie temperature per poter decidere il parametro **skip**, utilizzando come osservabile l'energia.

Grazie al teorema di Wiener-Chinčîn, il calcolo può essere effettuato nello spazio di Fourier sfruttando la trasformata di Fourier discreta.

```
E = E - mean(E);  
ac = fft(E);  
ac = ifft(ac.*conj(ac));  
ac = ac./ac(1);    %Normalizzazione
```

Riportiamo in scala logaritmica risultati per $\beta = 0.3$ e $\beta = 1$ con un reticolo 64×64 e $B = 0$. Il valore dell'autocorrelazione τ è stato calcolato con un fit lineare.

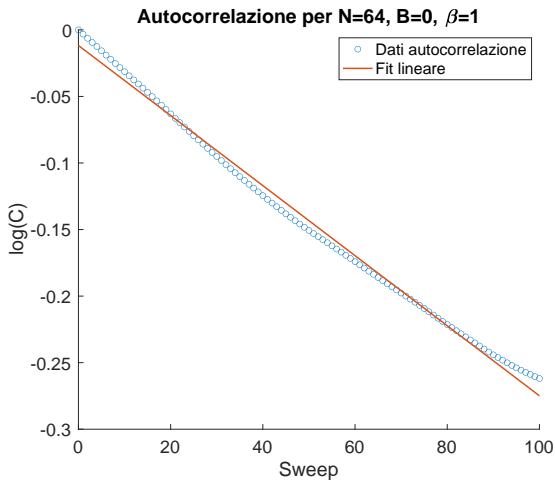
Autocorrelazione



Per $\beta = 0.3$ si è trovato

$$\tau \approx 62$$

Autocorrelazione



Per $\beta = 1$ si è trovato

$$\tau \approx 380$$

Indice

1 Metodo Monte Carlo

- Generalità sugli algoritmi Monte Carlo
- Equazione di Langevin

2 Modello XY

3 Studio Monte Carlo del modello XY: aspetti importanti

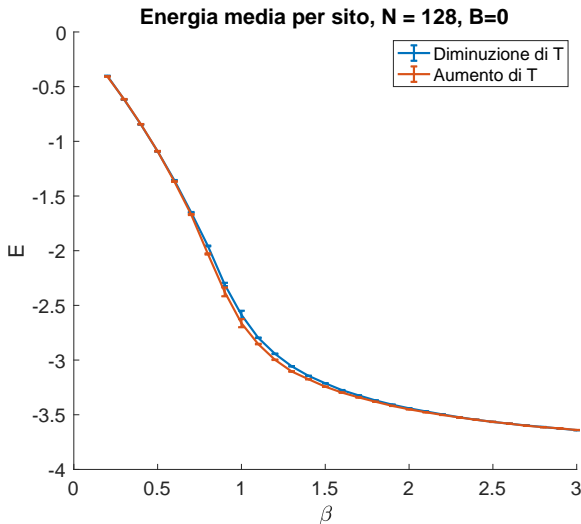
- Aspetti generali
- Passo dt
- Termalizzazione
- Autocorrelazione

4 Risultati

- Energia
- Magnetizzazione
- Vortici

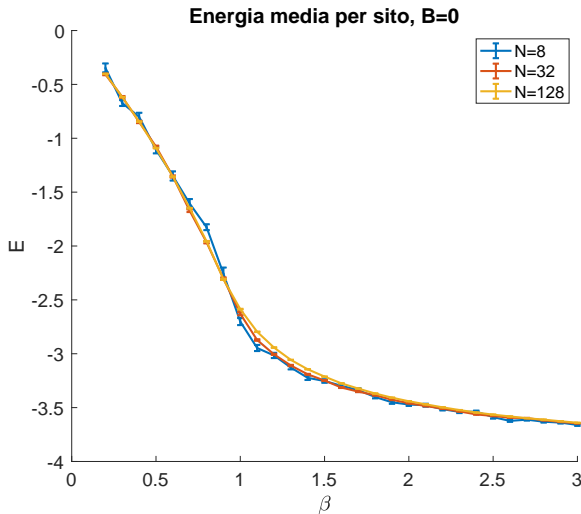
5 Bibliografia

Energia



Energia media per spin per un reticolo 128×128 con campo esterno nullo.

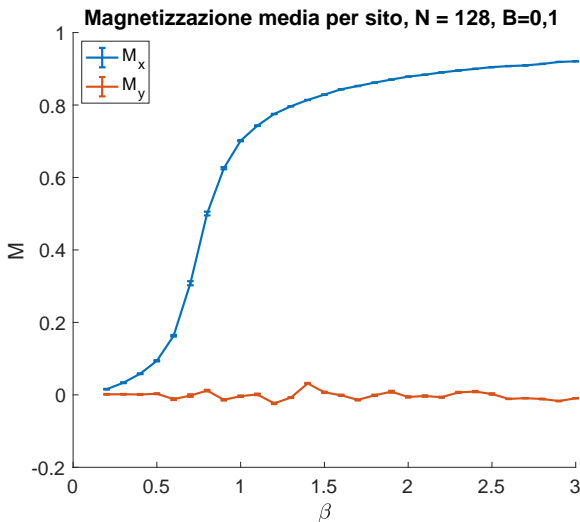
Energia



Confronto
dell'andamento
dell'energia per
diverse dimensioni
dei reticoli.
All'aumentare di N le
fluttuazioni
diminuiscono.

Magnetizzazione

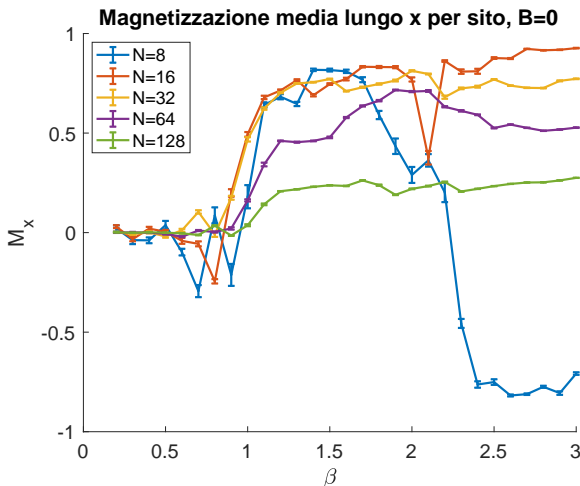
Introduciamo un campo magnetico $\mathbf{B} = (B, 0)$ con $B = 0.1$.



Come ci si aspetta, a basse temperature gli spin tendono ad allinearsi al campo esterno e quindi la componente x della magnetizzazione tende a 1. La componente y invece continua a fluttuare attorno a zero.

Magnetizzazione

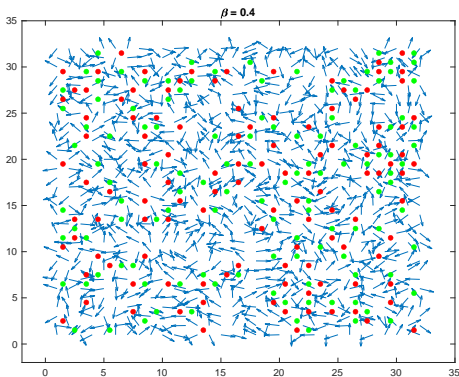
Componente M_x della magnetizzazione media a $\mathbf{B} = 0$ per varie dimensioni dei reticoli.



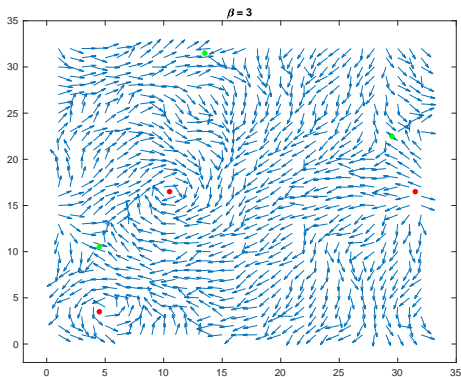
All'aumentare delle dimensioni dei reticoli le fluttuazioni si smorzano. Nel limite di reticolo infinito la magnetizzazione media sarà nulla.

Vortici

Reticolo 32x32. In rosso i **vortici**, in verde gli **antivortici**.



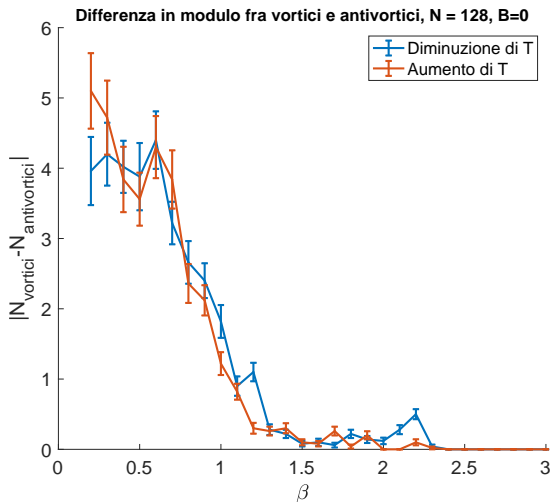
Alta temperatura



Bassa temperatura

Vortici

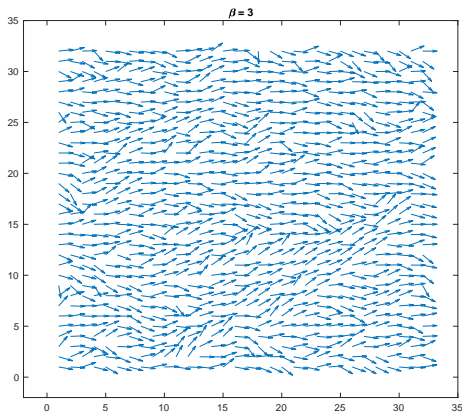
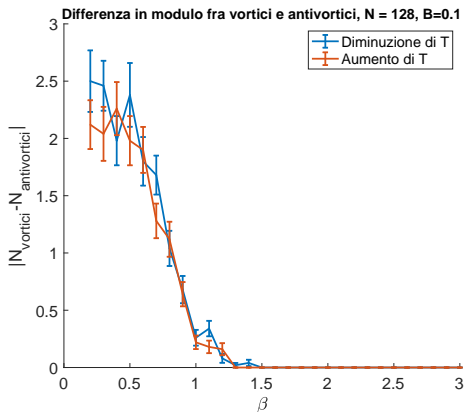
Riportiamo la differenza media fra il numero di vortici e di antivortici.



I risultati sono compatibili con quanto atteso nella transizione di Kosterlitz-Thouless: a basse temperature avremo pochi vortici e solitamente accoppiati con antivortici, ad alte temperature invece vortici e antivortici sono liberi.

Vortici

Differenza fra numero di vortici e antivortici per $B = 0.1$.



Bibliografia I



E. Onofri

Metodi probabilistici per la fisica.

Università degli Studi di Parma



A. D. Sokal

Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms.

Cargèse Summer School on "Functional Integration: Basics and Applications", 1996



A. Pelissetto

Introduction to the Monte Carlo method.

Seminario Nazionale di Fisica Teorica, Parma, 1991

Bibliografia II



H. Gould et al.

An Introduction to Computer Simulation Methods Third Edition
(revised).

2007

<https://www.compadre.org/Repository/document/ServeFile.cfm?ID=7375&DocID=527>



E. Onofri, A. Sanesi

Fourier-accelerated Langevin equation for the planar XY model.
Nuovo Cim, B, 100(2), 173-184, 1987



S. Duane et al.

Hybrid Monte Carlo.

Phys. Lett. B, 195, 216-222, 1987

Bibliografia III



H. Jeldtoft Jensen

The Kosterlitz-Thouless Transition.

Department of Mathematics, Imperial College London

<https://www.mit.edu/~levitov/8.334/notes/XYnotes1.pdf>



Wikipedia

Classical XY Model — Wikipedia, The Free Encyclopedia.

https://en.wikipedia.org/wiki/Classical_XY_model



Wikipedia

Kosterlitz-Thouless transition — Wikipedia, The Free Encyclopedia.

https://en.wikipedia.org/wiki/Kosterlitz-Thouless_transition



Wikipedia

Mermin-Wagner theorem — Wikipedia, The Free Encyclopedia.

https://en.wikipedia.org/wiki/Mermin-Wagner_theorem