

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 Ising 1E
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- Conclusioni
- Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2E

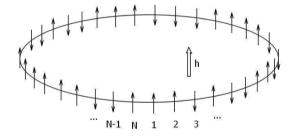


Hamiltoniana

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



Modello di Ising 1D con condizioni periodiche.



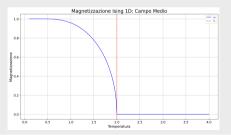
Modello di Ising 1D

1 Introduzione

Campo medio

 \diamond Transizione di fase a $T_c \neq 0$

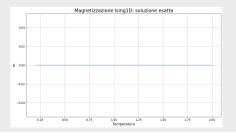
$$m = \tanh \left[\beta \left(h + J n_{nn} m\right)\right]$$



Soluzione analitica

 \diamond No magnetizzazione se $T \neq 0$, h = 0

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



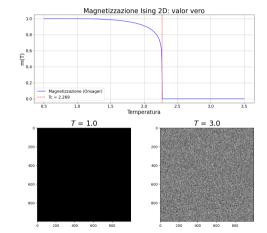


Modello di Ising 2D

1 Introduzione

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

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





Modello XY

1 Introduzione

Hamiltoniana

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s_i} \cdot \vec{s_j} - \sum_i \vec{h} \cdot \vec{s_i}$$

- ⋄ Simmetria continua
- Difetti topologici (vortici)

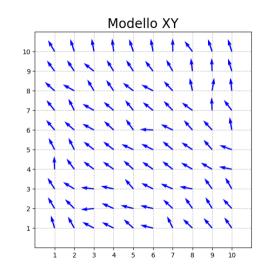




Table of Contents

2 Metodi numerici

- ▶ Introduzione
- ► Metodi numerici
- Simulazioni modello di Ising 1E
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ► Backup modello di Ising 20



Metropolis vs Wolff

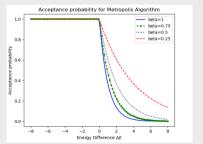
2 Metodi numerici

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 $T \gg T_c$

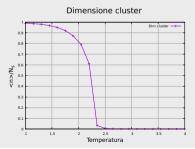


Wolff

Algoritmo di clustering

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

 \diamond Ottimo per $T \simeq T_c$

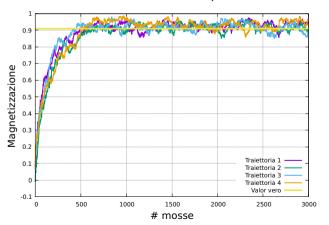




Termalizzazione

2 Metodi numerici

Termalizzazione: 3000 spin, T = 0.5



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

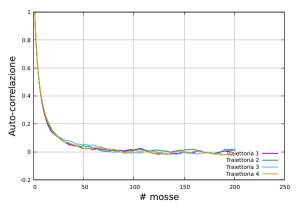
Termalizzazione per modello di Ising 1D.



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

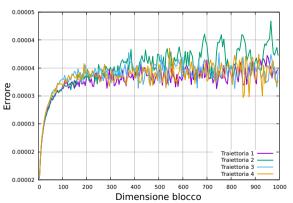
$$\diamond n_{max} = \frac{t_{max}}{2t_c}$$



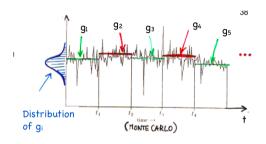
Data-blocking

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

- ▶ Introduzione
- Metodi numeric
- ► Simulazioni modello di Ising 1D
- ► Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D

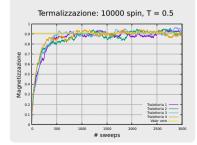


Caratterizzazione

3 Simulazioni modello di Ising 1D

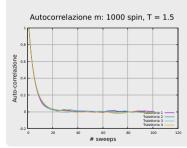
Termalizzazione

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



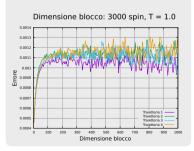
Auto-correlazione

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



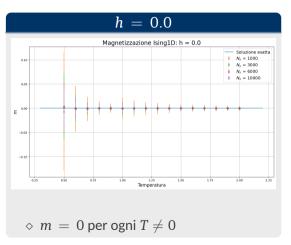
Blocchi

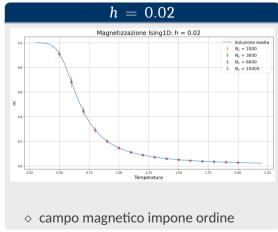
- \diamond Maggiore T, minore l_{blk}
- $\diamond~l_{blk}^{max} \simeq~1000~{
 m sweeps}$





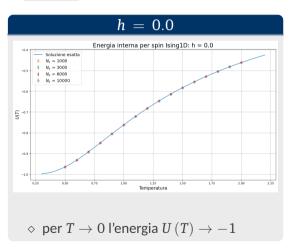
Magnetizzazione

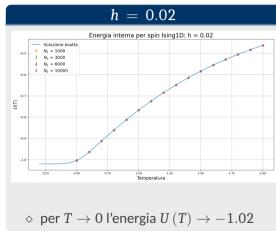






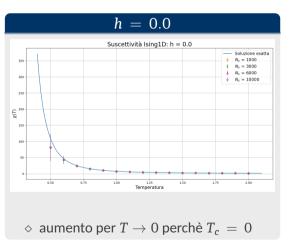
Energia interna

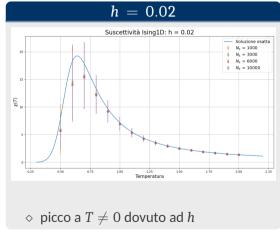






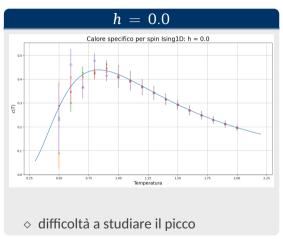
Suscettività magnetica







Calore specifico



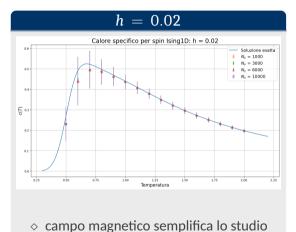




Table of Contents

- ▶ Introduzion
- ▶ Metodi numeric
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ► Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D

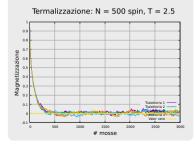


Caratterizzazione con metropolis

4 Simulazioni modello di Ising 1D

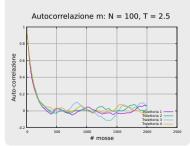
Termalizzazione

- $\diamond~t_{ter}$ maggiori per $T \simeq T_c$
- $\diamond t_{ter}^{max} \simeq 500 \text{ sweeps}$



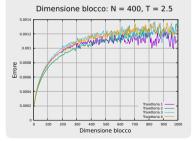
Auto-correlazione

- $\diamond~t_c$ maggiori per $T \simeq T_c$
- $\diamond t_c^{max} \simeq 400 \, \mathrm{sweeps}$



Blocchi

- $\diamond~l_{blk}$ maggiori per $T \simeq T_c$
- $\diamond~l_{blk}^{max} \simeq~1000~{
 m sweeps}$





Caratterizzazione con Wolff

4 Simulazioni modello di Ising 1D

Termalizzazione

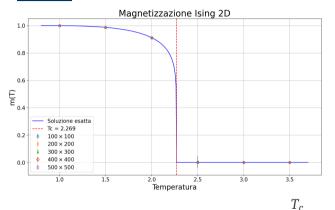
Auto-correlazione

Blocchi



Magnetizzazione

4 Simulazioni modello di Ising 1D



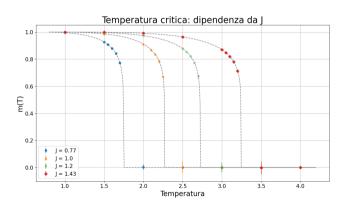
- \diamond Magnetizzazione spontanea per $T < T_c$
- \diamond Transizione di fase a T_c

Ferromagnetico

Paramagnetico Paramagnetico



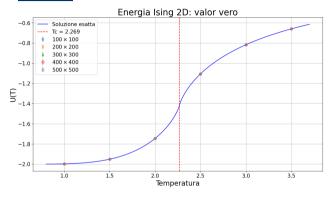
Dipendenza da J



- \diamond Aumenta I, aumenta T_c
- Presenza o meno di ordine dipende dall'intensità dell'interazione



Energia



- copro tutto il reticolo con due legami per spin
- \diamond picco del calore specifico a T_c

$$U = -NJ \coth{(2eta J)} \left\{ 1 + rac{2}{\pi} \left[2 anh^2 \left(2eta J
ight) - 1
ight] \int_0^{\pi/2} rac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2{(\phi)}}}
ight\}$$



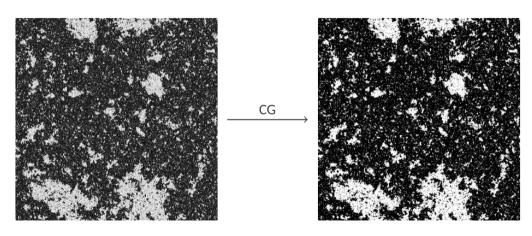
Calore specifico



Suscettività



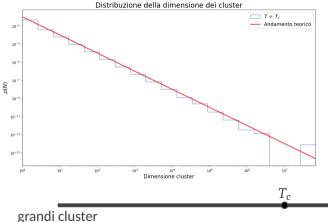
Coarse graining 4 Simulazioni modello di Ising 1D





Dimensioni cluster

4 Simulazioni modello di Ising 1D



- $\diamond P(s) \propto s^{-\alpha}$
- $\diamond \ \alpha \simeq 2$
- perdita di un parametro di scala

piccoli cluster



Esponenti critici 4 Simulazioni modello di Ising 1D



Table of Contents

5 Conclusioni

- ▶ Introduzione
- Metodi numerici
- Simulazioni modello di Ising 1D
- Simulazioni modello di Ising 1D
- **▶** Conclusioni
- Backup modello di Ising 1D
- ► Backup modello di Ising 2D



Grazie per l'attenzione



Table of Contents

6 Backup modello di Ising 1D

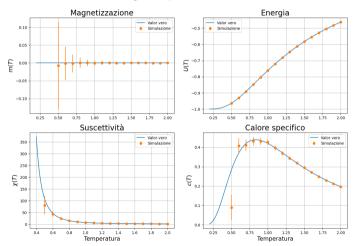
- ► Introduzione
- ▶ Metodi numeric
- Simulazioni modello di Ising 1D
- Simulazioni modello di Ising 1D
- Conclusioni
- ► Backup modello di Ising 1D
- ► Backup modello di Ising 20



Osservabili per N_s = 1000, h = 0.0

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 1000$, h = 0.0

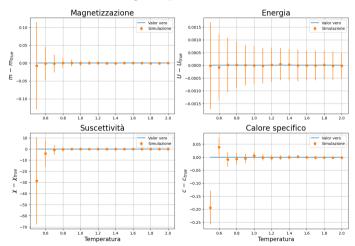




Differenza dal valor vero per N_s = 1000, h = 0.0

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 1000$, h = 0.0

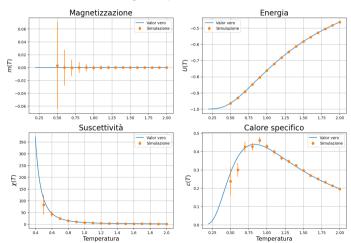




Osservabili per N_s = 3000, h = 0.0

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 3000$, h = 0.0

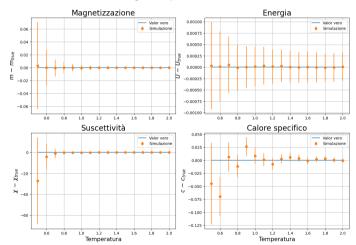




Differenza dal valor vero per N_s = 3000, h = 0.0

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 3000$, h = 0.0

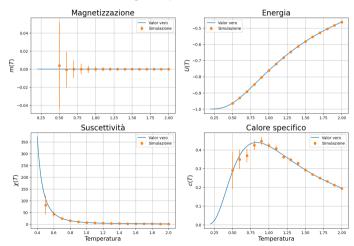




Osservabili per N_s = 6000, h = 0.0

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 6000$, h = 0.0

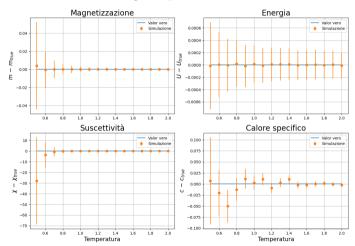




Differenza dal valor vero per N_s = 6000, h = 0.0

6 Backup modello di Ising 1D

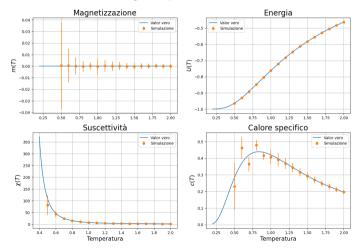
Ising 1D: $N_s = 6000$, h = 0.0





Osservabili per N_s = 10000, h = 0.0

Ising 1D: $N_s = 10000$, h = 0.0

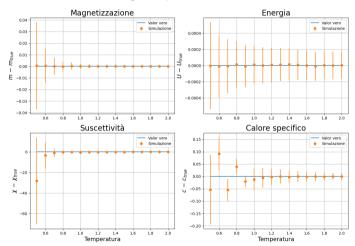




Differenza dal valor vero per N_s = 10000, h = 0.0

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 10000$, h = 0.0

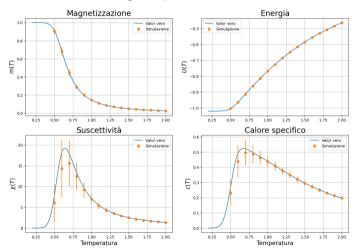




Osservabili per N_s = 1000, h = 0.02

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 1000$, h = 0.02

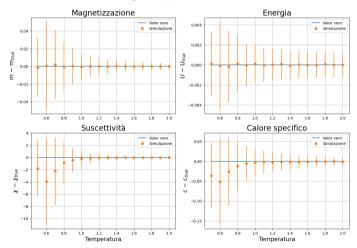




Differenza dal valor vero per N_s = 1000, h = 0.02

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 1000$, h = 0.02

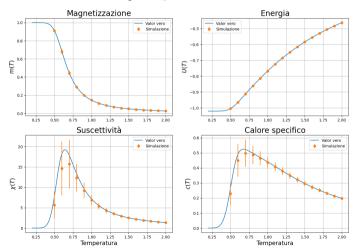




Osservabili per N_s = 3000, h = 0.02

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 3000$, h = 0.02

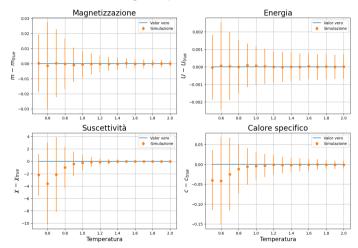




Differenza dal valor vero per N_s = 3000, h = 0.02

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 3000$, h = 0.02

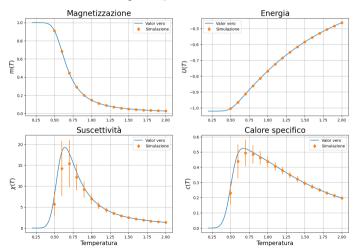




Osservabili per N_s = 6000, h = 0.02

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 6000$, h = 0.02

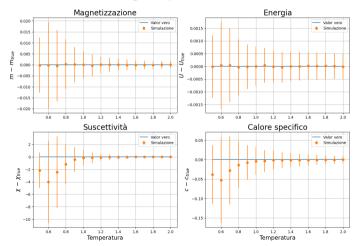




Differenza dal valor vero per N_s = 6000, h = 0.02

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 6000$, h = 0.02

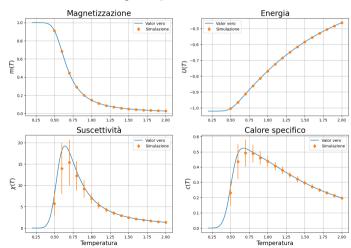




Osservabili per N_s = 10000, h = 0.02

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 10000$, h = 0.02





Differenza dal valor vero per N_s = 10000, h = 0.02

6 Backup modello di Ising 1D

Ising 1D: $N_s = 10000$, h = 0.02

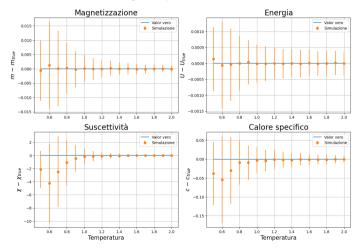




Table of Contents

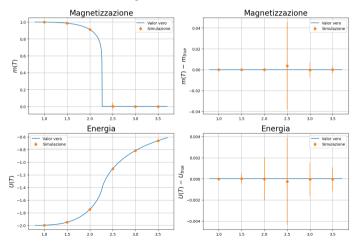
- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numeric
- Simulazioni modello di Ising 1D
- Simulazioni modello di Ising 1D
- Conclusioni
- Backup modello di Ising 1D
- ► Backup modello di Ising 2D



Osservabili per reticolo 100×100

7 Backup modello di Ising 2D

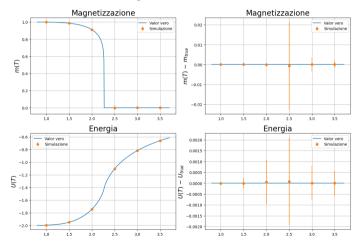
Ising 2D: reticolo 100×100





Osservabili per reticolo 200×200

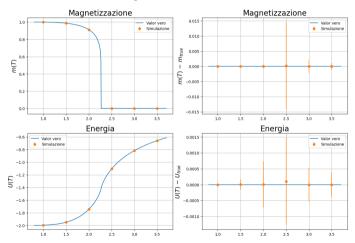
Ising 2D: reticolo 200 × 200





Osservabili per reticolo 300×300

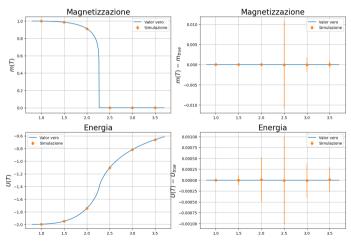
Ising 2D: reticolo 300 × 300





Osservabili per reticolo 400×400

Ising 2D: reticolo 400×400





Osservabili per reticolo 500×500

Ising 2D: reticolo 500 × 500

