

Il modello di Ising

Simulazione di Materia Condensata e Biosistemi

Filippo Negrini (Matricola: 47127A)





Table of Contents

1 Introduzione

► Introduzione

▶ Metodi numerici

Simulazioni modello di Ising1

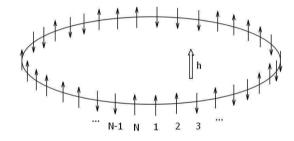


Hamiltoniana

1 Introduzione

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$

- Interazione fra primi vicini
- Accoppiamento con un campo esterno



 ${\sf Modello\ di\ Ising\ 1D\ con\ condizioni\ periodiche.}$



Modello di Ising 1D

1 Introduzione

- Teoria di campo medio
- \diamond Sistema presenta una transizione di fase a $T_c \neq 0$

$$m = \tanh \left[\beta \left(h + J n_{nn} m\right)\right]$$

- Soluzione analitica
- \diamond Sistema disordinato per ogni $T \neq 0$ a campo esterno nullo

$$m\,=\,\frac{\sinh{(\beta h)}}{\sqrt{e^{-4\beta J}\,+\,\sinh^2{(\beta h)}}}$$

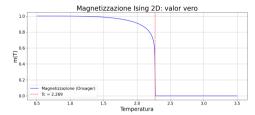


Modello di Ising 2D

1 Introduzione

- \diamond Soluzione analitica per $h \neq 0$
- \diamond Sistema presenta una transizione di fase a $T_c
 eq 0$

$$m\left(eta,\,h=0
ight) \,=\, egin{dcases} \left[1\,-\,rac{1}{\sinh^4\left(2eta J
ight)}
ight]^rac{1}{8} & T\,<\,T_c \ 0 & T\,>\,T_c \end{cases}$$



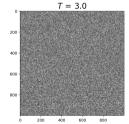




Table of Contents

2 Metodi numerici

- ▶ Introduzione
- ► Metodi numerici

Simulazioni modello di Ising1



Metropolis vs Wolff

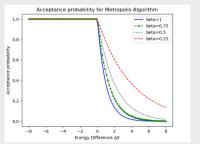
2 Metodi numerici

Metropolis

⋄ Tentata inversione di un singolo spin

$$\diamond A(\nu \mid \mu) = \min \left[1, e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}\right]$$

 \diamond Ottimo per $T \ll T_c$ oppure $T \gg T_c$

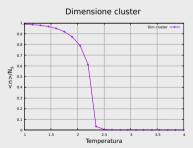


Wolff

Algoritmo di clustering

$$\diamond P_{add} = 1 - \exp(-2\beta J)$$

 \diamond Ottimo per $T \simeq T_c$

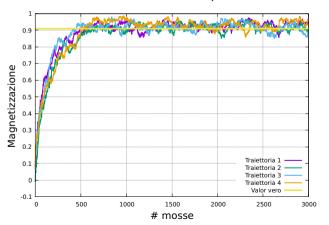




Termalizzazione

2 Metodi numerici

Termalizzazione: 3000 spin, T = 0.5



- Giungere all'equilibrio termodinamico
- Attenzione a stati metastabili
- Dipendenza dalla condizione iniziale

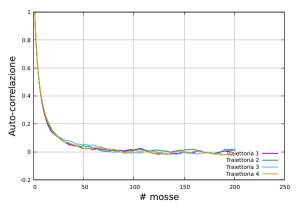
Termalizzazione per modello di Ising 1D.



Auto-correlazione

2 Metodi numerici

Autocorrelazione m: N = 500, T = 2.0



Autocorrelazione per modello di Ising 2D.

Definizione

$$\chi(t) = \frac{\langle m(t')m(t'+t)\rangle_{t'} - \langle m\rangle^2}{\sigma_m^2}$$

$$\diamond \chi(t) \propto e^{-t/t_c}$$

 Indipendenza statistica fra configurazioni

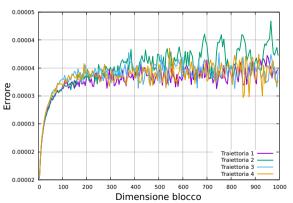
$$\diamond n_{max} = \frac{t_{max}}{2t_c}$$



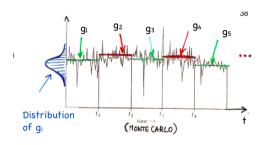
Data-blocking

2 Metodi numerici

Dimensione blocco: N = 500, T = 2.0



Analisi per dimensione blocchi nel caso di un modello di Ising 2D.



- Dati raggruppati in blocchi
- $\diamond~$ Errore satura quando raggiunta l_{lim}



Table of Contents

3 Simulazioni modello di Ising1D

▶ Introduzione

- ▶ Metodi numerici
- ► Simulazioni modello di Ising1D

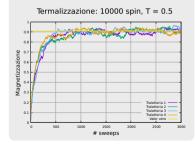


Caratterizzazione

3 Simulazioni modello di Ising1D

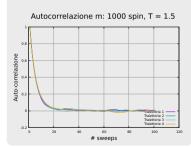
Termalizzazione

- \diamond Maggiore T, minore t_{term}
- $\diamond t_{term}^{max} \simeq 600 \text{ sweeps}$



Auto-correlazione

- \diamond Maggiore T, minore t_c
- $\diamond t_c^{max} \simeq 500 \, \mathrm{sweeps}$



Blocchi

- \diamond Maggiore T, minore l_{blk}
- $\diamond~l_{blk}^{max} \simeq~1000~{
 m sweeps}$

