

Il modello di Ising

Autore: Filippo Negrini

Corso: Simulazione di Materia Condensata e Biosistemi

Università: Università degli Studi di Milano

23 gennaio 2025

Indice

1 Modello di Ising 1D	3
1.1 Teoria di campo medio	3
1.1.1 Magnetizzazione	4
1.1.2 Esponenti critici	5
1.2 Soluzione esatta	6
1.2.1 Magnetizzazione	7
1.2.2 Correlazioni fra spin	8
1.2.3 Domain walls	8
2 Modello di Ising 2D	10
2.1 Domain walls	11
2.2 Fenomeni ad invarianza di scala	12
2.2.1 $T < T_c$	12
2.2.2 $T > T_c$	12
2.2.3 $T = T_c$	13
3 Simulazioni Monte-Carlo	16
3.1 Generatore di numeri casuali	16
3.2 Inizializzazione	17
3.3 Algoritmo di Metropolis	17
3.3.1 Metropolis Ising 1D	17
3.3.2 Metropolis Ising 2D	18
3.4 Termalizzazione	19
3.5 Autocorrelazione	19
3.6 Data-blocking	20
3.7 Algoritmo di Wolff	21
4 Simulazioni modello di Ising 1D	24
4.1 Simulazioni con campo magnetico $h = 0.02$	24
4.1.1 Termalizzazione	24
4.1.2 Auto-correlazione	29
4.1.3 Dimensione dei blocchi	33
4.2 Simulazioni con campo magnetico $h = 0.0$	37
4.2.1 Termalizzazione	37
4.2.2 Auto-correlazione	41
4.2.3 Dimensione dei blocchi	45

5 Simulazioni modello di Ising 2D	49
5.1 Simulazioni con algoritmo di Metropolis	49
5.1.1 Termalizzazione	50
5.1.2 Autocorrelazione	50
5.1.3 Lunghezza dei blocchi	50

Il modello di Ising consiste in un reticolo che presenta un momento magnetico (o spin) in ogni sito. Nel modello questi spin assumono la forma più semplice possibile, non particolarmente realistica, di variabili scalari σ_i di valori ± 1 , rappresentanti rispettivamente dipoli unitari rivolti verso l'alto oppure verso il basso. Tali spin interagiscono fra loro e possono accoppiarsi ad un campo magnetico esterno e per tale motivo l'Hamiltoniana del sistema assume la forma

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (0.1)$$

dove la notazione $\langle ij \rangle$ denota una somma su primi vicini. Se il parametro J è positivo i dipoli vicini tendono ad allinearsi e quindi il modello è di tipo ferromagnetico, altrimenti quando $J < 0$ si ha anti-allineamento e fenomenologia anti-ferromagnetica.

1 Modello di Ising 1D

Il modello di Ising 1D è uno dei pochi modelli della meccanica statistica che presenta una soluzione esatta. Il reticolo che prendiamo in considerazione in questo caso è lineare, tale per cui ogni sito reticolare presenta solo due primi vicini. Lavorando con condizioni periodiche al contorno, l' N -esimo spin diventa un vicino del primo ed il sistema si chiude ad anello, come è possibile apprezzare in Figura 1.

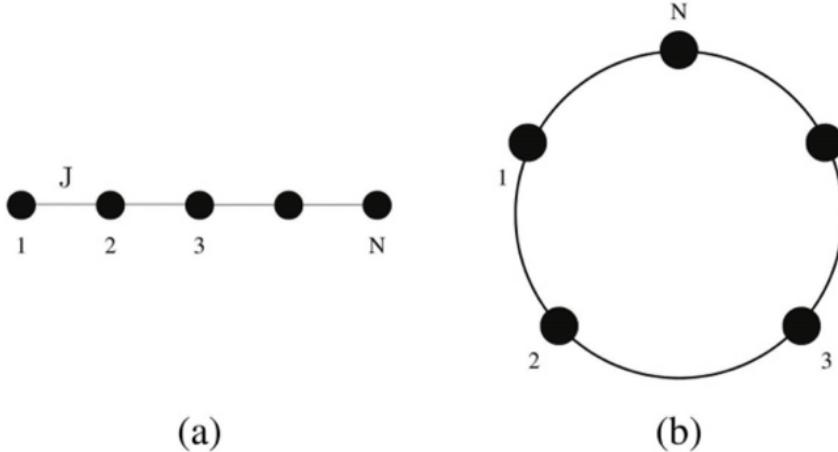


Figura 1: L'immagine (a) è un esempio di modello di Ising 1D senza pbc, mentre in (b) si può apprezzare come la catena si chiuda su se stessa nel caso di condizioni periodiche al contorno.

Sebbene il modello di Ising 1D ammetta soluzione esatta, è istruttivo lavorare inizialmente con una teoria di campo medio, che presuppone la sostituzione del termine d'interazione fra spin con un termine efficace (di campo medio) in cui sono trascurate le fluttuazioni degli spin.

1.1 Teoria di campo medio

Il punto di partenza di una teoria di campo medio è la semplificazione del temine d'interazione presente nell'Hamiltoniana. Nel caso del modello di Ising mono-dimensionale l'interazione fra spin primi vicini può essere riscritta come

$$\sigma_i \sigma_j = (\sigma_i - m + m)(\sigma_j - m + m) = -m^2 + m\sigma_i + m\sigma_j + (\sigma_i - m)(\sigma_j - m), \quad (1.1)$$

dove l'ultimo termine della somma misura le fluttuazioni fra spin. L'approssimazione di campo medio consiste nel trascurare completamente l'ultimo termine, in modo tale che tutti

gli spin risultino essere disaccoppiati fra loro e sia più immediato il calcolo della funzione di partizione. L'Hamiltoniana di campo medio risulta quindi

$$H_{MF} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} [-m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j)] - h \sum_i \sigma_i, \quad (1.2)$$

da cui è immediato il calcolo della funzione di partizione

$$Q_{MF} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{MF}} = \exp\left(-\frac{\beta J m^2 N n_{nn}}{2}\right) \{2 \cosh[\beta(J n_{nn} m + h)]\}^N. \quad (1.3)$$

Nella relazione precedente la quantità n_{nn} è il numero di coordinazione del reticolo, ossia la quantità di primi vicini che ha un generico spin (nel caso in considerazione sarà quindi pari a due). L'energia libera per particella è data da

$$\frac{F}{N} = -\frac{k_B T}{N} \ln(Q_{MF}) = \frac{JM^2 n_{nn}}{2} - \frac{1}{\beta} \ln\{2 \cosh[\beta(h + J n_{nn} m)]\} \quad (1.4)$$

da cui è possibile ricavare tutta la termodinamica del sistema.

1.1.1 Magnetizzazione

La magnetizzazione si ricava derivando rispetto al campo magnetico h l'energia libera per spin. La relazione che si ottiene è nota come *equazione di Bragg-Williams*, che può essere espressa nella forma

$$\tanh^{-1}(m) = \frac{h + n_{nn} J m}{k_B T} \quad (1.5)$$

Nel caso in cui il campo magnetico è identicamente nullo, è necessario distinguere due casistiche in base alla temperatura del sistema. In primo luogo è necessario introdurre la temperatura critica

$$T_c = \frac{n_{nn} J}{k_B}, \quad (1.6)$$

che consente di riscrivere il secondo membro dell'equazione di Bragg-Williams in funzione del rapporto fra T_c e la temperatura a cui il sistema si trova.

$$\tanh^{-1}(m) = \frac{T_c}{T} \quad (1.7)$$

Così facendo risulta evidente che quando $T > T_c$ l'unica soluzione possibile dell'equazione (1.7) è $m = 0$, ossia mancanza di magnetizzazione (e quindi ordine nel sistema). Nel caso opposto, ossia con $T < T_c$, si hanno tre possibili valori di m , ossia $0, \pm m_0$, con m_0 quantità finita. L'energia libera consente di identificare quale sia la soluzione fisica, poiché come è possibile osservare in Figura 2 quando la temperatura scende al di sotto di quella critica F passa da un regime in cui è presente un solo minimo in $m = 0$ ad un regime con due minimi equivalenti in $m = \pm m_0 \neq 0$.

Questi due valori d'equilibrio della magnetizzazione sono perfettamente simmetrici in assenza di campo magnetico: una rottura spontanea della simmetria per inversione di spin è necessaria per far sì che il sistema realizzi uno dei due stati di minimo globale dell'energia libera.

Nel caso di campo magnetico esterno diverso da zero non si osserva più la simmetria caratteristica del caso con $h = 0$ e l'allineamento fra spin concorde con il verso di h risulta essere energeticamente favorito.



Figura 2: Energia libera per particella al variare della temperatura del sistema. Quando la temperatura è maggiore o uguale di quella critica è presente un solo minimo in $m = 0$, mentre al di sotto di T_c sono presenti due minimi globali equivalenti e simmetrici rispetto ad $m = 0$, che è un massimo locale. Immagine da [1].

1.1.2 EspONENTI CRITICI

E' possibile caratterizzare il comportamento di un sistema nell'intorno del punto critico studiando le leggi di potenza con cui scalano le osservabili caratteristiche. Gli esponenti di queste leggi di potenza sono detti *esponenti critici*. I principali sono riportati nella seguente Tabella 1.1.2.

Esponente	Significato fisico
α	Describe l'andamento del calore specifico al punto critico
β	Describe l'andamento del parametro d'ordine al punto critico
γ	Describe l'andamento della suscettività al punto critico
δ	E' legato all'equazione di stato alla temperatura critica

Tabella 1: Esponenti critici e relativo significato

Procediamo ora al calcolo degli esponenti critici β e δ per il modello di Ising mono-dimensionale. L'equazione di Bragg-Williams è uno strumento importante per il calcolo di β , poichè per $T \rightarrow T_c^-$ la magnetizzazione è molto minore di uno ed è possibile espandere in serie la tangente iperbolica tralasciando i termini di ordine superiore al terzo

$$m = \tanh\left(m \frac{T_c}{T}\right) \simeq m \frac{T_c}{T} - \frac{m^3}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \quad (1.8)$$

in modo tale che, ponendo ad uno il fattore moltiplicativo del termine di grado 3, sia possibile ricavare la magnetizzazione in funzione della differenza fra la temperatura critica e quella a cui si trova il sistema. Dato che

$$m \simeq \sqrt{3 \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)}, \quad (1.9)$$

l'esponente critico β sarà pari ad un mezzo. Il calcolo di δ fa nuovamente uso dell'equazione di Bragg-Williams, che a temperature confrontabili con quella critica e per piccoli valori del campo magnetico, può essere espressa come

$$m = \tanh\left(\frac{h}{k_B T} + m \frac{T_c}{T}\right) \simeq \frac{h}{k_B T} + m \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3} \left(\frac{h}{k_B T} + m \frac{T_c}{T}\right)^3 \quad (1.10)$$

che porta all'equazione di stato approssimata

$$\frac{h}{k_B T} = m \frac{T - T_c}{T} + \frac{m^3}{3}. \quad (1.11)$$

Considerando l'isoterma critica, il primo termine della somma a secondo membro scompare in modo tale che magnetizzazione e campo magnetico siano legati come

$$m \simeq \left(\frac{3h}{k_B T_c}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (1.12)$$

che di conseguenza consente di identificare come $\delta = 3$. Sebbene una teoria di campo medio sia matematicamente più abbordabile rispetto alla risoluzione analitica del modello, alcune delle previsioni della stessa sono errate. Si vedrà nella prossima sezione che è impossibile per il modello di Ising 1D presentare magnetizzazione non nulla a temperatura finita ed in assenza di campo magnetico, fatto che nell'approccio di campo medio risultava essere evidente.

1.2 Soluzione esatta

Considerare un sistema con condizioni periodiche al contorno, come (b) in Figura 1, consente di scrivere l'Hamiltoniana in forma simmetrica

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}), \quad (1.13)$$

dato che $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. La funzione di partizione è data dalla somma su tutte le possibili configurazioni del sistema, che si traduce in

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left\{ \beta \left[J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right\} \quad (1.14)$$

Definendo una matrice P come

$$P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

è possibile riscrivere la funzione di partizione in termini matriciali

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle \sigma_1 | P | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | P | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_{N-1} | P | \sigma_N \rangle \langle \sigma_N | P | \sigma_1 \rangle \quad (1.16)$$

Notando che sono presenti $N - 1$ completezze, è possibile procedere ad una semplificazione estrema della relazione (1.16) che consente di apprezzare come la funzione di partizione altro non sia che la traccia della matrice P elevata alla N .

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle \sigma_1 | P^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr}(P^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \quad (1.17)$$

dove λ_1 e λ_2 sono gli autovalori della matrice P . La loro determinazione richiede la soluzione di un problema agli autovalori, che porta a

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h)}. \quad (1.18)$$

Una ottima approssimazione, quando il numero di spin preso in considerazione è elevato, consiste nel trascurare il secondo autovalore dato che

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N = 0. \quad (1.19)$$

L'energia libera di Helmholtz, dalla quale è possibile determinare tutta la termodinamica del sistema, risulta quindi

$$A(h, T) = -k_B T \ln [Q(h, T)] \simeq -N k_B T \ln(\lambda_1). \quad (1.20)$$

1.2.1 Magnetizzazione

Dall'energia libera di Helmholtz è possibile ricavare la magnetizzazione per spin, che costituisce il parametro d'ordine del sistema in analisi ed in quanto tale consente di caratterizzare le transizioni di fase. In particolare, tale quantità si ottiene come derivata di $A(h, T)$ rispetto al campo magnetico applicato, in modo tale che

$$m = - \left(\frac{\partial A/N}{\partial h} \right)_T = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta h)}} \quad (1.21)$$

Notiamo che se $h \rightarrow 0$ la magnetizzazione tende ad un valore nullo per ogni temperatura finita. Questo fatto evidenzia come sia impossibile avere una transizione di fase a temperatura finita T , come invece sembrava evidente nella teoria di campo medio. Quando si ha $T = 0$ m satura ad uno per ogni valore del campo magnetico, il che implica spin totalmente allineati; questo significa che la temperatura critica T_c coincide con lo zero assoluto. E' anche possibile calcolare la suscettività magnetica, la quale diverge quanto $T \rightarrow 0$, che è il comportamento che ci si aspetterebbe al punto critico.

Il motivo alla base delle errate previsioni della teoria di campo medio è che tale approccio diventa esatto nel limite in cui le fluttuazioni del parametro d'ordine sono molto più piccole del valore effettivo dello stesso al punto critico. Il *criterio di Ginzburg* afferma che per sistemi tipo Ising, il campo medio fornisce soluzioni esatte solamente per dimensioni del reticolo superiori a quattro. Il miglioramento delle previsioni all'aumentare della dimensionalità risulta evidente dal confronto fra gli esponenti critici calcolati in campo medio e quelli ottenuti in modo analitico o computazionale mediante simulazioni Monte-Carlo.

Esponente	Mean-field	Ising 2D	Ising 3D
α	0	0	0.119 ± 0.006
β	$1/2$	$1/8$	0.326 ± 0.004
γ	1	$7/4$	1.239 ± 0.003
δ	3	?	4.80 ± 0.05
ν	$1/2$	1	0.627 ± 0.002

Tabella 2: Confronto fra esponenti critici calcolati in campo-medio e in modo analitico/numerico per modelli di Ising 2D e 3D.

1.2.2 Correlazioni fra spin

Consideriamo ora un modello di Ising costituito da un reticolo lineare aperto, senza più condizioni al contorno periodiche, come quello in Figura 3.



Figura 3: Esempio di catena di spin per la determinazione della funzione di correlazione fra due spin. Immagine da [1].

La funzione di correlazione fra due spin σ_i e σ_j è definita come

$$G_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (1.22)$$

e consente di valutare se due spin sono correlati o meno. Nel caso del modello di Ising 1D la funzione di correlazione risulta essere

$$G_{i,i+r} = (\tanh \beta J)^r. \quad (1.23)$$

Dall'equazione (1.23) è possibile determinare quale sia la lunghezza di correlazione esprimendo la $G_{i,i+r}$ come una funzione esponenzialmente decadente della separazione r fra gli spin in analisi.

$$G_{i,i+r} = e^{r[\ln(\tanh \beta J)]} = e^{-r/\xi}, \quad (1.24)$$

da cui risulta che la lunghezza di correlazione è pari a

$$\xi = -\frac{1}{\ln [\tanh (J/k_B T)]}. \quad (1.25)$$

Notiamo che la lunghezza di correlazione è sempre maggiore o uguale a zero. Inoltre, quando la temperatura tende a zero, ξ diverge ad infinito. Il fatto che questo accada solamente a temperatura nulla evidenzia come non si abbia correlazione (e di conseguenza ordine) a lungo raggio fra gli spin per ogni $T \neq 0$.

1.2.3 Domain walls

I domain walls sono i bordi che delimitano due domini magnetici caratterizzati da orientamenti differenti dei momenti magnetici. Studiare quale sia l'effetto di queste interfacce sull'energia libera consente di comprendere perchè nel modello di Ising 1D vinca il disordine (in assenza di campo magnetico) ad ogni temperatura finita. Consideriamo un sistema aperto (quindi senza pbc) a $T = 0$ e campo magnetico nullo. Esso si trova nel suo ground state, ossia tutti gli spin presentano lo stesso orientamento. La più semplice eccitazione di un sistema di questo genere consiste nella formazione di una singola interfaccia, come riportato in Figura 4, che separa totalmente spin up e spin down.



Figura 4: Esempio di eccitazione elementare per un modello di Ising 1D. Immagine da [1].

La differenza in energia fra i due stati sopracitati è pari a $2J$, quindi nel caso di un sistema che presenti una concentrazione $x = M/N$ di domain walls la variazione di energia libera sarà pari a

$$\Delta A = \Delta E - TS = 2JM - k_b T \ln \left[\frac{N!}{M!(N-M)!} \right], \quad (1.26)$$

dove ad argomento del logaritmo troviamo il numero di modi possibili in cui posizionare il domain wall. Utilizzando la formula di Stirling per espandere i fattoriali, è possibile ottenere la seguente relazione in funzione della concentrazione x introdotta in precedenza

$$\Delta A \simeq N \{ 2Jx + k_B T [x \ln(x) + (1-x) \ln(1-x)] \} \quad (1.27)$$

Per determinare quale sia la concentrazione all'equilibrio termodinamico si deve minimizzare l'energia libera, ossia la derivata prima della stessa rispetto ad x deve essere posta pari a zero. Questo porta a

$$x = \frac{1}{1 + \exp(2\beta J)}, \quad (1.28)$$

ossia una quantità finita per ogni $T \neq 0$. Questo evidenzia come non sia possibile long range order e di conseguenza la magnetizzazione sia identicamente nulla. In 1D, il contributo entropico all'energia libera domina su quello energetico, favorendo stati di disordine con spin orientati casualmente.

2 Modello di Ising 2D

Il modello di Ising 2D è un reticolo quadrato bidimensionale di spin che possono assumere solamente i valori ± 1 . L'Hamiltoniana del sistema è la stessa riportata in precedenza

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (2.1)$$

con la differenza che in questo caso ogni momento magnetico presenta quattro primi vicini. Il modello presenta soluzione analitica solamente nel caso di campo magnetico nullo. In tali condizioni, la magnetizzazione risulta essere

$$m(\beta, h=0) = \begin{cases} \left[1 - \frac{1}{\sinh^4(2\beta J)} \right]^{\frac{1}{8}} & T < T_c \\ 0 & T > T_c. \end{cases} \quad (2.2)$$

dove T_c è pari a

$$T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (2.3)$$

Come risulta evidente in Figura 5, la magnetizzazione passa rapidamente da un valore unitario a zero nell'intorno della temperatura critica. Dato che la magnetizzazione costituisce il parametro d'ordine per il modello di Ising, questo comportamento è un'evidenza della transizione di fase che il reticolo di spin subisce.

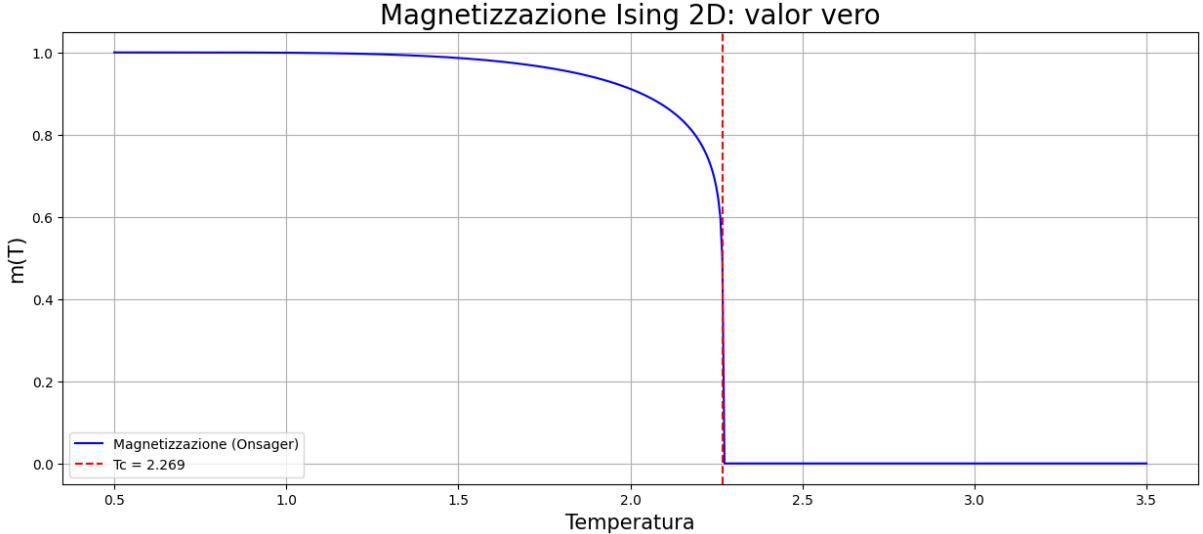


Figura 5: Magnetizzazione per il modello di Ising 2D in assenza di campo magnetico. E' possibile osservare come a $T = T_c$ la magnetizzazione passa rapidamente da un valore unitario a zero.

Al di sopra della temperatura critica il sistema è di natura paramagnetica e la magnetizzazione è nulla. Invece per $T < T_c$ gli spin sono ordinati ed il sistema presenta magnetizzazione spontanea. Per quanto riguarda l'energia interna, essa è data da

$$U = -NJ \coth(2\beta J) \left\{ 1 + \frac{2}{\pi} [2 \tanh^2(2\beta J) - 1] \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2(\phi)}} \right\}, \quad (2.4)$$

dove $k = 2 \sinh(2\beta J)/2 \cosh^2(2\beta J)$ e l'integrale che compare nella relazione precedente è un integrale ellittico completo del primo ordine.

2.1 Domain walls

Consideriamo ora un sistema di dimensione lineare La , dove L è un numero reale ed a invece il passo reticolare, in uno spazio a d dimensioni. Supponiamo inoltre che tale reticolo presenti un domain wall. In analogia con quanto osservato per il modello di Ising 1D, la variazione di energia legata a questa struttura è pari a

$$\Delta E = 2JL^{d-1} \quad (2.5)$$

L'entropia del domain wall è legata al numero di modi in cui si può costruire tale interfaccia. Per un singolo domain wall si può stimare che

$$S \gtrsim k_B \ln(L) \quad (2.6)$$

L'energia libera associata alla presenza dell'interfaccia è dunque pari a

$$A \simeq 2JL^{d-1} - k_B T \ln(L), \quad (2.7)$$

che è dominata dal termine energetico per ogni dimensione maggiore di due, dato che nel limite termodinamico il termine logaritmico è trascurabile. Per provare l'esistenza di ferromagnetismo in modo più quantitativo, basta mostrare che il valor medio dello spin sia diverso da zero. Nel caso del modello di Ising 2D è possibile mostrare che se gli spin che fanno parte della cornice esterna del retico sono positivi, la probabilità di avere uno spin negativo al centro del sistema è pari a

$$p_- < \frac{1}{2} \frac{\exp(-2\beta J)}{4(1 - 3\exp(-2\beta J))^4}. \quad (2.8)$$

Il secondo membro della relazione (2.8) può essere reso minore di $1/2$ in modo indipendente dalla dimensione del reticolo (ossia del parametro L introdotto in precedenza) scegliendo una temperatura opportuna. Questo evidenzia come possa presentarsi long range order e di conseguenza magnetizzazione finita per $0 \leq T < T_c$. Per sottolineare ulteriormente le differenze fra il modello di Ising 1D e quello bi-dimensionale consideriamo ora il mapping riportato in Figura 6, in cui i siti reticolari di un modello bi-dimensionale vengono mappati su una catena lineare (mantendo l'interazione con i primi vicini di partenza).

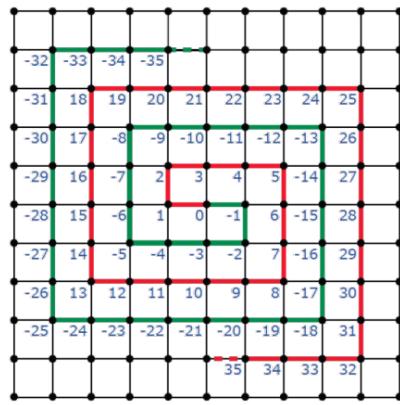


Figura 6: Mapping di un modello di Ising 2D su un modello di Ising 1D. Immagine da [1].

Sebbene si possa mappare il reticolo quadrato in una catena di spin, il motivo per cui tale reticolo lineare è ordinato a temperatura finita è da ricercare nel range dell'interazione. Nel

caso del modello di Ising 1D con interazione fra primi vicini, la stessa è short range, poichè coinvolge solamente i siti adiacenti a quello preso in considerazione. Nel caso invece di catena di spin ottenuta come risultato del mapping di un reticolo quadrato in uno lineare, l'interazione è long-range, ed a ogni nuovo cambio di direzione delle spirali concentriche con cui si visitano tutti i siti reticolari tale lunghezza d'interazione aumenta. Nel caso della catena di spin ottenuta a partire da un reticolo quadrato anche i domain walls interagiscono fra loro con un potenziale di tipo long-range, andando ad invalidare il discorso fatto in precedenza e rendendo possibile una magnetizzazione non nulla anche per una catena di spin.

2.2 Fenomeni ad invarianza di scala

La transizione di fase che avviene alla temperatura critica T_c (2.3) è una transizione di fase continua. Una delle conseguenze della criticità è la perdita di un parametro di scala, nel senso che il sistema presenta cluster di spin di tutte le dimensioni. Chiaramente nel caso di una simulazione questa distribuzione sarà influenzata dalle dimensioni finite del reticolo considerato, dato che non è computazionalmente possibile lavorare nel limite termodinamico. Inoltre al punto critico il comportamento di un sistema è solitamente indipendente dai dettagli microscopici dello stesso, in quanto è determinato da poche caratteristiche quali

- ◊ la dimensionalità d del sistema (per il modello di Ising 2D avremo $d = 2$)
- ◊ il numero di componenti n del parametro d'ordine
- ◊ il range delle interazioni microscopiche presenti fra i costituenti del sistema

Dato che il comportamento critico del sistema non ha alcuna dipendenza sui gradi di libertà microscopici dello stesso, è possibile mediante una tecnica di coarse graining rimuovere i gradi di libertà irrilevanti fino a quando si giunge alla lunghezza di correlazione. Tale metodo consiste nel dividere il reticolo in blocchi di dimensione inferiore rispetto a quella reticolare e sommare gli spin all'interno dei singoli cluster. Se il risultato dell'operazione precedente è positivo, il blocco verrà sostituito da un singolo spin orientato verso l'alto (+1), altrimenti da uno che punta verso il basso. Il modello risultante avrà di conseguenza un differente passo reticolare. Bisogna ora distinguere tre possibili scenari in base alla temperatura alla quale viene effettuata la simulazione.

2.2.1 $T < T_c$

Al di sotto della temperatura critica, il sistema è dotato di ordine a lungo raggio, ma dato che $T \neq 0$ sono presenti anche cluster di grandi dimensioni con spin orientati nella direzione opposta. Applicando in modo iterativo il metodo riportato in precedenza, la dimensione della cella unitaria aumenta e le fluttuazioni che sono di dimensione inferiore rispetto al passo reticolare scompaiono. Questo implica che il sistema diventa via via più ordinato e tende ad una configurazione con spin totalmente allineati tipica di $T = 0$. In Figura 11 è riportato un esempio di coarse graining applicato ad un reticolo di 10000×10000 spin, in cui per ogni mossa i sotto-blocchi che vengono presi in considerazione sono di dimensione 10×10 . Si può osservare che applicando iterativamente l'algoritmo, le poche eccitazioni presenti nello stato di partenza vengono eliminate, giungendo ad un modello con spin completamente allineati.

2.2.2 $T > T_c$

Al di sopra della temperatura critica, il sistema è disordinato e gli spin formano randomicamente cluster con orientazione verso l'alto oppure verso il basso. Ogni volta che viene effettuata una trasformazione, la lunghezza di correlazione diminuisce e i cluster diventano di dimensioni inferiori come se la temperatura stesse aumentando. Il sistema tende alla condizione di temperatura infinita, con cluster che coinvolgono un numero esiguo di momenti magnetici. In Figura 16 è

riportato un esempio di coarse graining applicato ad un reticolo di 10000×10000 spin, in cui per ogni mossa i sotto-blocchi che vengono presi in considerazione sono di dimensione 10×10 . Si può osservare che applicando iterativamente l'algoritmo il reticolo continua a mantenere le caratteristiche tipiche dell'alta temperatura, ossia cluster di spin di piccole dimensioni.

2.2.3 $T = T_c$

Alla temperatura critica, i cluster sono di tutte le dimensioni, partendo da singoli spin per giungere ad un numero macroscopico di momenti magnetici coinvolti. In questo caso la lunghezza di correlazione è infinita e per iterazioni successive del metodo introdotto in precedenza non si ha alcun cambio nella distribuzione delle dimensioni dei cluster. Il reticolo rimane a T_c , che risulta essere un punto fisso della funzione di coarse-graining. Chiaramente, gli altri punti fissi sono $T = 0$ e $T = \infty$ a cui tendono tutti i sistemi che non si trovano in partenza al punto critico.

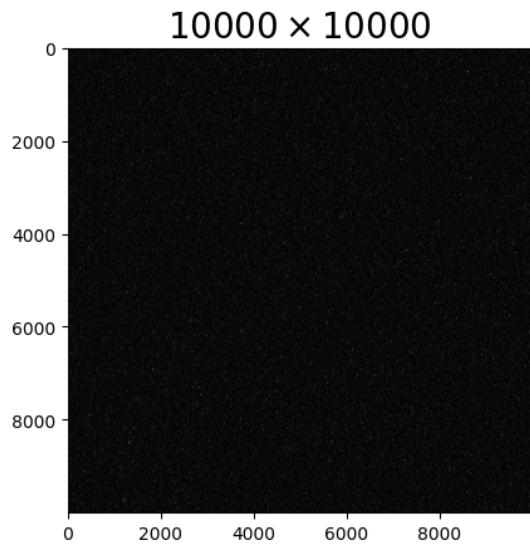


Figura 7: Stato iniziale

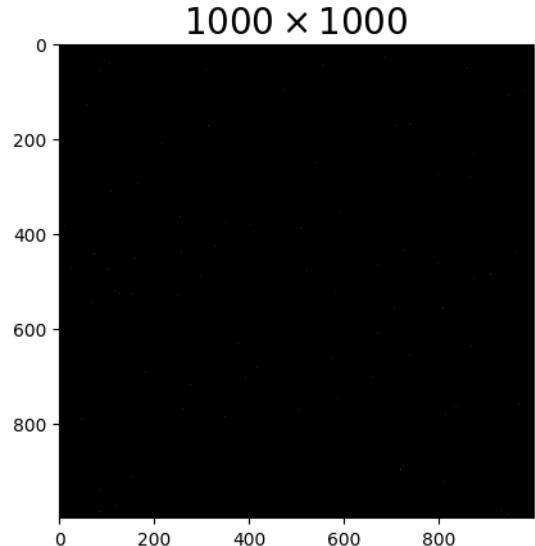


Figura 8: Prima iterazione

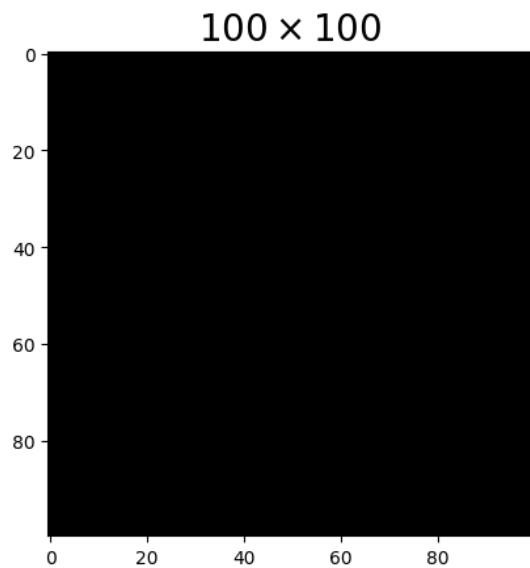


Figura 9: Seconda iterazione

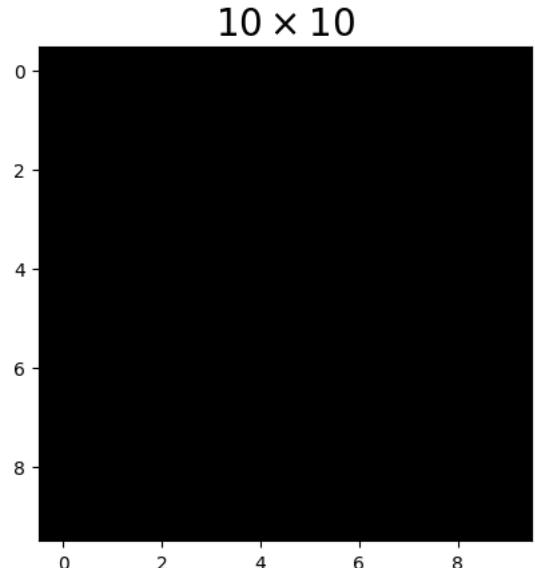


Figura 10: Terza iterazione

Figura 11: Esempio di coarse-graining per un reticolo di 10000×10000 spin in equilibrio termodinamico alla temperatura $T = 2.0$. Ogni iterazione dell'algoritmo riduce di un fattore 10 il numero degli spin costituenti i lati del quadrato.

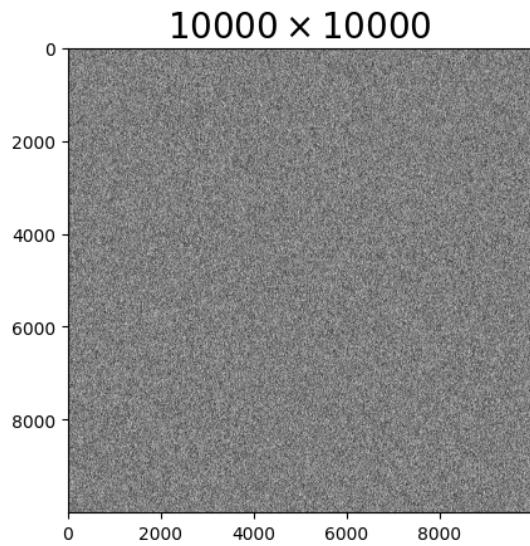


Figura 12: Stato iniziale

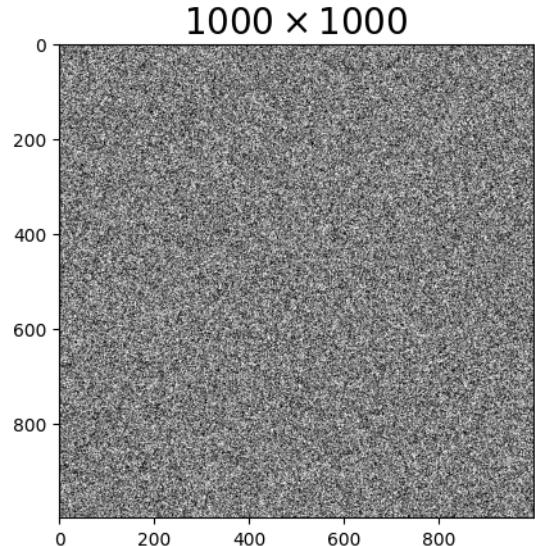


Figura 13: Prima iterazione

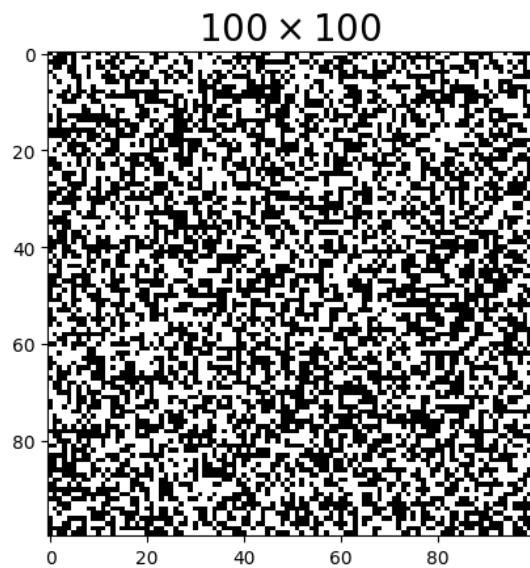


Figura 14: Seconda iterazione

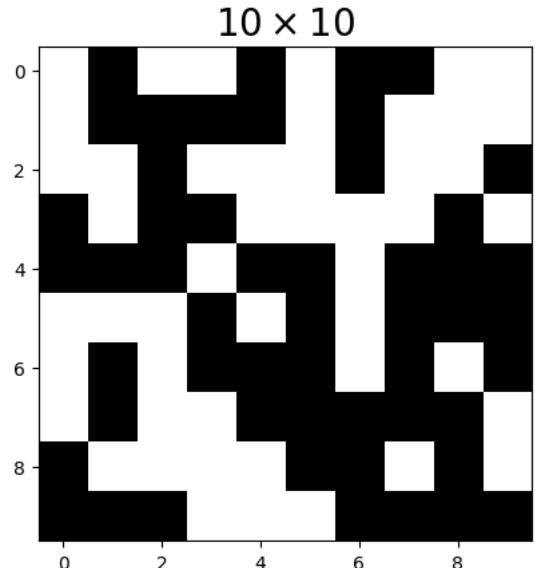


Figura 15: Terza iterazione

Figura 16: Esempio di coarse-graining per un reticolo di 10000×10000 spin in equilibrio termodinamico alla temperatura $T = 3.0$. Ogni iterazione dell'algoritmo riduce di un fattore 10 il numero degli spin costituenti i lati del quadrato.

3 Simulazioni Monte-Carlo

L'obiettivo di questa sezione è l'introduzione di tecniche Monte-Carlo che consentano di simulare un modello di Ising con numero di costituenti finito. I reticolati considerati sono dotati di condizioni periodiche al contorno, in modo tale che gli spin posti agli estremi interagiscano fra loro come primi vicini. Dato che in questo modo tutti gli spin sono equivalenti fra loro ed il sistema è invariante per traslazioni, stiamo in pratica simulando un sistema infinito, con un conseguente netto miglioramento nella qualità dei risultati.

3.1 Generatore di numeri casuali

Dato che i metodi Monte-Carlo sono una classe di algoritmi numerici che si basano sull'utilizzo di numeri pseudo-casuali, è auspicabile lavorare con un generatore dotato di un lungo periodo di generazione. Inoltre il generatore deve essere efficiente, in modo da mantenere contenute le tempistiche computazionali. Le simulazioni che hanno portato ai risultati presenti in questa dispensa sono state effettuate con un generatore della famiglia PCG [4], di cui è riportata l'implementazione. Il linguaggio utilizzato è il Nim, che compila direttamente in codice macchina (alte prestazioni), ma presenta una sintassi molto semplice, che ricorda quella del Python.

```

type
    PCG* = tuple[state, incr: uint64] ##|
        ## The `PCG` type represents the state of a Permuted Congruential
        ## Generator (PCG), a family of simple fast space-efficient statistically
        ## good algorithms for random number generation.

    RandomSetUp* = tuple[inState, inSeq: uint64] ##|
        ## The `RandomSetUp` type is used to initialize a `PCG` generator.

proc random*(gen: var PCG): uint64 =
    ## Get a random uint64 from a `PCG`.

    var
        oldstate = gen.state
        xorshift = uint32(((oldstate shr 18) xor oldstate) shr 27)
        rot = int32(oldstate shr 59)

        gen.state = oldstate * uint64(6364136223846793005) + gen.incr
        result = ((xorshift shr rot) or (xorshift shl ((-rot) and 31)))

proc newRandomSetUp*(rg: var PCG): RandomSetUp {.inline.} =
    ## Create a new `RandomSetUp` from a `PCG`.
    (rg.random, rg.random)

proc newPCG*(setUp: RandomSetUp): PCG =
    ## Create a new `PCG` with the given `RandomSetUp`.

    (result.state, result.incr) = (0.uint64, (setUp.inSeq shl 1) or 1)
    discard result.random
    result.state += setUp.inState
    discard result.random

proc rand*(pcg: var PCG): float32 =

```

```

## Get a random float32 uniformly distributed over the interval (0, 1)
pcg.random.float32 / 0xffffffff.float32

proc rand*(pcg: var PCG; a, b: float32): float32 =
    ## Get a random float32 uniformly distributed over the interval (a, b)
    a + pcg.rand * (b - a)

```

I numeri pseudo-casuali vengono generati lavorando con interi senza segno, che consentono di fare operazioni fra bit molto efficienti. La corretta implementazione è stata testata imponendo un particolare RandomSetUp e valutando la sequenza generata.

3.2 Inizializzazione

Il primo step della simulazione consiste nel definire una condizione iniziale. Solitamente le scelte più comuni sono la configurazione a temperatura nulla (con tutti gli spin allineati) oppure quella a temperatura infinita (con momenti magnetici orientati casualmente). Chiaramente tale condizione iniziale non è all'equilibrio per la temperatura alla quale si vuole simulare il sistema. Sarà necessaria una fase di termalizzazione in cui il reticolo si rilassa fino a giungere all'equilibrio termodinamico, dopo la quale sarà poi possibile iniziare a misurare le osservabili di nostro interesse. Per procedere nello studio del modello è quindi necessario introdurre dei metodi che consentano di generare una nuova configurazione e quindi di evolvere il sistema. Le simulazioni riportate in questa dispensa hanno fatto uso dell'*algoritmo di Metropolis* e dell'*algoritmo di Wolff*.

3.3 Algoritmo di Metropolis

Una mossa dell'algoritmo di Metropolis consiste nel selezionare casualmente uno spin del reticolo con l'obiettivo di generare una nuova configurazione invertendolo. La differenza in energia fra lo stato di partenza e quello di arrivo determina la probabilità d'accettazione della mossa, dato che per l'*algoritmo di Metropolis* [3] si ha che

$$A(\nu | \mu) = \min \left[1, e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \right] \quad (3.1)$$

Chiaramente se la configurazione ν ha energia inferiore di quella μ , la mossa viene sempre accettata. In caso contrario, è possibile che lo spin non venga invertito e che il nuovo elemento della catena di Markov generata dall'algoritmo di Metropolis sia identico a quello precedente. Eseguire N_{spin} volte il ciclo precedente, ossia tentare in media un'inversione per spin, equivale ad aver completato uno *sweep* del reticolo. Per le successive fasi conviene studiare le osservabili del sistema in funzione degli sweep e non delle singole mosse dell'algoritmo di Metropolis: per questo motivo le implementazioni dell'algoritmo riportato in seguito eseguono uno sweep a chiamata, ossia tentano ogni volta N_{spin} inversione. Anche in questo caso il codice riportato è in Nim.

3.3.1 Metropolis Ising 1D

```

proc metropolisMove*(modIsing: var seq[int], rg: var PCG, temp: float32, acc:
    float32, hmagn: float32, accettate: var int) =
    # Algoritmo di Metropolis per evolvere il modello di Ising

    # Indice per selezionare lo spin
    var
        diffE: float32
        ind, prev, next, appo: int

```

```

for i in 0..<len(modIsing):
    ind = int(rg.rand(float32(0), float32(len(modIsing)))) mod len(modIsing)
    prev = if (ind - 1) mod len(modIsing) == -1: len(modIsing)-1 else: (ind - 1)
→ mod len(modIsing)
    next = (ind + 1) mod len(modIsing)

    appo = modIsing[ind]
    diffE = 2 * acc * float32(appo) * float32(modIsing[prev] + modIsing[next]) +
→ 2 * hmagn * float32(appo)

    if diffE < 0:
        modIsing[ind] = -appo
        accettate += 1

    elif rg.rand() < exp(-diffE/temp):
        modIsing[ind] = -appo
        accettate += 1

```

3.3.2 Metropolis Ising 2D

```

proc metropolisMove*(modIsing: var seq[seq[int]], rg: var PCG, temp: float32,
→ acc: float32, nspin: int, accettate: var int) =
# Algoritmo di Metropolis per evolvere il modello di Ising 2D

# Indice per selezionare lo spin
var
    nmove = int(nspin * nspin)
    diffE: float32
    xcoor, ycoor, appo: int
    up, down, left, right: int

for i in 0..<nmove:

    # Seleziona casualmente uno spin facente parte del modello
    xcoor = int(floor(rg.rand(float32(0), float32(nspin)))) mod nspin
    ycoor = int(floor(rg.rand(float32(0), float32(nspin)))) mod nspin

    # Determino quali sono i primi vicini in questo caso (facendo attenzione a
→ bc)
    down = (ycoor + 1) mod nspin
    right = (xcoor + 1) mod nspin
    up = (ycoor - 1 + nspin) mod nspin
    left = (xcoor - 1 + nspin) mod nspin

    # Calcolo i contributi energetici
    appo = modIsing[xcoor][ycoor]
    diffE = 2 * acc * float32(appo) * float32((modIsing[right][ycoor] +
→ modIsing[left][ycoor] + modIsing[xcoor][up] + modIsing[xcoor][down]))

    if diffE < 0:
        modIsing[xcoor][ycoor] = -appo
        accettate += 1

    elif rg.rand() < exp(-diffE/temp):

```

```
modIsing[xcoor][ycoor] = -appo
accettate += 1
```

L'unica differenza fra le due implementazioni riportate in precedenza è la gestione delle condizioni al contorno, chiaramente più complessa in due dimensioni dato che il numero di primi vicini duplica, passando da due a quattro. La struttura in sè dell'algoritmo rimane la stessa.

3.4 Termalizzazione

Una simulazione Monte-Carlo è detta all'equilibrio nel momento in cui viene correttamente campionato il peso statistico di Boltzmann $p(\mu)$. Se il sistema viene inizializzato in uno dei due stati presentati in precedenza, ossia quello a temperatura nulla (con spin paralleli) oppure a T infinita (con spin orientati casualmente up oppure down) e si vuole performare una simulazione a temperatura finita, sarà necessario del tempo computazionale prima che venga raggiunto l'equilibrio, poichè sarà necessario accettare alcune mosse.

Un modo qualitativo per valutare la durata della termalizzazione consiste nel graficare una quantità d'interesse, come può essere la magnetizzazione oppure l'energia interna del sistema. Tali osservabili presenteranno una fase di transitorio iniziale in cui il sistema si scorrela dalla condizione iniziale, per poi fluttuare attorno ad un valore pressochè costante. Non è sempre garantito che si raggiunga l'equilibrio, in quanto è possibile rimanere bloccati in uno stato metastabile per tempistiche computazionali relativamente lunghe. Per evitare di valutare in maniera errata la durata della fase di termalizzazione è consigliabile eseguire lo stesso processo per diverse condizioni iniziali e per diversi seed del generatore di numeri casuali, in modo da considerare diverse traiettorie nello spazio delle fasi. In Figura ?? è riportato la termalizzazione di un modello di Ising 1D da 3000 spin a temperatura $T = 0.5$: in questo caso dopo circa 500 sweep della catena viene raggiunto l'equilibrio termodinamico.

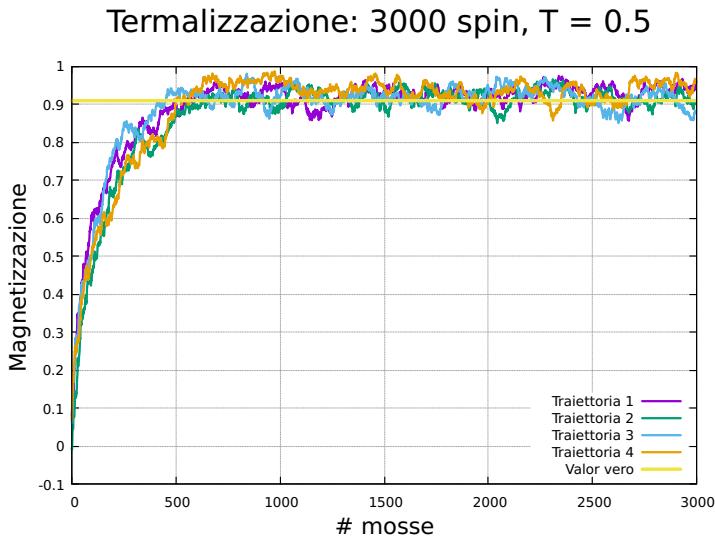


Figura 17: Termalizzazione per un modello di Ising 1D da 3000 spin a temperatura $T = 0.5$

3.5 Autocorrelazione

Una volta che il sistema ha raggiunto l'equilibrio, è possibile misurare le osservabili d'interesse senza che i valori d'aspettazione siano influenzati dalla fase di transitorio. Per valutare la durata minima della simulazione che consenta di ottenere delle stime statisticamente significative è necessaria una misura del tempo di correlazione t_c , che esplicita quale sia il numero di sweep da effettuare per passare da uno stato ad un altro significativamente differente da quello di partenza.

Il modo migliore per calcolare t_c consiste nello sfruttare la funzione di autocorrelazione temporale, definita per la magnetizzazione come

$$\chi(t) = \frac{\langle m(t') m(t' + t) \rangle_{t'} - \langle m \rangle^2}{\sigma_m^2} \quad (3.2)$$

L'autocorrelazione solitamente presenta una caduta esponenziale con tempo caratteristico pari a quello di correlazione

$$\chi(t) \sim e^{-t/t_c}. \quad (3.3)$$

Se si considerano due campioni presi ad un t_c di distanza, la funzione di autocorrelazione assume in presenza di un tale intervallo temporale un valore di $1/e$, ancora particolarmente significativo. Se si vuole lavorare con quantità realmente indipendenti è necessario campionare a $t > t_c$; solitamente si impone $t = 2t_c$ in modo che il numero di misure significative in una simulazione di durata t_{max} sia pari a

$$n = \frac{t_{max}}{2t_c}. \quad (3.4)$$

In Figura 18 è riportato un esempio di calcolo della funzione di autocorrelazione per un reticolo di spin 500×500 a temperatura pari a due. In questo caso specifico i valori della magnetizzazione sono scorrelati dopo circa 50 sweeps.

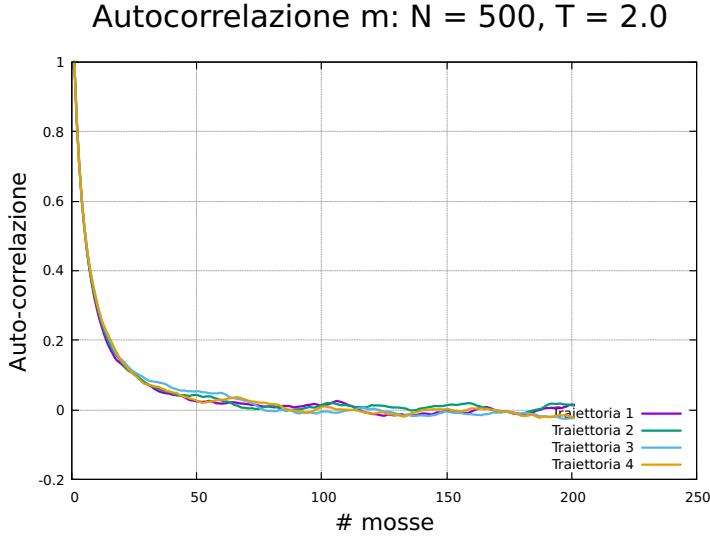


Figura 18: Autocorrelazione per un modello di Ising 2D di dimensione 500×500 a temperatura $T = 2.0$

3.6 Data-blocking

Per evitare bias nel campionamento e per ottenere dei valori d'aspettazione adeguati è possibile utilizzare la tecnica del data-blocking. Le misure delle osservabili di interesse effettuate durante la simulazione, a distanze temporali inferiori del tempo di correlazione, vengono divise in gruppi, per ciascuno dei quali viene calcolato il valor medio. La dispersione di questi valori medi fornisce una stima dell'errore associato alla grandezza calcolata. In Figura 19 è presentata visivamente la tecnica del data-blocking. Le quantità g_i sono le medie di ciascun gruppo.

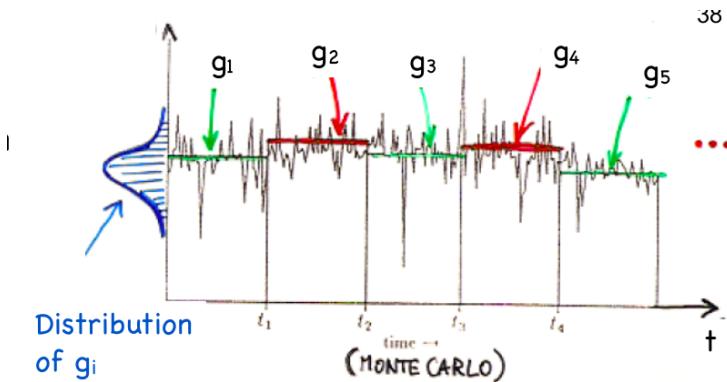


Figura 19: Esempio di applicazione della tecnica del data-blocking. Immagine da [2].

Per determinare quale sia la lunghezza dei blocchi tale da garantire che le medie siano statisticamente indipendenti, si può sfruttare il teorema del limite centrale. Nel momento in cui si aumenta la lunghezza dei blocchi, l'errore calcolabile come

$$\sigma_{\langle g \rangle} = \sqrt{\frac{1}{N-1} (\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2)} \quad (3.5)$$

tende a quello puramente statistico (poichè si va a perdere la correlazione fra le stime) ed oltre una certa lunghezza L dei blocchi satura ad un valore costante. La lunghezza di saturazione è la minima accettabile per produrre delle stime adeguate. Chiaramente maggiore è il numero di blocchi (della corretta dimensione), migliore sarà la stima finale della osservabile d'interesse. In Figura 20 è riportato un esempio di stima della dimensione dei blocchi per un reticolo di spin 500×500 a temperatura pari a due. In questo caso specifico possiamo lavorare con blocchi di lunghezza 150 sweeps.

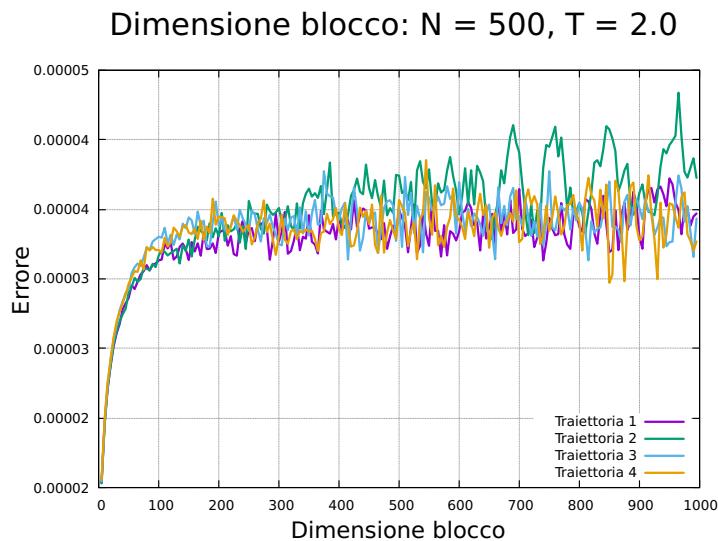


Figura 20: Studio delle dimensioni dei blocchi per un modello di Ising 2D di dimensione 500×500 a temperatura $T = 2.0$

3.7 Algoritmo di Wolff

L'algoritmo di Metropolis, anche grazie alla sua semplicità, è il più performante al di fuori della regione critica. Tuttavia, quando la temperatura del sistema tende a T_c , gli spin tendono a raggrupparsi in grandi cluster che contribuiscono significativamente alla magnetizzazione ed all'energia, e nel momento in cui cambia l'orientamento degli spin si producono grandi fluttuazioni,

note come *fluttuazioni critiche*. Questo aspetto, insito nella natura del modello di Ising, comporta un aumento dell'errore statistico associato ai valori d'aspettazione degli osservabili, ma è indipendente dall'algoritmo considerato. Un secondo aspetto è legato all'aumento della lunghezza di correlazione ξ , che nel limite termodinamico diverge alla temperatura critica. Sappiamo che ξ è legato al tempo di correlazione dalla relazione

$$\tau \propto \xi^z \quad (3.6)$$

Maggiore è z , peggio l'algoritmo riesce a generare configurazioni indipendenti fra loro. Per Metropolis, il valore universalmente riconosciuto per l'esponente è $z = 2.1665 \pm 0.0012$, che è piuttosto alto [5]. Al punto critico, l'algoritmo di Metropolis è vittima di *critical slowing down*, dovuto al fatto che è un algoritmo locale (tenta di invertire uno spin alla volta) e quindi non riesce a far fronte all'aumento incontrollato della lunghezza di correlazione. Un modo per cercare di ridurre il valore di z è quello di lavorare su cluster di spin, in modo tale da invertire contemporaneamente un numero maggiore di spin. L'algoritmo di Wolff, che nelle simulazioni qui riportate è stato utilizzato per studiare il punto critico del modello di Ising 2D, sfrutta questa idea e per questo motivo fa parte della famiglia degli *algoritmi di clustering*. Uno dei punti cruciali dell'algoritmo consiste nell'identificazione del cluster di spin da invertire. La dimensione del blocco dovrebbe dipendere dalla temperatura a cui stiamo simulando il modello, perché per esempio per $T \gg T_c$ gli spin tendono ad essere fra loro scorrelati, evidenziando come dovrebbero essere considerati solo pochi momenti magnetici alla volta. L'opposto si può dire del caso a bassa temperatura. Per questo motivo nel momento in cui due spin adiacenti hanno lo stesso orientamento non è automatico che essi appartengano allo stesso cluster, ma è presente una certa probabilità di aggiunta che aumenta al diminuire della temperatura. Nel caso dell'algoritmo di Wolff, tale probabilità è pari a

$$P_{add} = 1 - \exp(-2\beta J) \quad (3.7)$$

L'algoritmo nella sua interezza è costituito dai seguenti passi:

- ◊ si seleziona casualmente uno spin facente parte del reticolo
- ◊ si prendono in considerazione i primi vicini di quello spin. Se essi sono rivolti nella stessa direzione dello spin selezionato in partenza, aggiungerli al cluster con probabilità data da (3.7)
- ◊ per ogni spin che è stato aggiunto allo step precedente, si considerano i primi vicini e si procede con la stessa metodologia. Si continua fino a quando tutti i primi vicini degli spin facenti parte il cluster sono stati presi in considerazione per una possibile inclusione.
- ◊ si invertono tutti gli spin che costituiscono il cluster. Questo processo avviene con probabilità uno, ossia viene sempre effettuato.

Questo algoritmo rispetta sia il bilancio dettagliato che l'ergodicità. La sua particolarità di lavorare su più spin alla volta consente di ridurre l'esponente z di un fattore 10, dato che per il modello di Ising 2D è pari a $z = 0.25 \pm 0.01$ [5].

```
proc wolffMove*(modIsing: var seq[seq[int]], rg: var PCG, temp: float32, acc:
    ↳ float32, nspin: int): int =
# Algoritmo di Wolff per evolvere il modello di Ising 2D

var
    test: IsingCoord
    clusterSize:int = 1
    stack: seq[IsingCoord] = @[]
```

```

padd = 1 - exp(-2*acc/temp)

# Genero casualmente una coordinata appartendente al reticolo (sarà lo spin
→ casuale)
randSpin = rg.newRandomCoord(nspin)

# Valuto le coordinate dei primi vicini
upNeigh = newCoord(randSpin.xcoor, (randSpin.ycoor + 1) mod nspin)
downNeigh = newCoord(randSpin.xcoor, (randSpin.ycoor + nspin - 1) mod nspin)
leftNeigh = newCoord((randSpin.xcoor + 1) mod nspin, randSpin.ycoor)
rightNeigh = newCoord((randSpin.xcoor + nspin - 1) mod nspin, randSpin.ycoor)

# Aggiungo i primi vicini alla stack
stack.add(upNeigh); stack.add(downNeigh); stack.add(leftNeigh); stack.add(rightNeigh)

# Cambio l'orientazione dello spin (per evitare se ho già incluso o meno uno spin nel
→ cluster)
modIsing[randSpin.xcoor][randSpin.ycoor] = - modIsing[randSpin.xcoor][randSpin.ycoor]

# Continuo fino a quando non ho controllato tutte le possibilità
while stack.len() > 0:
    test = stack.pop

    # Controllo se per caso ha lo stesso orientamento dello spin di partenza (quindi
→ opposto una
    # volta effettuato il flip)
    if modIsing[test.xcoor][test.ycoor] != modIsing[randSpin.xcoor][randSpin.ycoor]:

        # Valuto se ha senso aggiungere o meno lo spin (ho una certa probabilità
→ d'accettazione)
        if rg.rand() < padd:

            # Aggiungo lo spin nel cluster e inverto lo spin
            clusterSize += 1
            modIsing[test.xcoor][test.ycoor] = - modIsing[test.xcoor][test.ycoor]

            # Valuto quali siano i primi vicini e aggiungo nella stack
            upNeigh = newCoord(test.xcoor, (test.ycoor + 1) mod nspin);
→ stack.add(upNeigh)
            downNeigh = newCoord(test.xcoor, (test.ycoor + nspin - 1) mod nspin);
→ stack.add(downNeigh)
            leftNeigh = newCoord((test.xcoor + 1) mod nspin, test.ycoor);
→ stack.add(leftNeigh)
            rightNeigh = newCoord((test.xcoor + nspin - 1) mod nspin, test.ycoor);
→ stack.add(rightNeigh)

return clusterSize

```

4 Simulazioni modello di Ising 1D

Sono state simulate catene di spin sia in assenza che in presenza di campo magnetico. Nelle seguenti sezioni è possibile consultare i risultati ottenuti in entrambe le casistiche.

4.1 Simulazioni con campo magnetico $h = 0.02$

La prima fase della simulazione del modello di Ising 1D è incentrata sulla determinazione dei parametri ottimali per ottenere dei valori d'aspettazione statisticamente rilevanti, in modo tale da poter effettuare il confronto con il valor vero noto in letteratura. In questa fase preliminare ho lavorato con quattro lunghezze $l \in \{1000, 3000, 6000, 10000\}$ del modello di Ising 1D e le quattro temperature $T \in \{0.5, 1.0, 1.5, 2.0\}$. Per ognuna di queste coppie dimensione-temperatura ho considerato quattro seed differenti del generatore di numeri casuali in modo da poter analizzare il comportamento del sistema lungo differenti traiettorie nello spazio delle fasi.

4.1.1 Termalizzazione

La lunghezza della fase di termalizzazione dipende fortemente dal valore della temperatura a cui viene svolta la simulazione, come è possibile osservare nelle seguenti Figure in cui sono riportati i risultati ottenuti raggruppati per lunghezza della catena di spin. La durata maggiore della termalizzazione si ha per la temperatura inferiore, ossia $T = 0.5$, poiché per giungere ad una configurazione ordinata (come evidente dal valore della magnetizzazione tendente ad uno) è necessario un tempo computazionale maggiore legato alla necessità di orientare tutti gli spin in modo coerente.

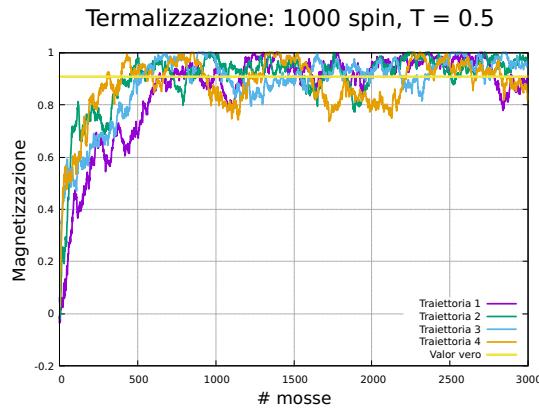
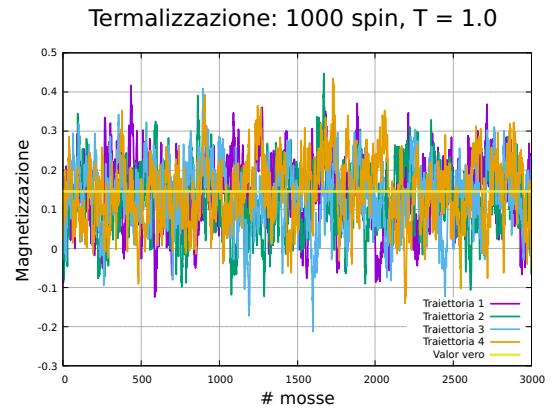
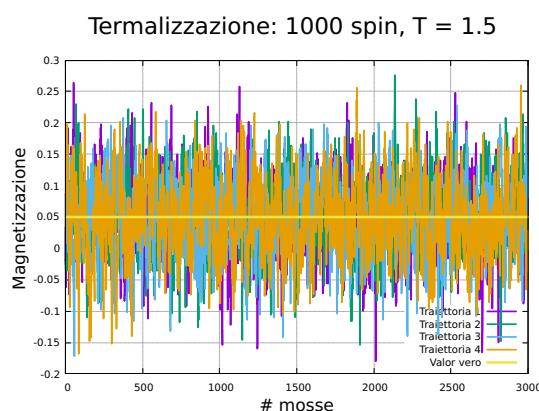
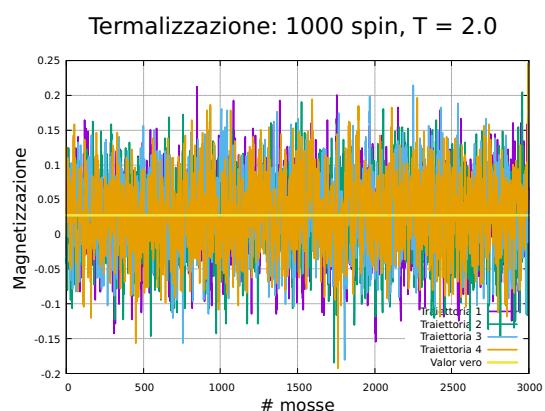
Figura 21: $T = 0.5$ Figura 22: $T = 1.0$ Figura 23: $T = 1.5$ Figura 24: $T = 2.0$

Figura 25: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 1D costituito da 1000 spin.

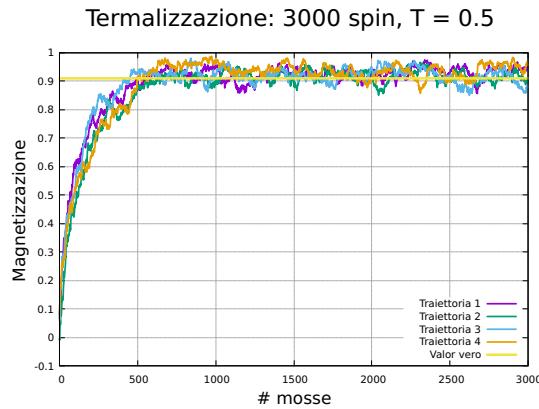
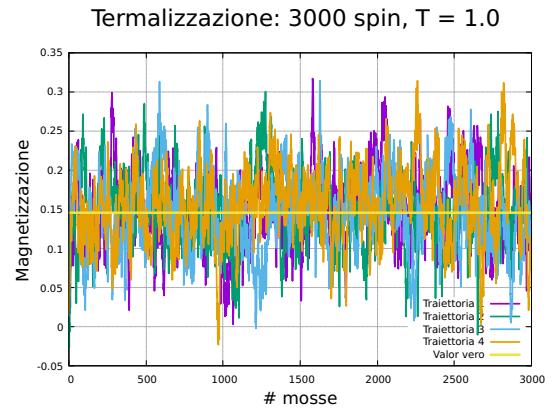
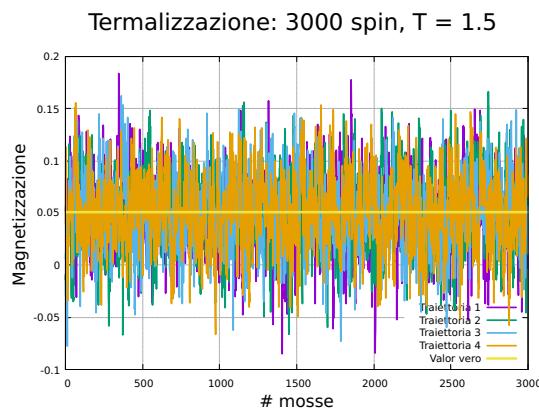
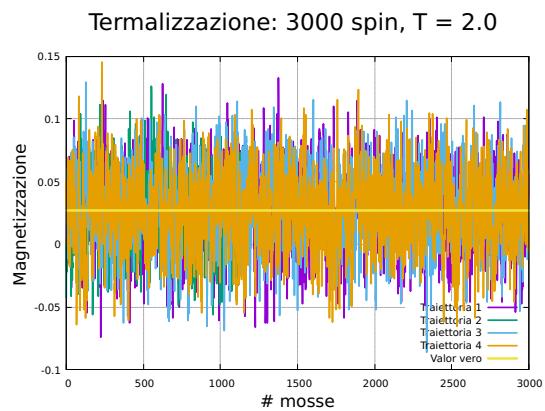
Figura 26: $T = 0.5$ Figura 27: $T = 1.0$ Figura 28: $T = 1.5$ Figura 29: $T = 2.0$

Figura 30: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 1D costituito da 3000 spin.

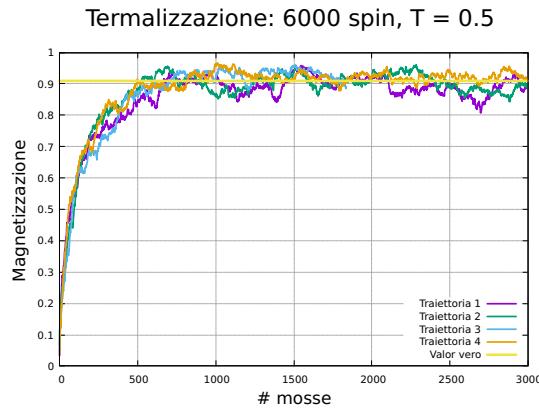
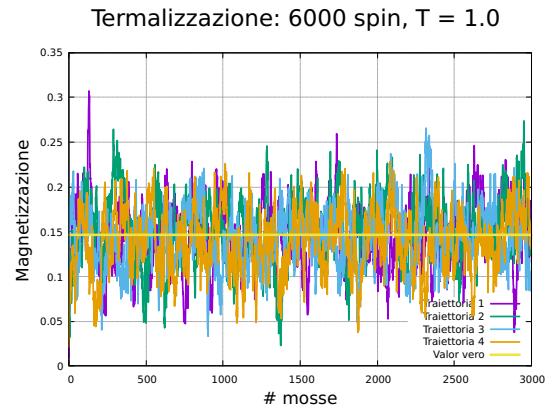
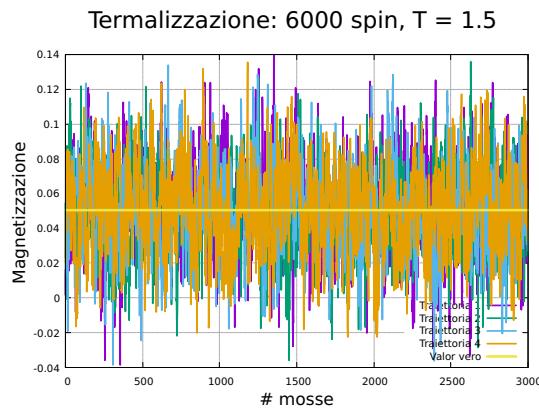
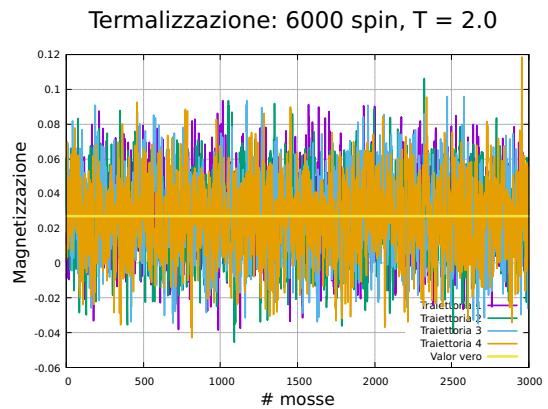
Figura 31: $T = 0.5$ Figura 32: $T = 1.0$ Figura 33: $T = 1.5$ Figura 34: $T = 2.0$

Figura 35: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 1D costituito da 6000 spin.

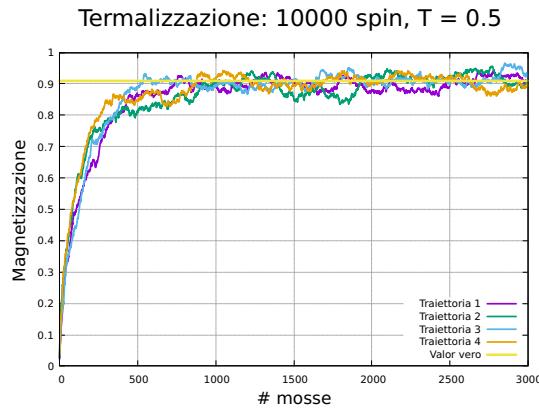
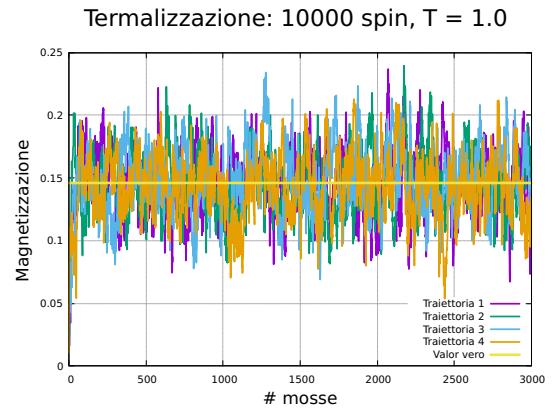
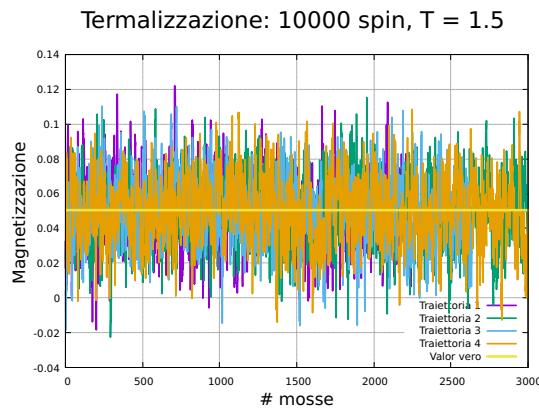
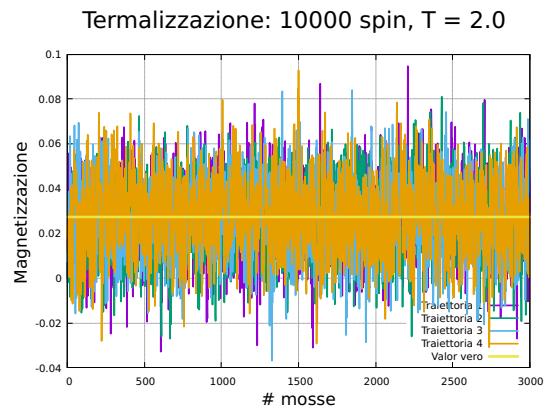
Figura 36: $T = 0.5$ Figura 37: $T = 1.0$ Figura 38: $T = 1.5$ Figura 39: $T = 2.0$

Figura 40: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 1D costituito da 10000 spin.

4.1.2 Auto-correlazione

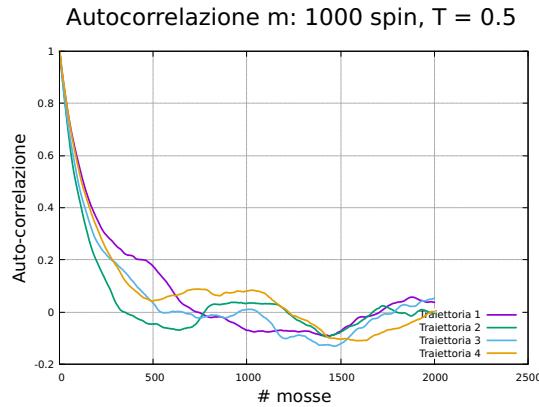
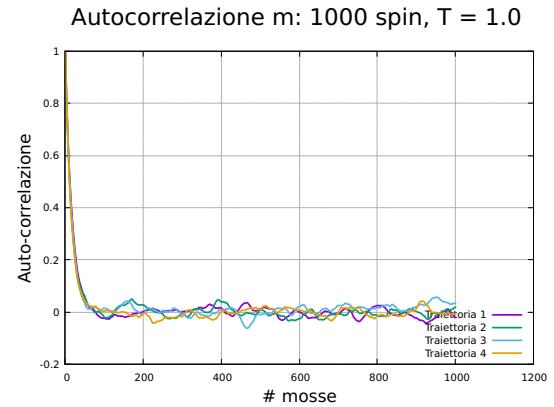
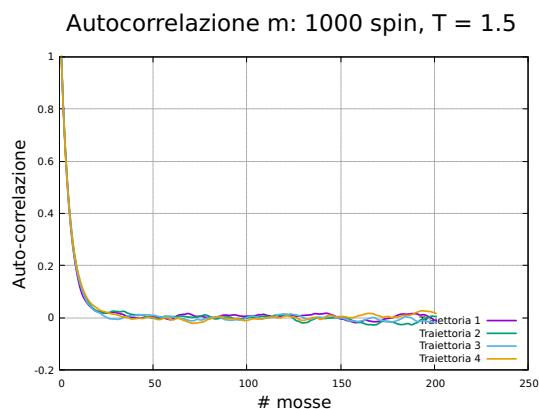
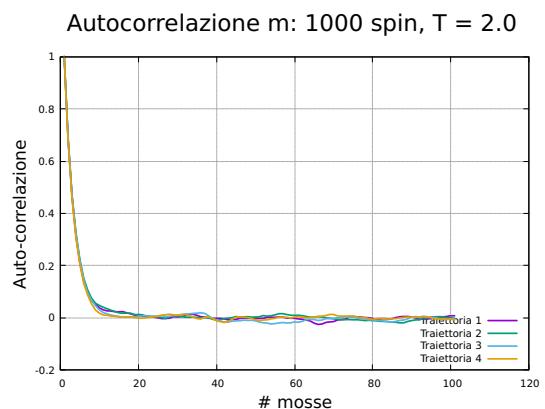
Figura 41: $T = 0.5$ Figura 42: $T = 1.0$ Figura 43: $T = 1.5$ Figura 44: $T = 2.0$

Figura 45: Studio dell'auto-correlazione per un modello di Ising 1D costituito da 1000 spin.

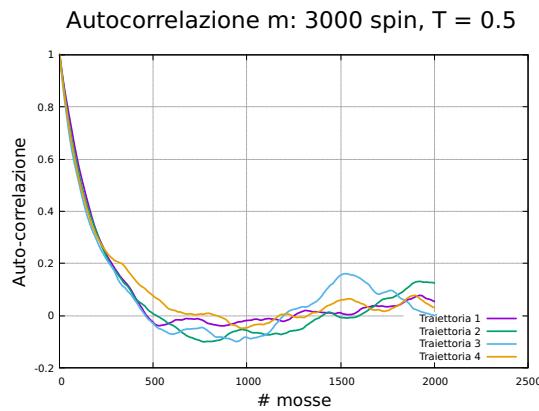
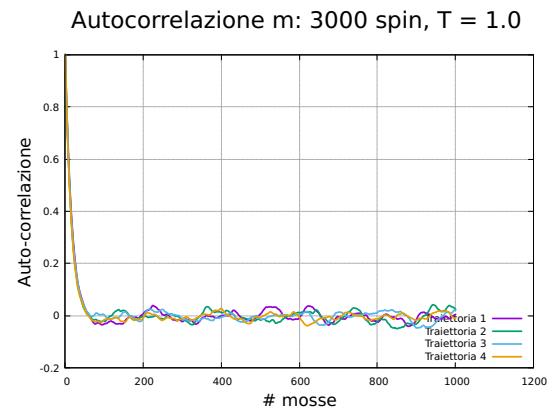
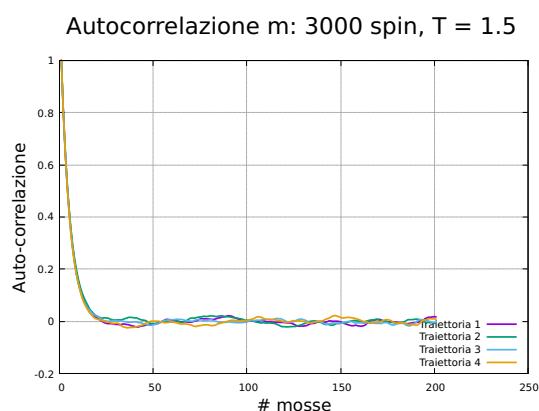
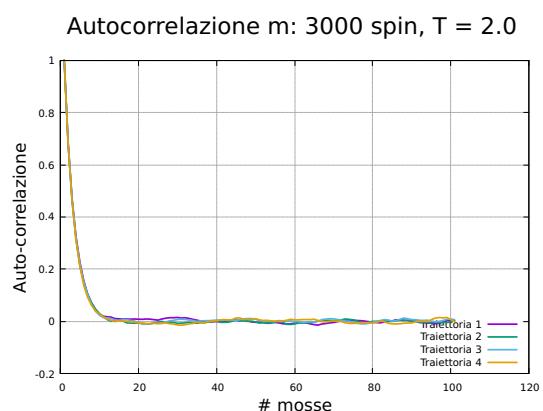
Figura 46: $T = 0.5$ Figura 47: $T = 1.0$ Figura 48: $T = 1.5$ Figura 49: $T = 2.0$

Figura 50: Studio dell'auto-correlazione per un modello di Ising 1D costituito da 3000 spin.

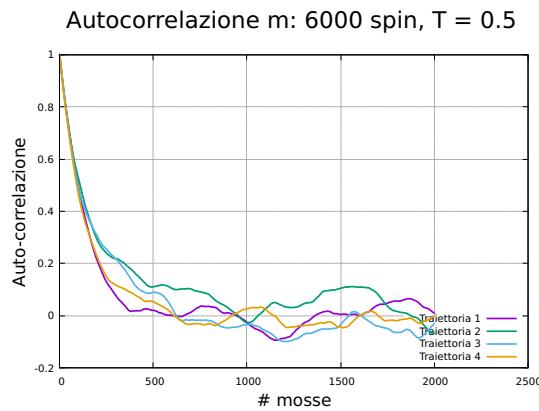
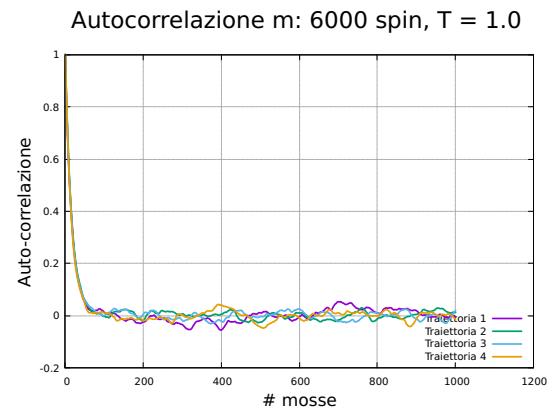
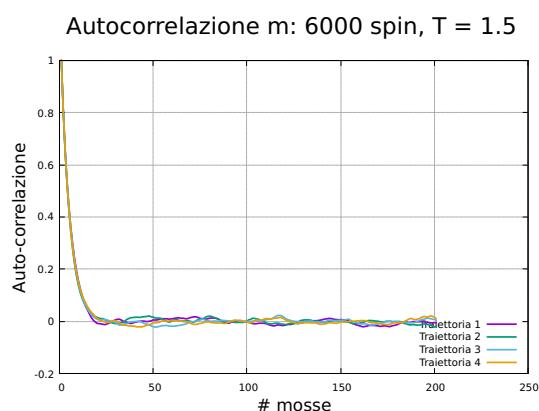
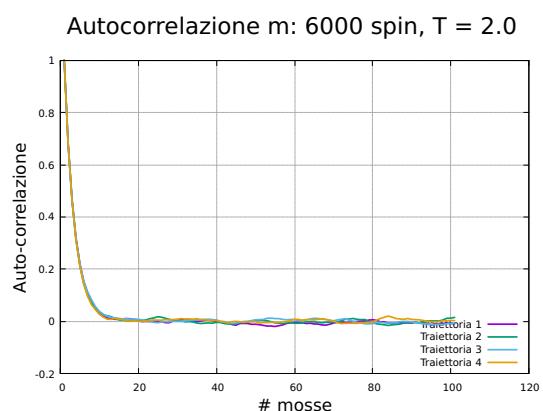
Figura 51: $T = 0.5$ Figura 52: $T = 1.0$ Figura 53: $T = 1.5$ Figura 54: $T = 2.0$

Figura 55: Studio dell'auto-correlazione per un modello di Ising 1D costituito da 6000 spin.

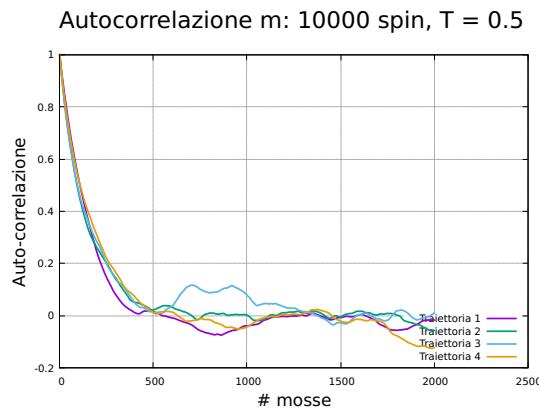
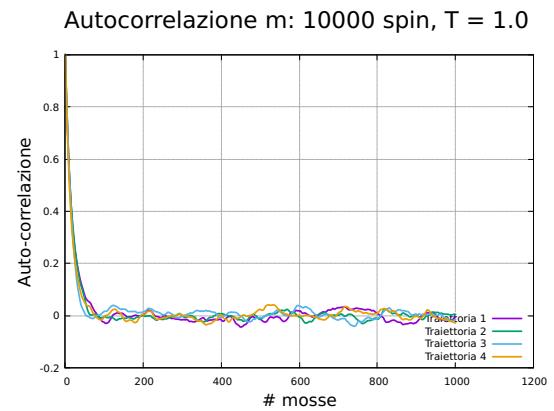
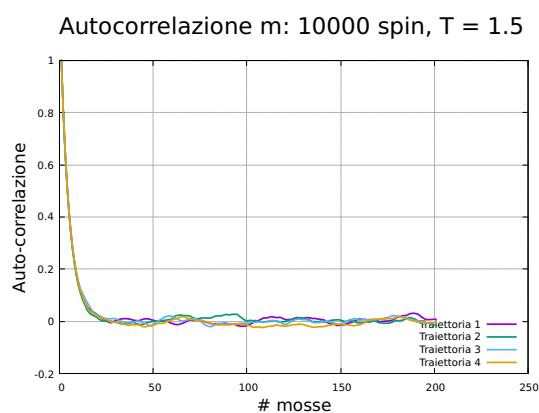
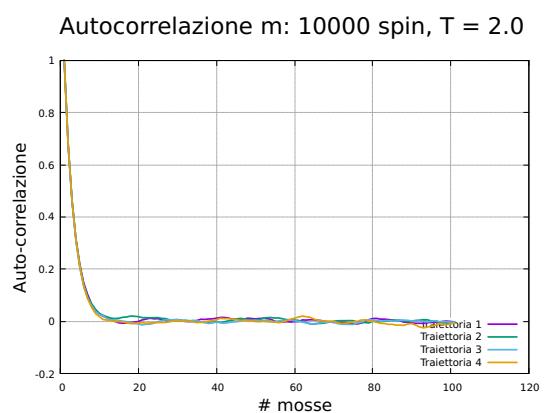
Figura 56: $T = 0.5$ Figura 57: $T = 1.0$ Figura 58: $T = 1.5$ Figura 59: $T = 2.0$

Figura 60: Studio dell'auto-correlazione per un modello di Ising 1D costituito da 10000 spin.

4.1.3 Dimensione dei blocchi

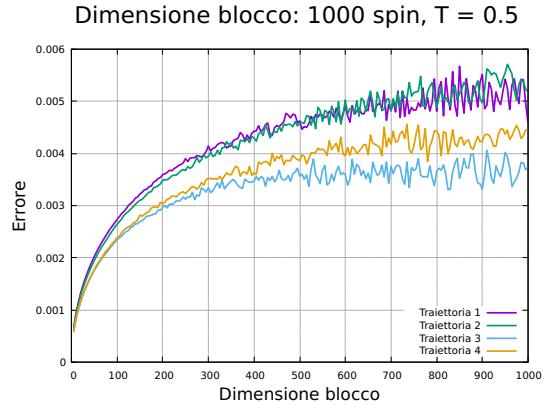
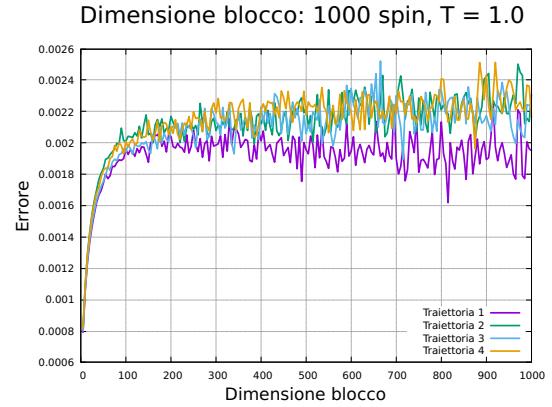
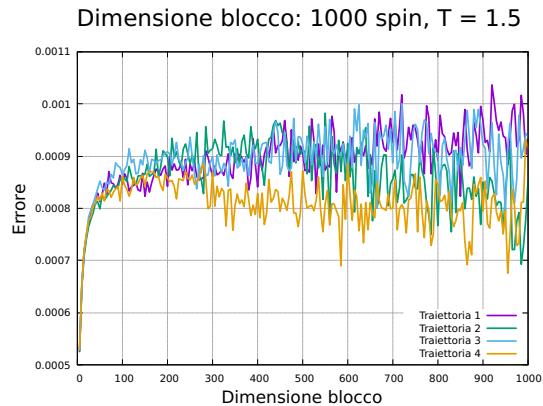
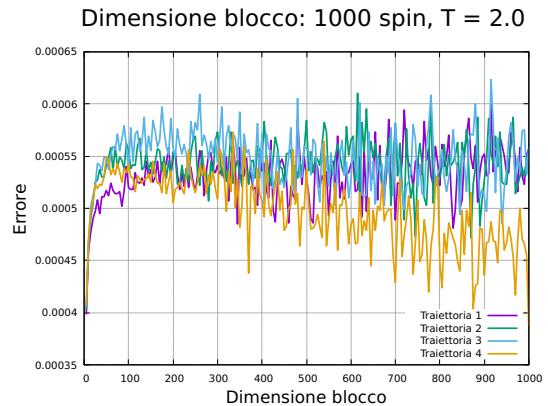
Figura 61: $T = 0.5$ Figura 62: $T = 1.0$ Figura 63: $T = 1.5$ Figura 64: $T = 2.0$

Figura 65: Errore in funzione della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 1D costituito da 1000 spin.

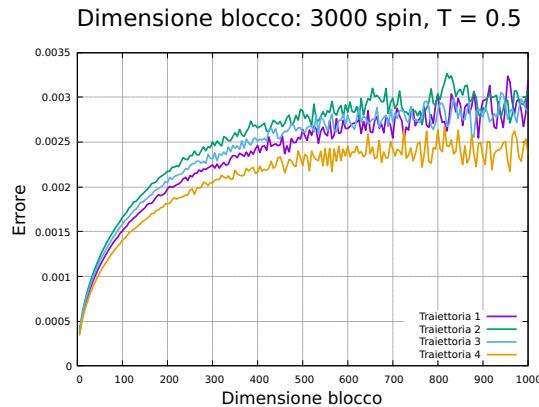
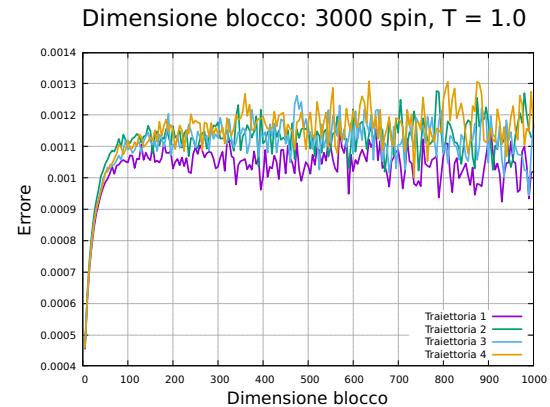
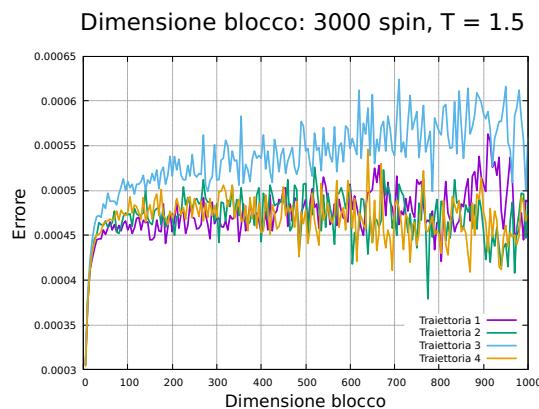
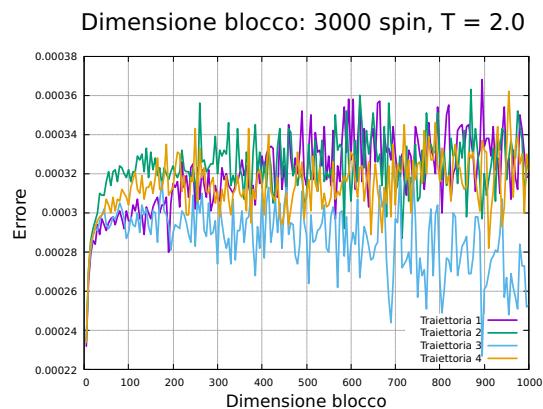
Figura 66: $T = 0.5$ Figura 67: $T = 1.0$ Figura 68: $T = 1.5$ Figura 69: $T = 2.0$

Figura 70: Errore in funzione della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 1D costituito da 3000 spin.

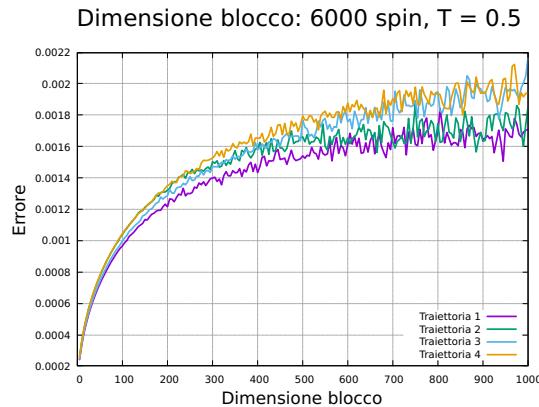
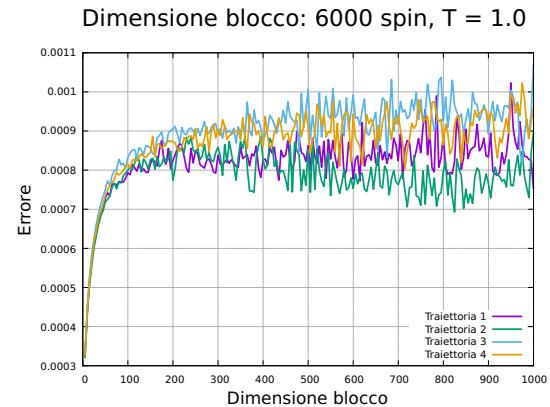
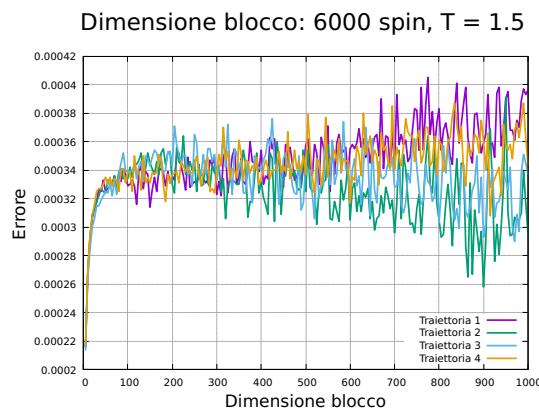
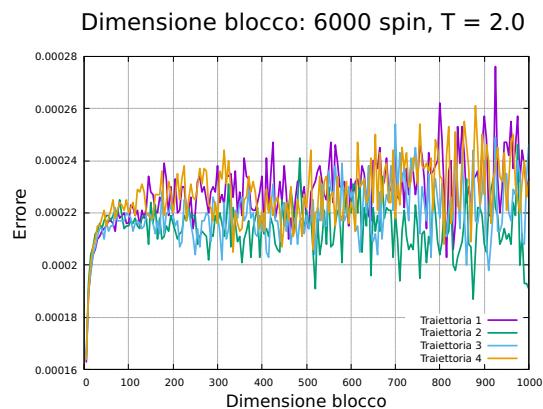
Figura 71: $T = 0.5$ Figura 72: $T = 1.0$ Figura 73: $T = 1.5$ Figura 74: $T = 2.0$

Figura 75: Errore in funzione della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 1D costituito da 6000 spin.

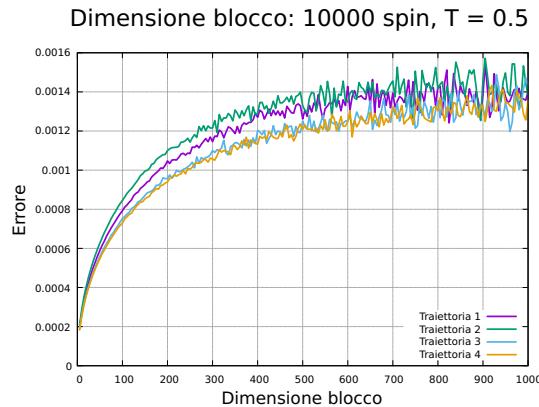
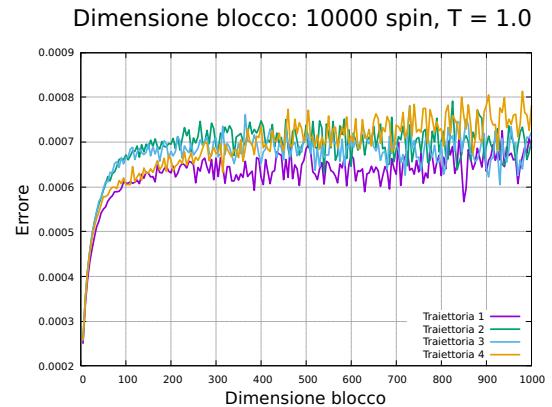
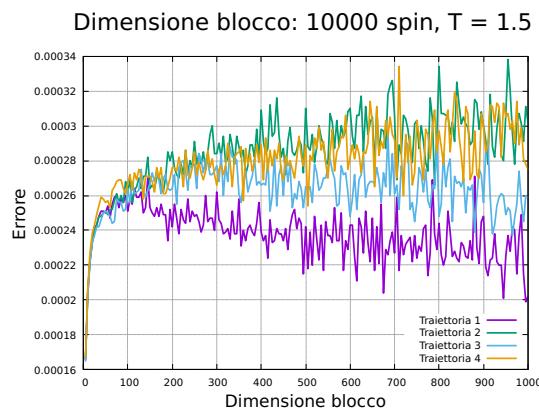
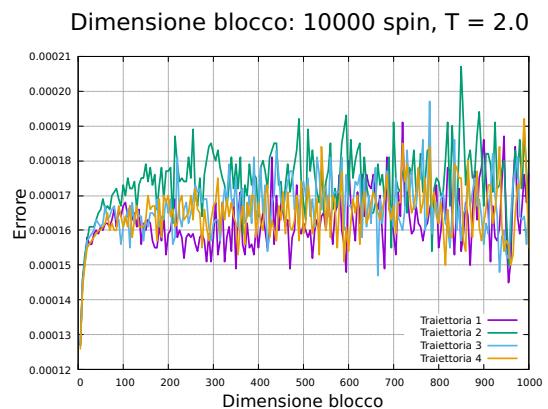
Figura 76: $T = 0.5$ Figura 77: $T = 1.0$ Figura 78: $T = 1.5$ Figura 79: $T = 2.0$

Figura 80: Errore in funzione della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 1D costituito da 10000 spin.

4.2 Simulazioni con campo magnetico $h = 0.0$

4.2.1 Termalizzazione

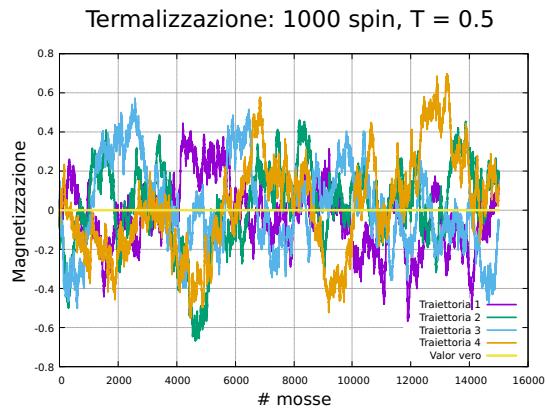
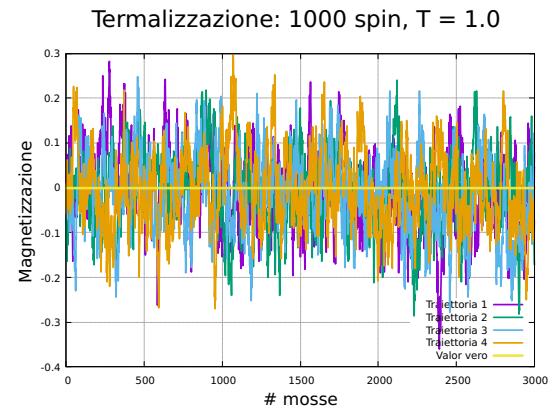
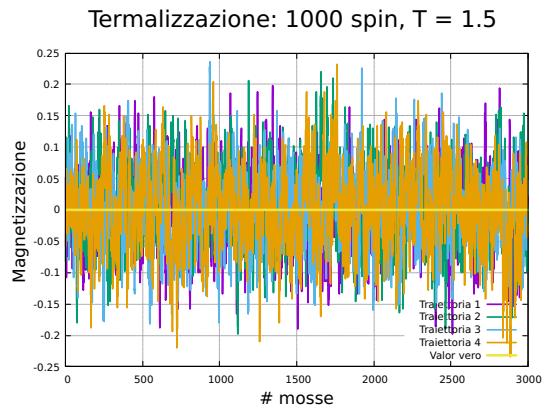
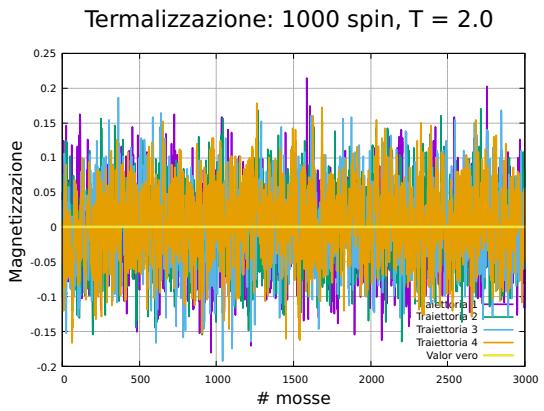
Figura 81: $T = 0.5$ Figura 82: $T = 1.0$ Figura 83: $T = 1.5$ Figura 84: $T = 2.0$

Figura 85: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 1D costituito da 1000 spin.

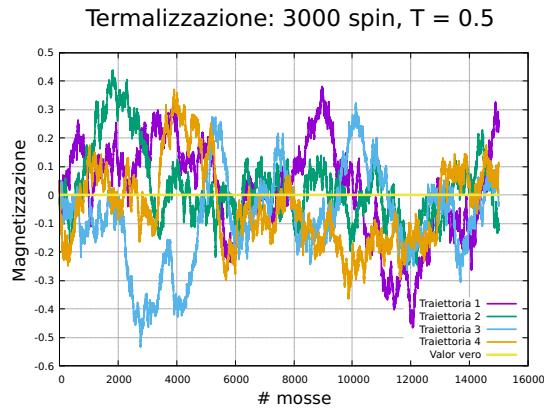
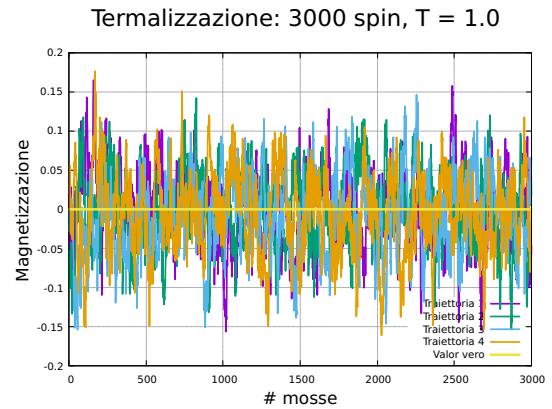
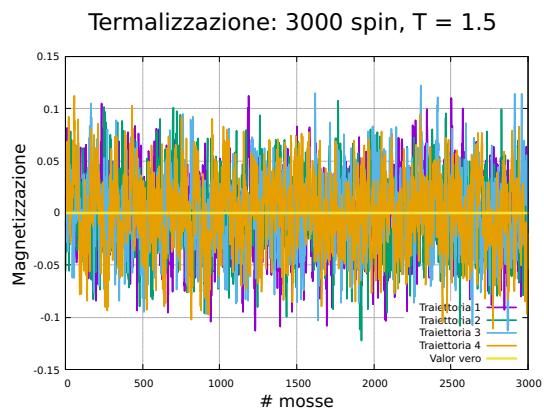
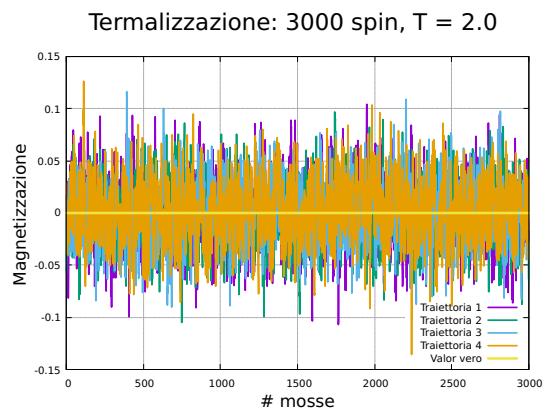
Figura 86: $T = 0.5$ Figura 87: $T = 1.0$ Figura 88: $T = 1.5$ Figura 89: $T = 2.0$

Figura 90: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 1D costituito da 3000 spin.

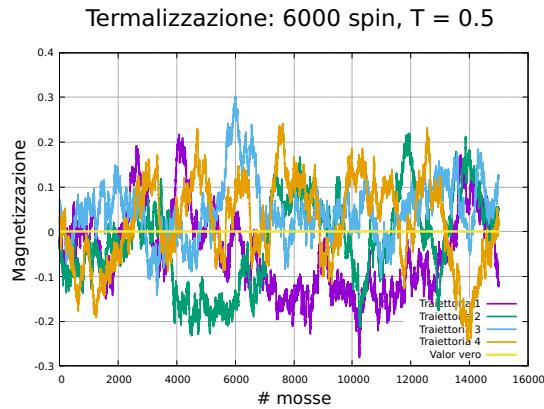
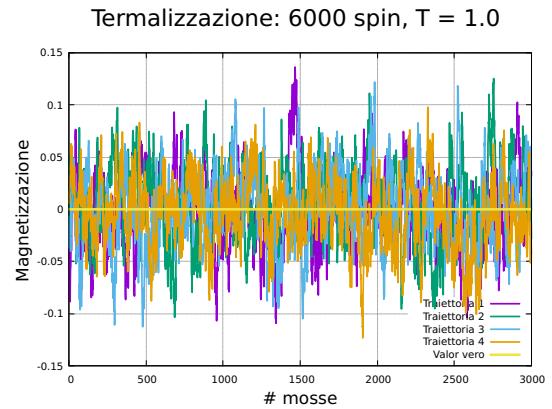
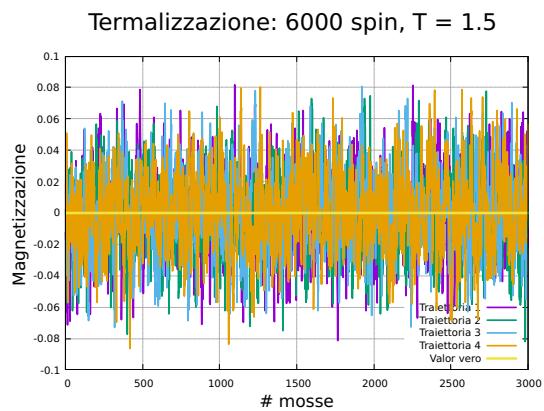
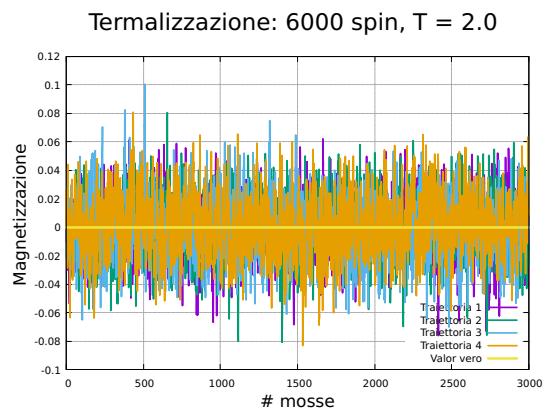
Figura 91: $T = 0.5$ Figura 92: $T = 1.0$ Figura 93: $T = 1.5$ Figura 94: $T = 2.0$

Figura 95: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 1D costituito da 6000 spin.

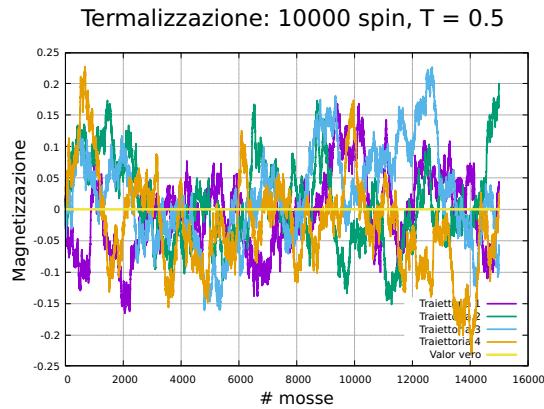
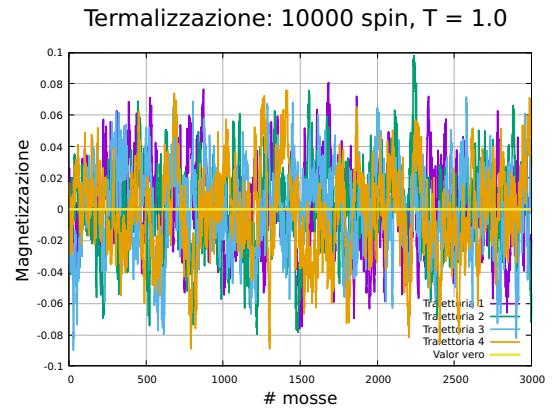
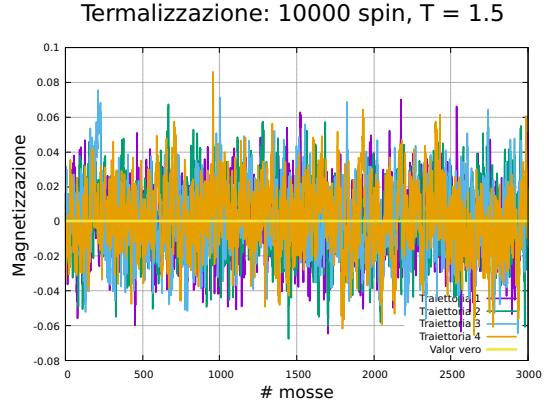
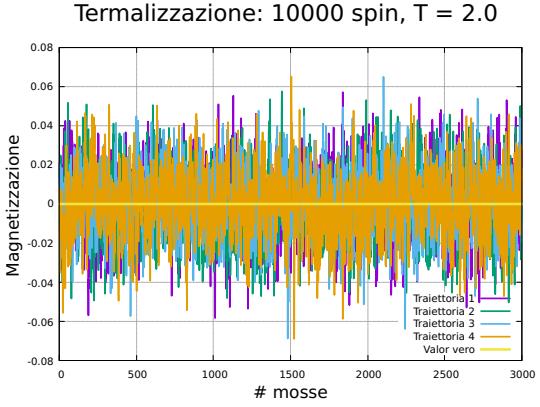
Figura 96: $T = 0.5$ Figura 97: $T = 1.0$ Figura 98: $T = 1.5$ Figura 99: $T = 2.0$

Figura 100: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 1D costituito da 10000 spin.

4.2.2 Auto-correlazione

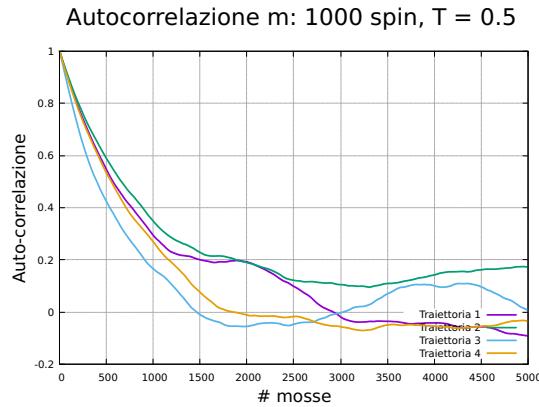
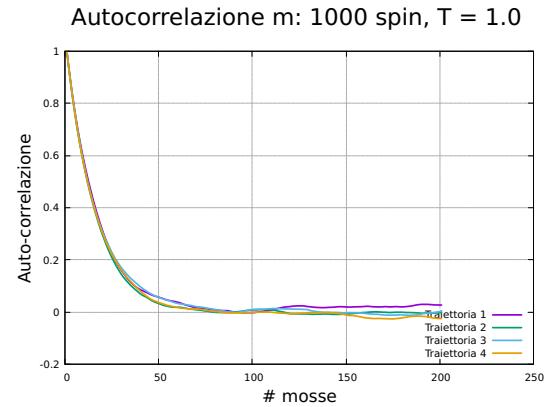
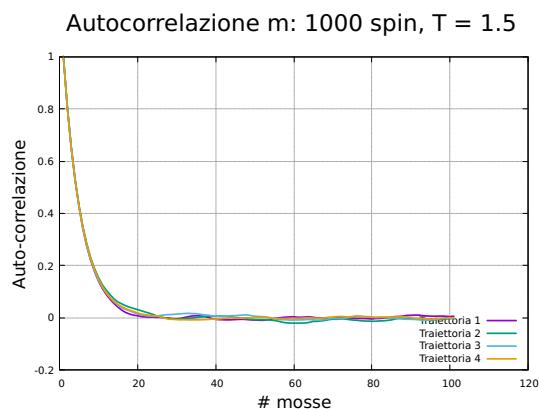
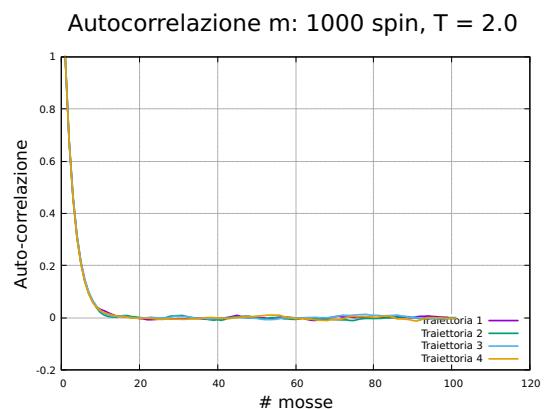
Figura 101: $T = 0.5$ Figura 102: $T = 1.0$ Figura 103: $T = 1.5$ Figura 104: $T = 2.0$

Figura 105: Studio dell'auto-correlazione per un modello di Ising 1D costituito da 1000 spin.

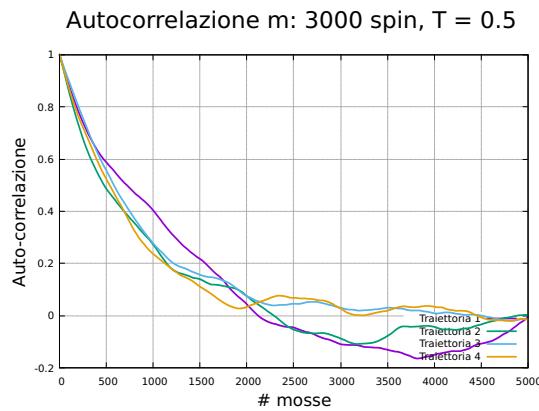
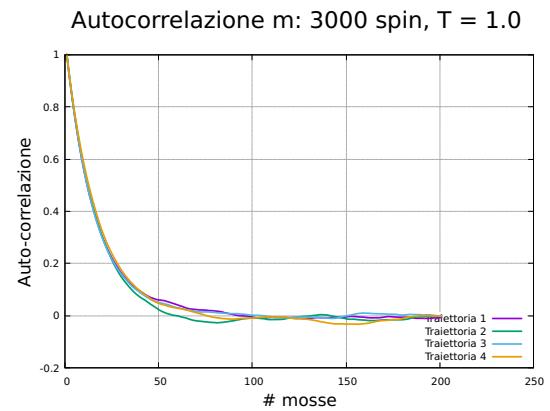
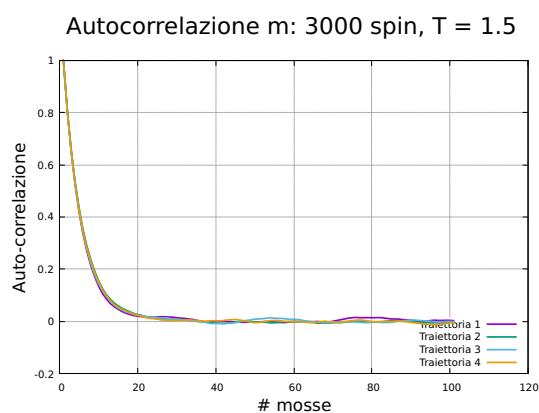
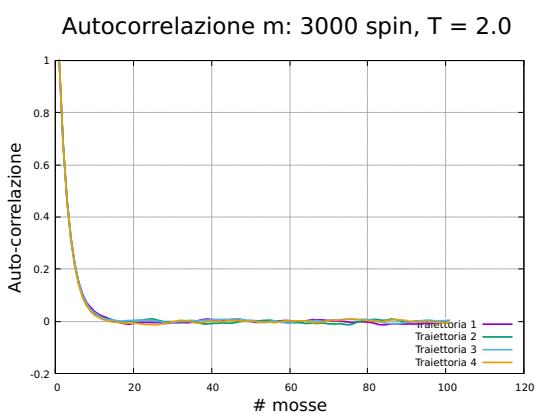
Figura 106: $T = 0.5$ Figura 107: $T = 1.0$ Figura 108: $T = 1.5$ Figura 109: $T = 2.0$

Figura 110: Studio dell'auto-correlazione per un modello di Ising 1D costituito da 3000 spin.

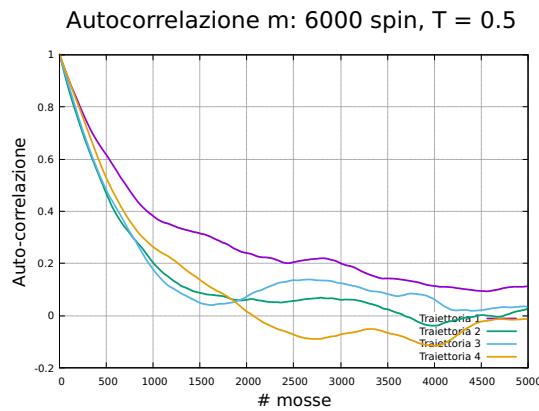
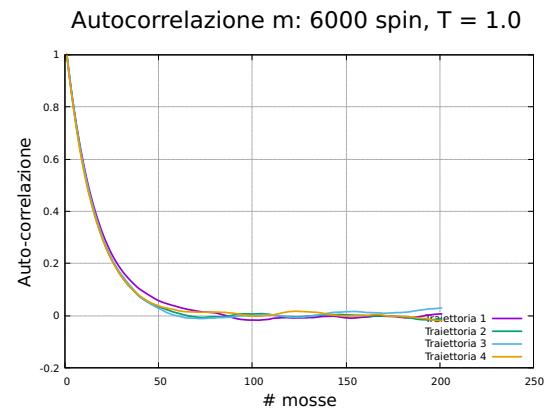
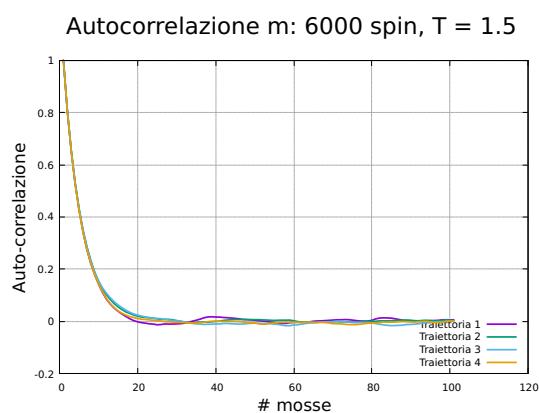
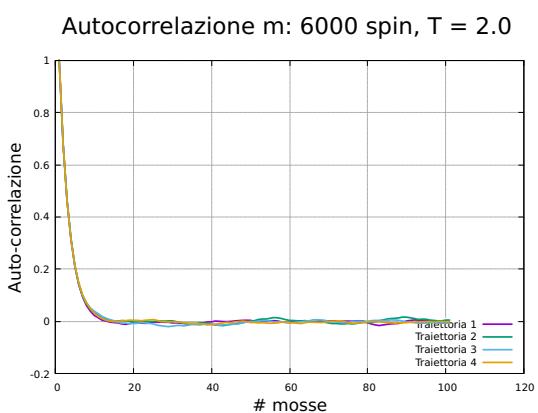
Figura 111: $T = 0.5$ Figura 112: $T = 1.0$ Figura 113: $T = 1.5$ Figura 114: $T = 2.0$

Figura 115: Studio dell'auto-correlazione per un modello di Ising 1D costituito da 6000 spin.

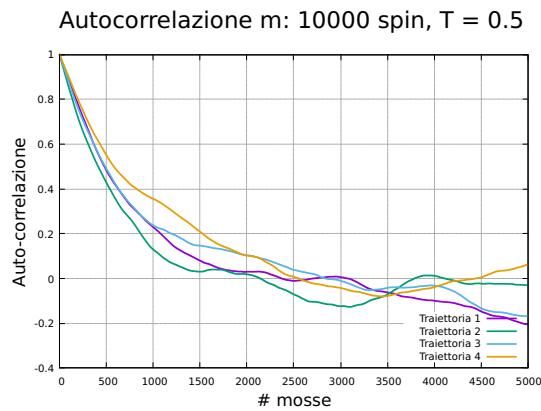
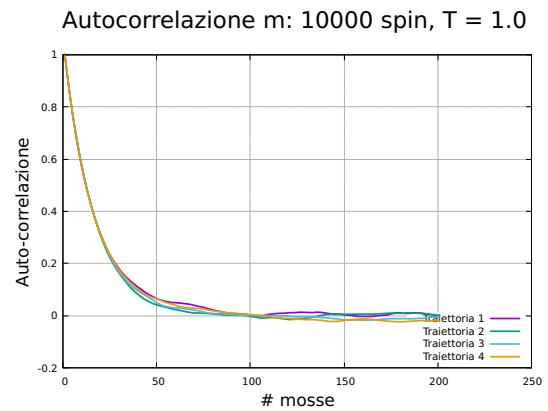
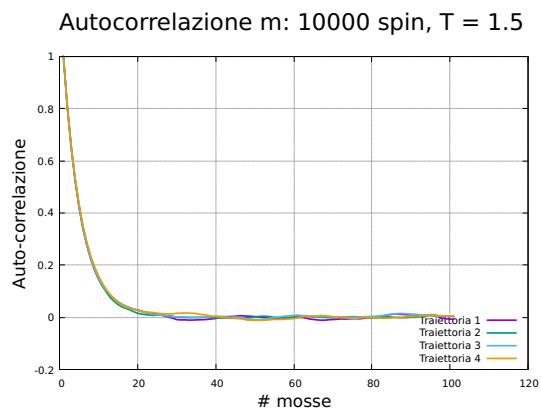
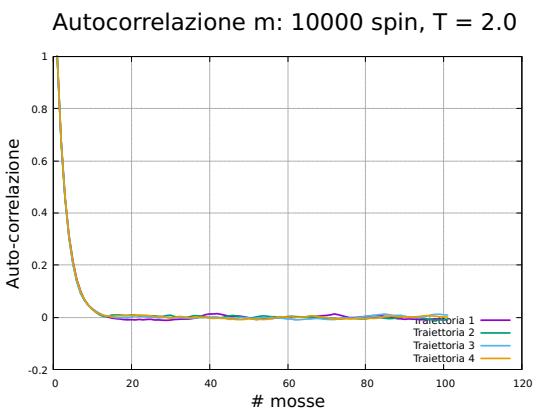
Figura 116: $T = 0.5$ Figura 117: $T = 1.0$ Figura 118: $T = 1.5$ Figura 119: $T = 2.0$

Figura 120: Studio dell'auto-correlazione per un modello di Ising 1D costituito da 10000 spin.

4.2.3 Dimensione dei blocchi

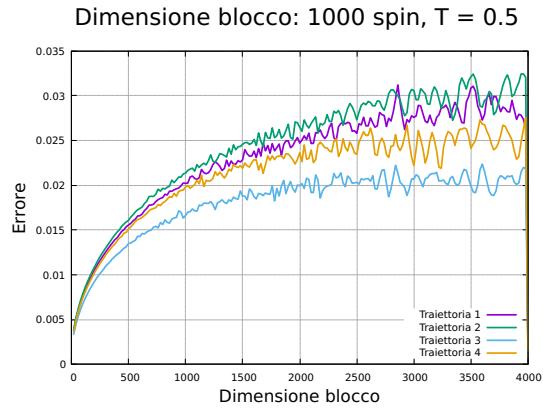
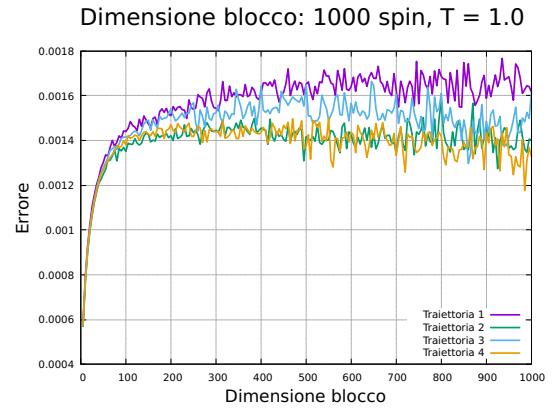
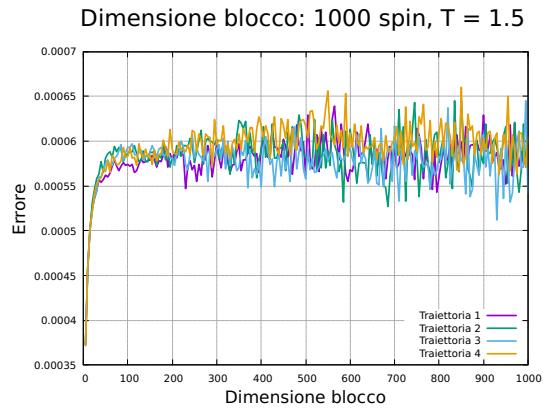
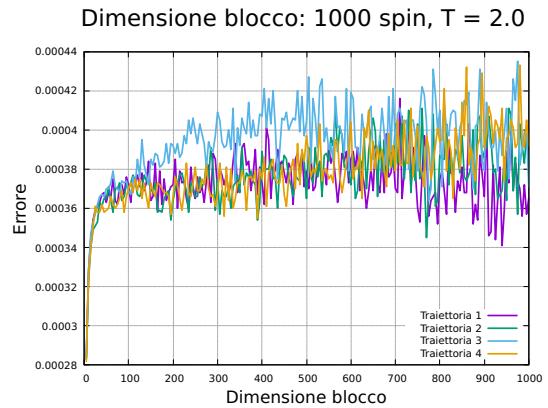
Figura 121: $T = 0.5$ Figura 122: $T = 1.0$ Figura 123: $T = 1.5$ Figura 124: $T = 2.0$

Figura 125: Errore in funzione della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 1D costituito da 1000 spin.

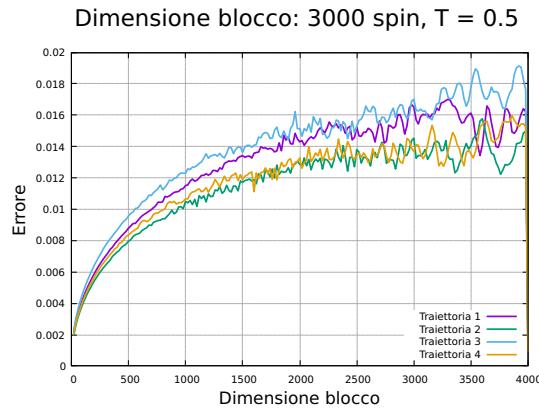
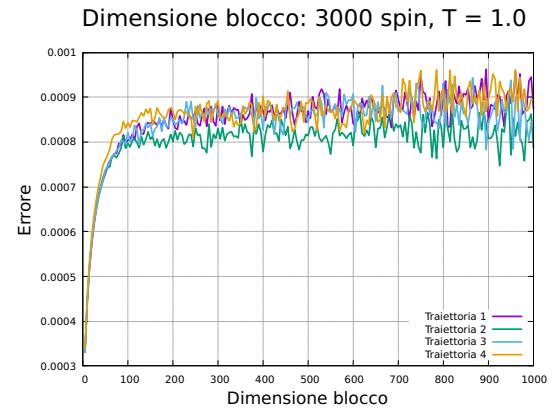
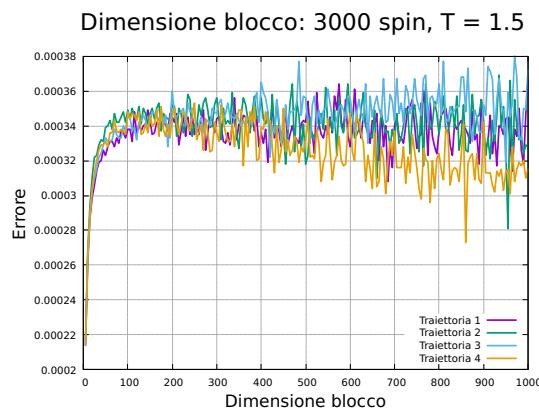
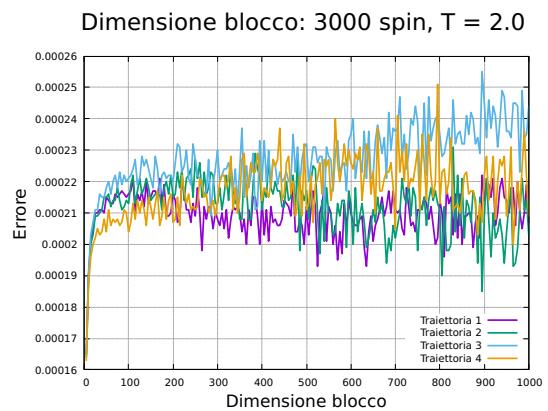
Figura 126: $T = 0.5$ Figura 127: $T = 1.0$ Figura 128: $T = 1.5$ Figura 129: $T = 2.0$

Figura 130: Errore in funzione della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 1D costituito da 3000 spin.

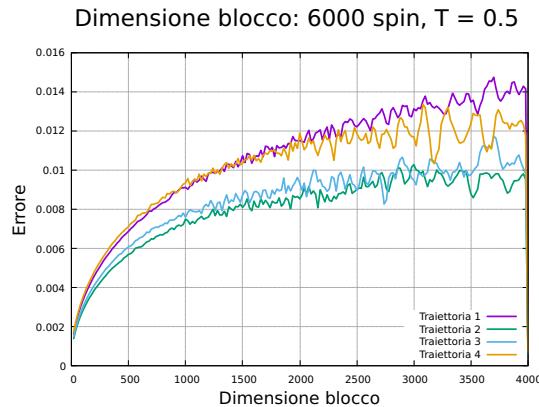
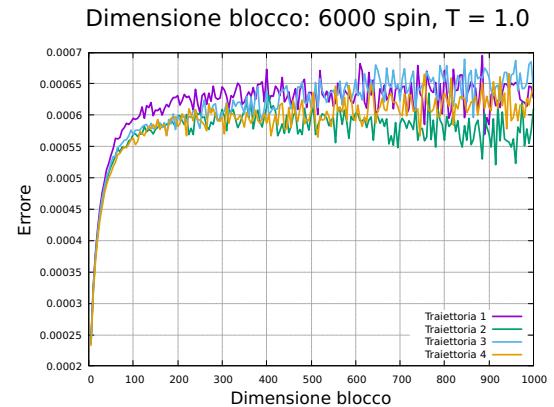
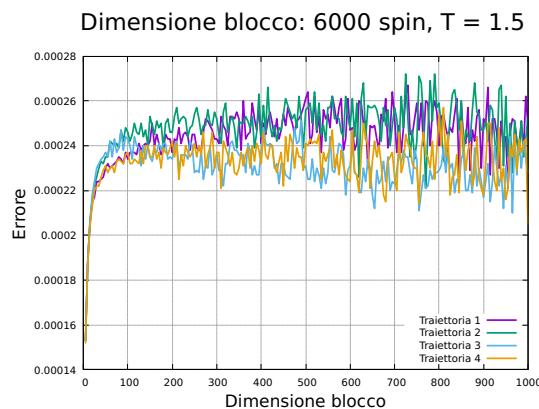
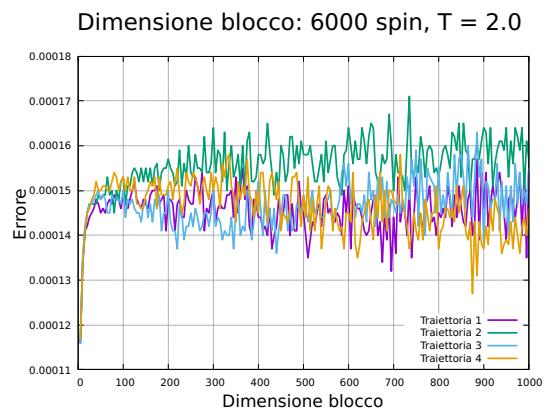
Figura 131: $T = 0.5$ Figura 132: $T = 1.0$ Figura 133: $T = 1.5$ Figura 134: $T = 2.0$

Figura 135: Errore in funzione della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 1D costituito da 6000 spin.

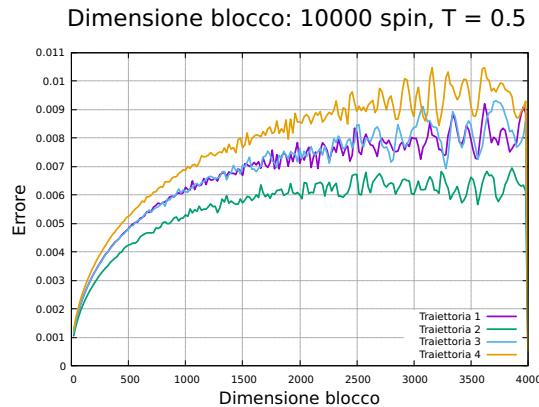
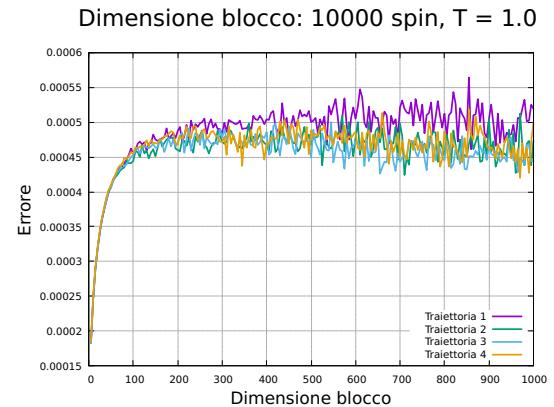
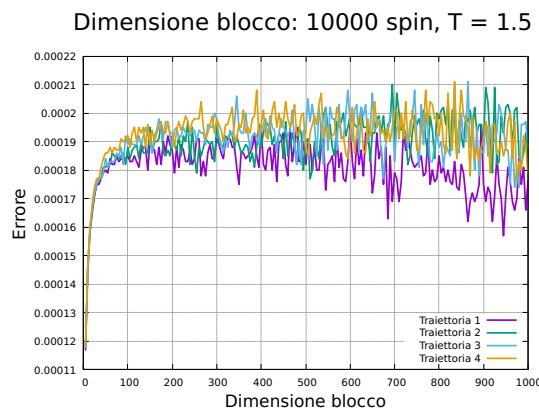
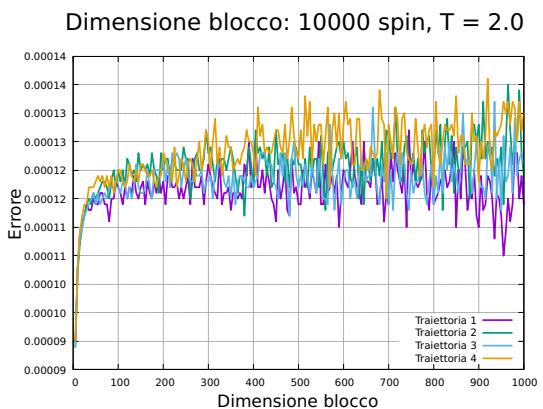
Figura 136: $T = 0.5$ Figura 137: $T = 1.0$ Figura 138: $T = 1.5$ Figura 139: $T = 2.0$

Figura 140: Errore in funzione della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 1D costituito da 10000 spin.

5 Simulazioni modello di Ising 2D

Per il modello di Ising 2D ho lavorato sia con l'algoritmo di Metropolis che con quello di Wolff, nettamente più efficace rispetto al precedente nella caratterizzazione del punto critico. In entrambi i casi, la prima fase dello studio del modello di Ising 2D è incentrata sulla determinazione dei parametri ottimali per ottenere dei valori d'aspettazione statisticamente rilevanti. In questa fase preliminare ho lavorato con cinque dimensioni reticolari $N \in \{100, 200, 300, 400, 500\}$ e cinque temperature $T \in \{1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5\}$. Per ognuna di queste coppie dimensione-temperatura ho considerato quattro seed differenti del generatore di numeri casuali in modo da poter analizzare il comportamento del sistema lungo differenti traiettorie nello spazio delle fasi. La seconda fase consiste invece nel calcolo dei valori d'aspettazione, da confrontare poi con quanto noto in letteratura.

5.1 Simulazioni con algoritmo di Metropolis

Le simulazioni considerate in questa sottosezione sono state effettuate con l'algoritmo di Metropolis, la cui implementazione è riportata in seguito. Per ogni mossa Monte-Carlo, viene tentato un numero di singole inversioni degli spin pari al numero di siti reticolari del modello stesso.

```

proc metropolisMove*(modIsing: var seq[seq[int]], rg: var PCG, temp: float32, acc:
→ float32, nspin: int, accettate: var int) =
    # Algoritmo di Metropolis per evolvere il modello di Ising 2D
    # Per ogni MC-move, provo a fare nspin * nspin inversioni degli spin
    # perchè nspin è "il lato" del reticolo quadrato considerato

    # Indice per selezionare lo spin
    var
        nmove = int(nspin * nspin)
        diffE: float32
        xcoor, ycoor, appo: int
        up, down, left, right: int

    for i in 0..<nmove:

        # Seleziona casualmente uno spin facente parte del modello
        xcoor = int(floor(rg.rand(float32(0), float32(nspin)))) mod nspin
        ycoor = int(floor(rg.rand(float32(0), float32(nspin)))) mod nspin

        # Determino quali sono i primi vicini in questo caso (facendo attenzione a bc)
        down = (ycoor + 1) mod nspin
        right = (xcoor + 1) mod nspin
        up = (ycoor - 1 + nspin) mod nspin
        left = (xcoor - 1 + nspin) mod nspin

        # Calcolo i contributi energetici
        appo = modIsing[xcoor][ycoor]
        diffE = 2 * acc * float32(appo) * float32((modIsing[right][ycoor] +
→ modIsing[left][ycoor] + modIsing[xcoor][up] + modIsing[xcoor][down])))

        if diffE < 0:
            modIsing[xcoor][ycoor] = -appo
            accettate += 1

        elif rg.rand() < exp(-diffE/temp):
            modIsing[xcoor][ycoor] = -appo
            accettate += 1

```

5.1.1 Termalizzazione

Il sistema viene inizializzato con tutti gli spin orientati up (ossia con valore pari ad 1), poichè questo consente di avere delle termalizzazioni di durata inferiore. Come è possibile osservare nelle figure riportate in seguito, la fase di transitorio è praticamente istantanea per temperature minori della temperatura critica o nettamente superiori. Nell'intorno di T_c si osservano termalizzazioni più lunghe, che risultano essere di circa 500 mosse Monte-Carlo per $T = 2.5$. Sebbene l'algoritmo di Metropolis non sia adeguato per caratterizzare il punto critico, potrebbe essere comunque interessante valutare cosa accada per $T \in \{2.1, 2.2, 2.3, 2.4\}$, perchè il confronto con i risultati prodotti con l'algoritmo di Wolff sarebbe comunque significativo. Per questo motivo, oltre allo studio della termalizzazione sul range di temperature "ampio" riportato in precedenza, ho effettuato uno studio più focalizzato sull' intorno del punto critico, osservando come per $T \rightarrow T_c^+$ la durata della fase di transitorio risulti essere nettamente maggiore, richiedendo oltre 10000 mosse Monte-Carlo. Inoltre, nell'intorno del punto critico, le fluttuazioni nella magnetizzazione, parametro d'ordine per il modello di Ising, persistono per un numero considerevole di mosse MC, il che implica con ogni probabilità che saranno necessari dei blocchi di dimensioni maggiori nell'intorno del punto critico. Le simulazioni successive sono state svolte con 500 mosse Monte-Carlo di termalizzazione, tranne quelle nell'intorno di T_c le quali hanno richiesto una termalizzazione di 10000 mosse MC.

5.1.2 Autocorrelazione

5.1.3 Lunghezza dei blocchi

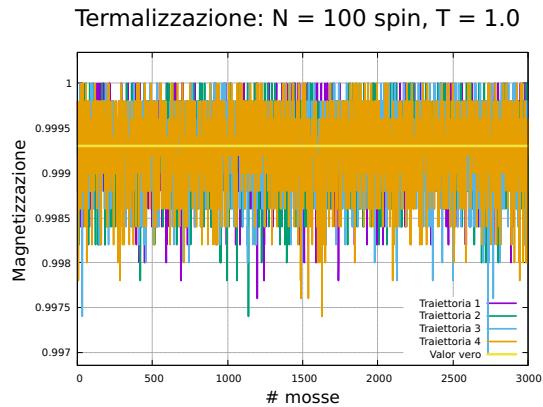
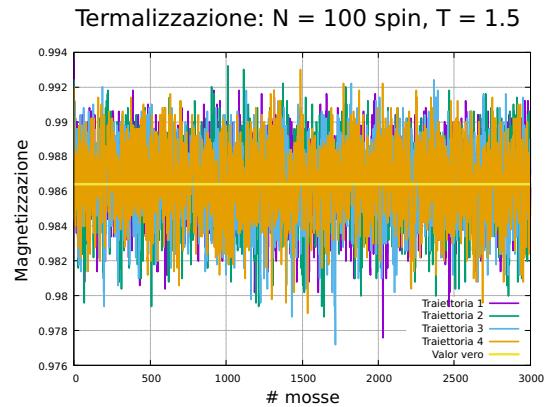
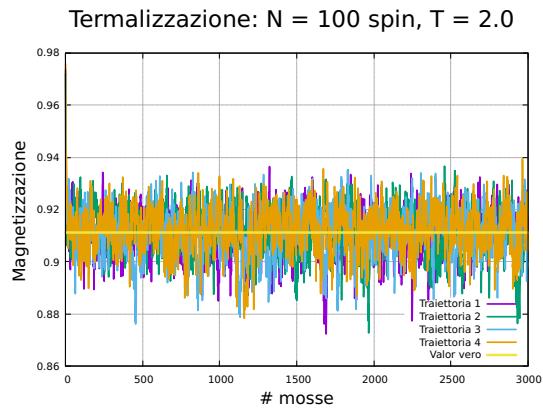
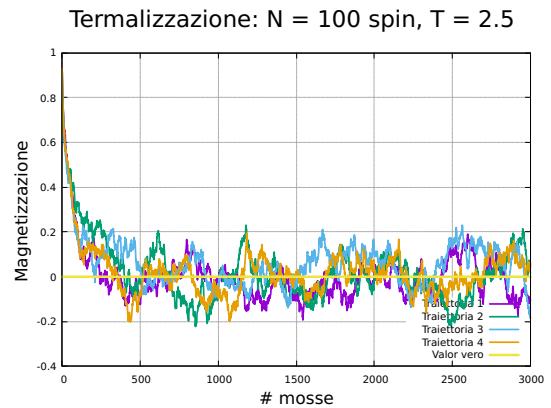
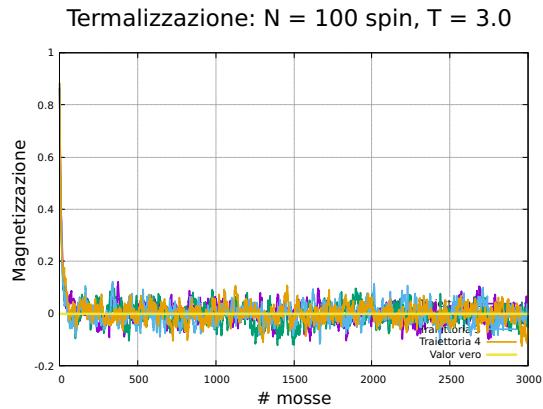
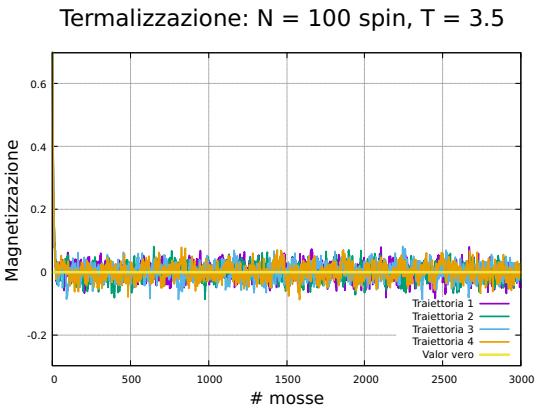
Figura 141: $T = 1.0$ Figura 142: $T = 1.5$ Figura 143: $T = 2.0$ Figura 144: $T = 2.5$ Figura 145: $T = 3.0$ Figura 146: $T = 3.5$

Figura 147: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 2D costituito da 100×100 spin.

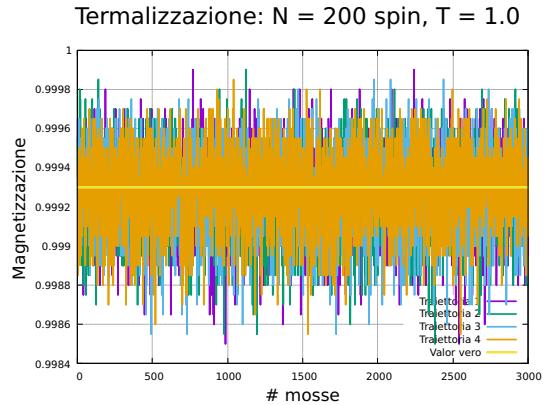
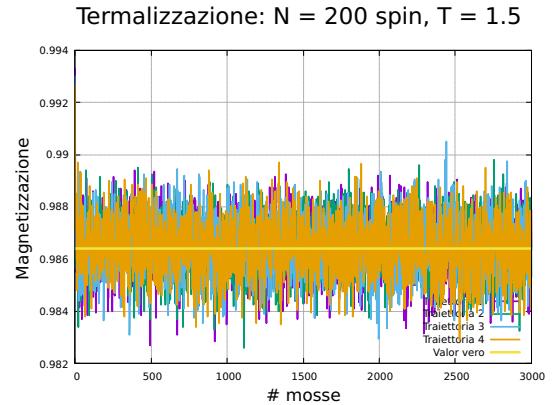
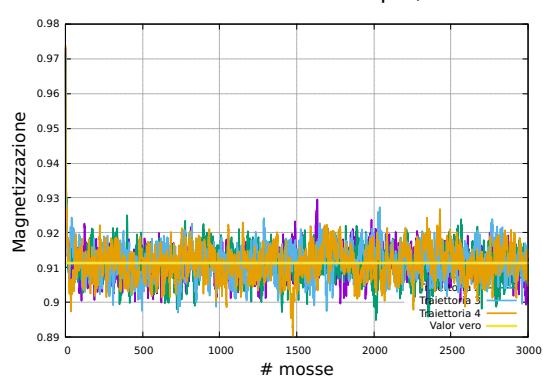
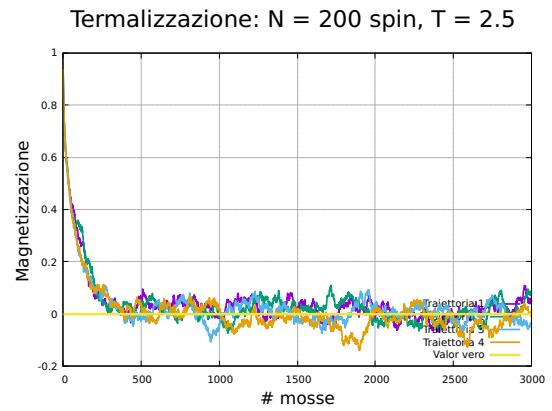
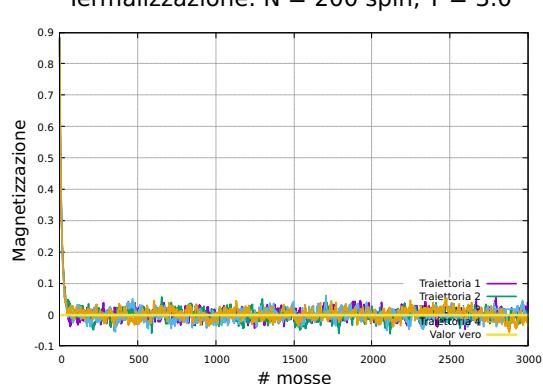
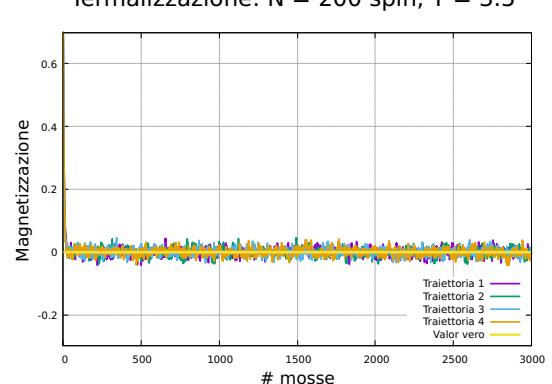
Figura 148: $T = 1.0$ Figura 149: $T = 1.5$ Figura 150: $T = 2.0$ Figura 151: $T = 2.5$ Figura 152: $T = 3.0$ Figura 153: $T = 3.5$

Figura 154: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 2D costituito da 200×200 spin.

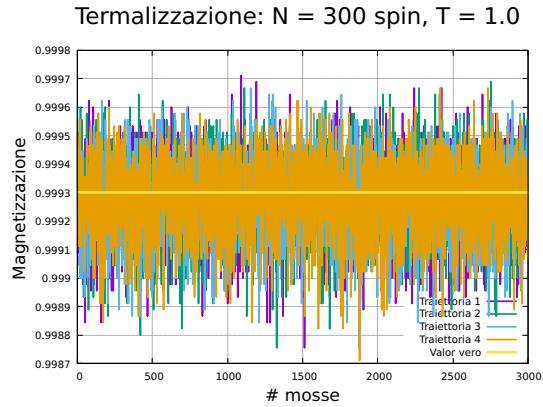
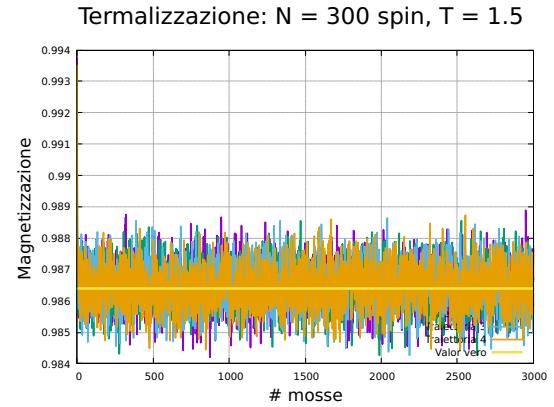
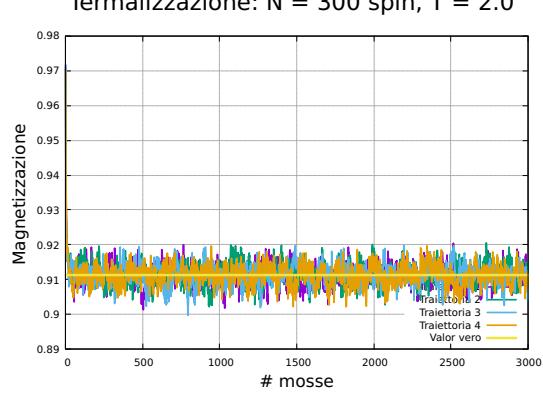
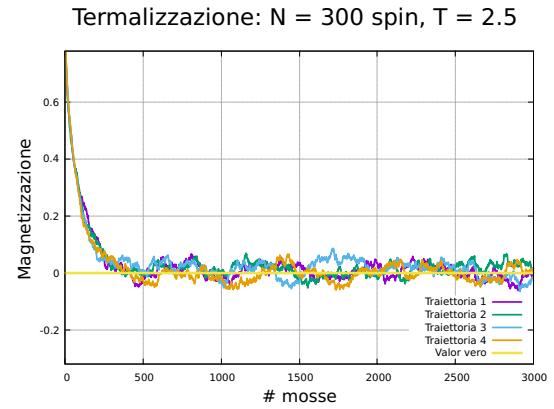
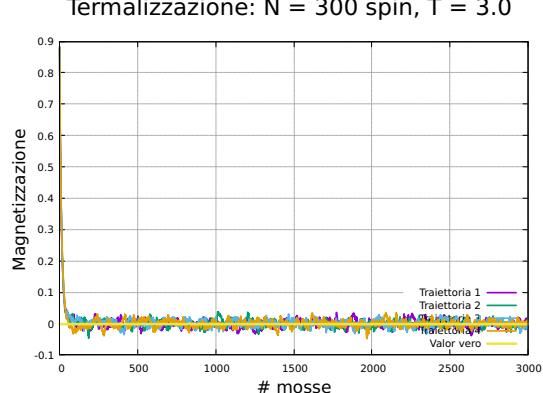
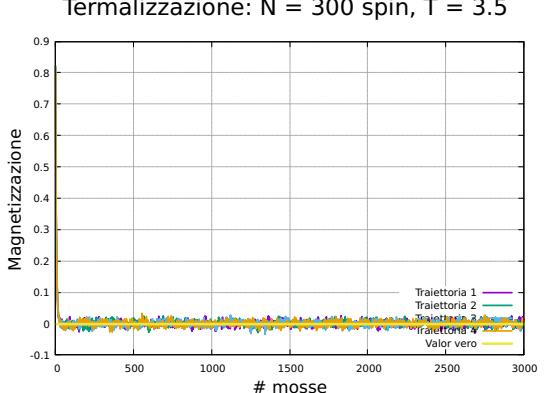
Figura 155: $T = 1.0$ Figura 156: $T = 1.5$ Figura 157: $T = 2.0$ Figura 158: $T = 2.5$ Figura 159: $T = 3.0$ Figura 160: $T = 3.5$

Figura 161: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 2D costituito da 300×300 spin.

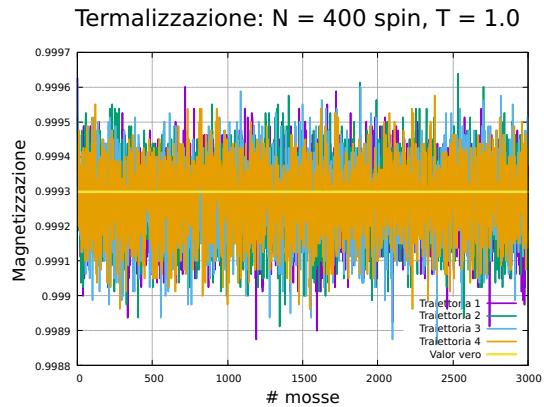
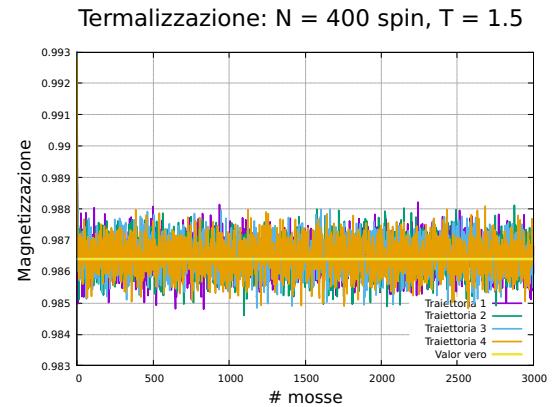
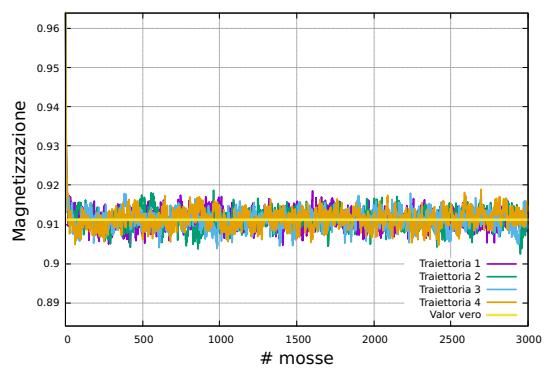
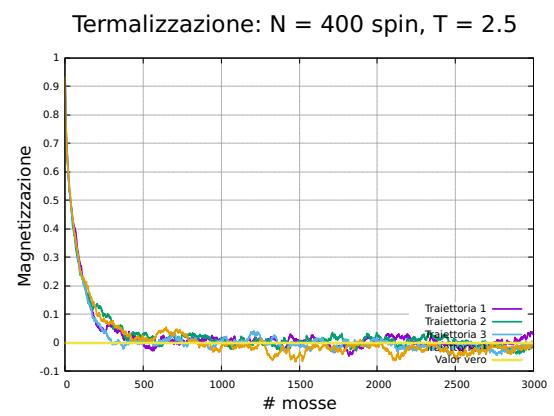
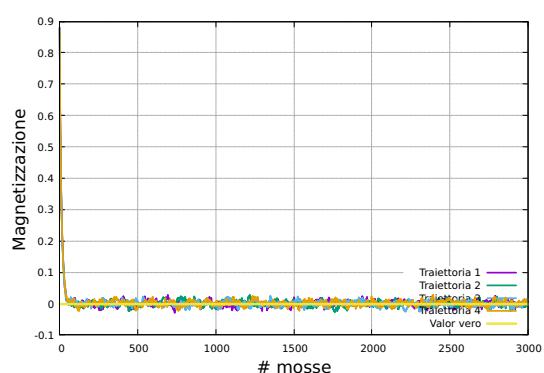
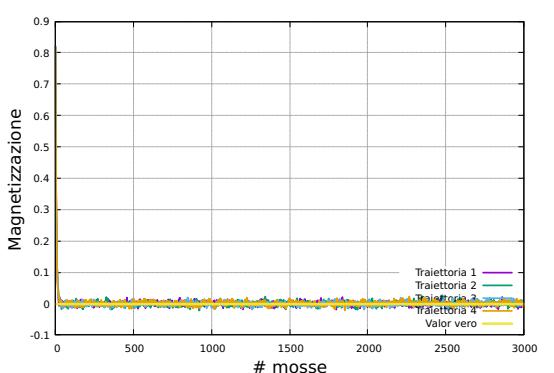
Figura 162: $T = 1.0$ Figura 163: $T = 1.5$ Figura 164: $T = 2.0$ Figura 165: $T = 2.5$ Figura 166: $T = 3.0$ Figura 167: $T = 3.5$

Figura 168: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 2D costituito da 400×400 spin.

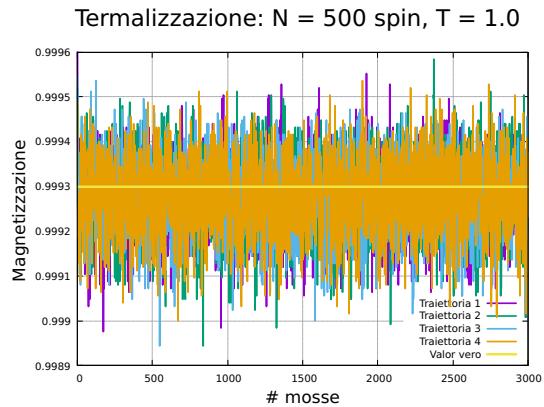
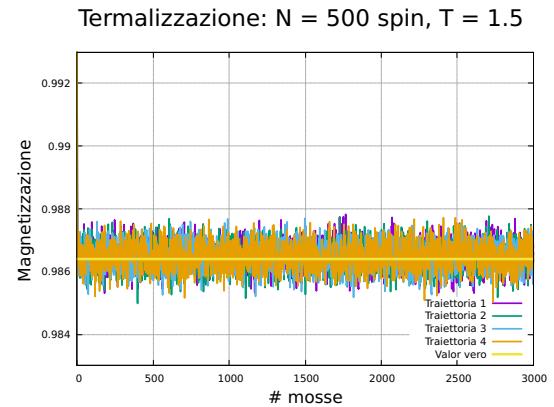
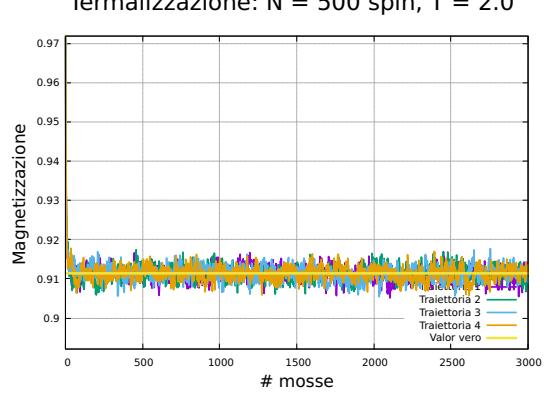
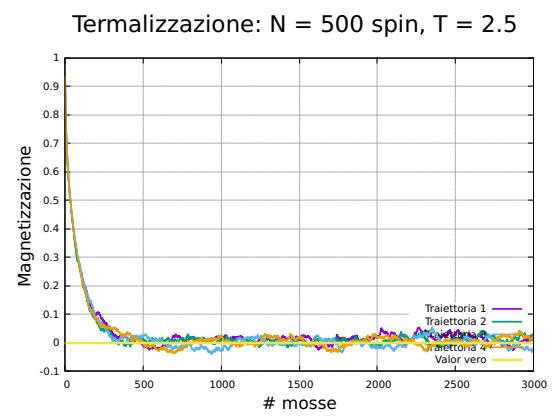
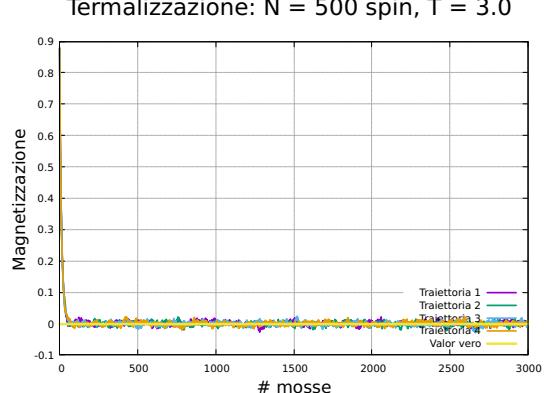
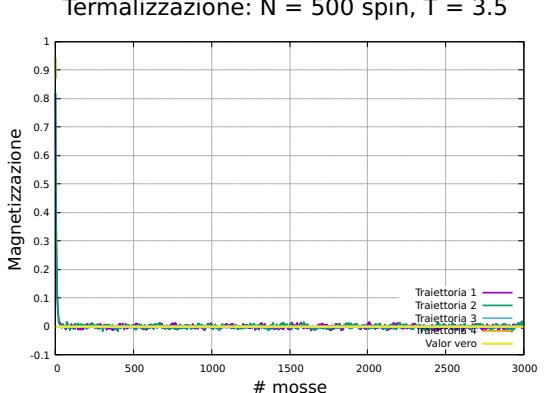
Figura 169: $T = 1.0$ Figura 170: $T = 1.5$ Figura 171: $T = 2.0$ Figura 172: $T = 2.5$ Figura 173: $T = 3.0$ Figura 174: $T = 3.5$

Figura 175: Studio della termalizzazione di un modello di Ising 2D costituito da 500×500 spin.

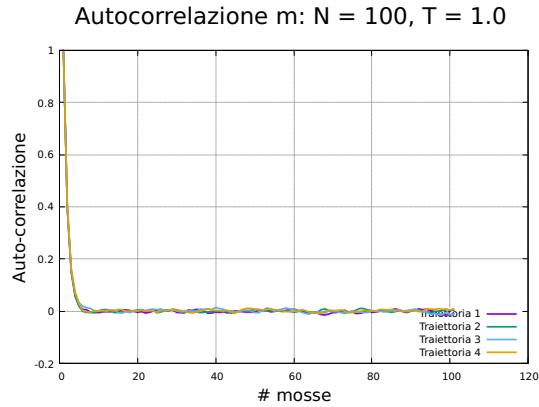
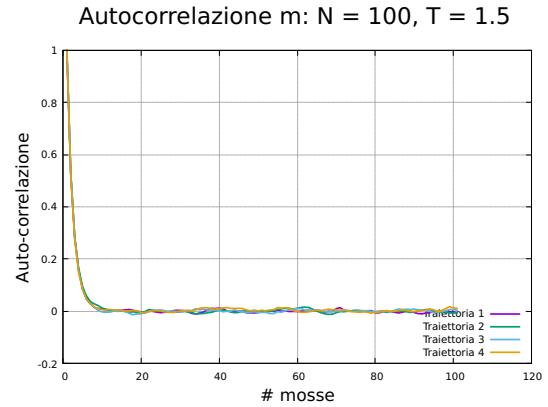
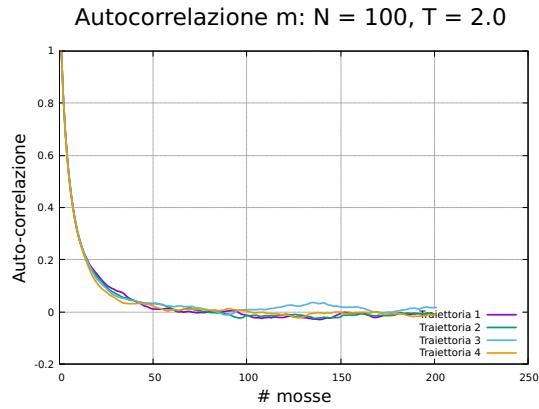
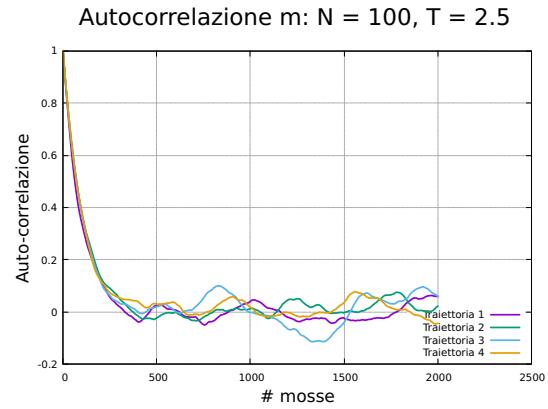
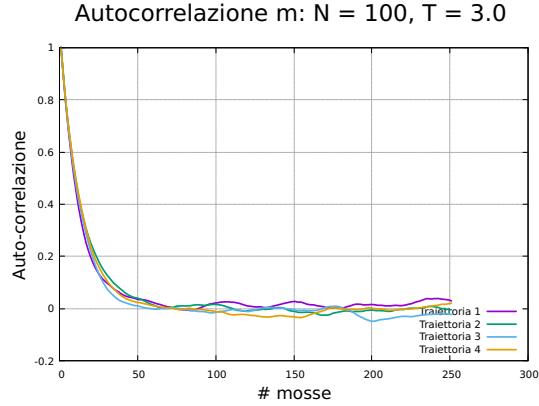
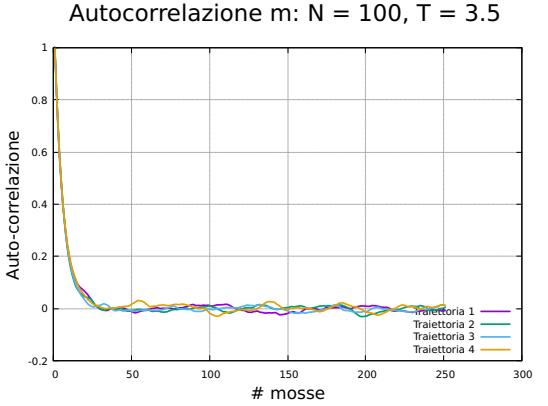
Figura 176: $T = 1.0$ Figura 177: $T = 1.5$ Figura 178: $T = 2.0$ Figura 179: $T = 2.5$ Figura 180: $T = 3.0$ Figura 181: $T = 3.5$

Figura 182: Studio dell'autocorrelazione di un modello di Ising 2D costituito da 100×100 spin.

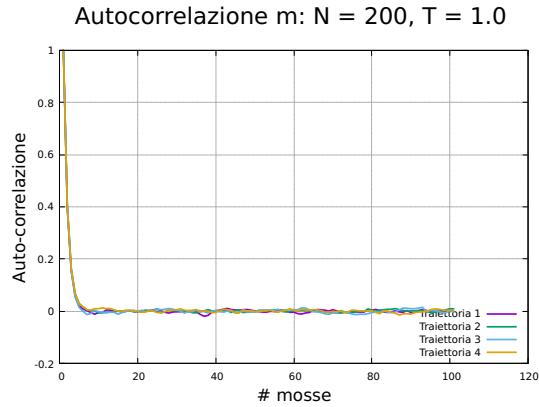
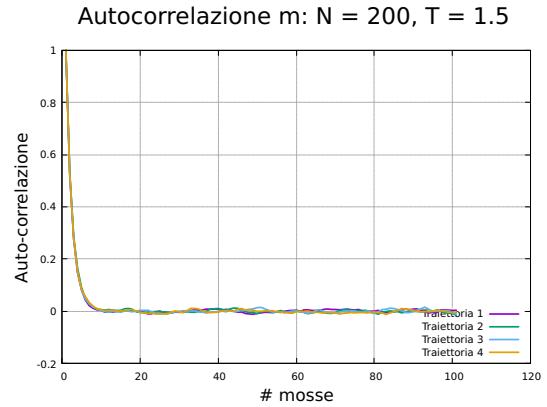
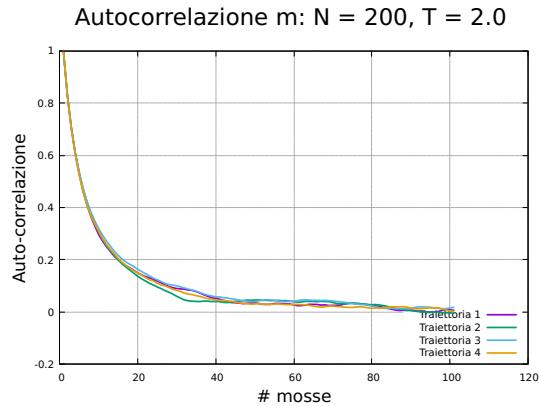
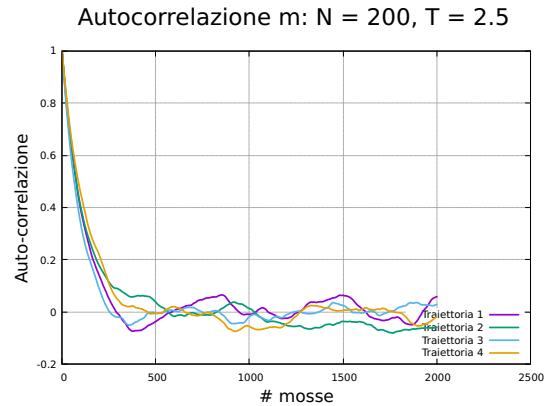
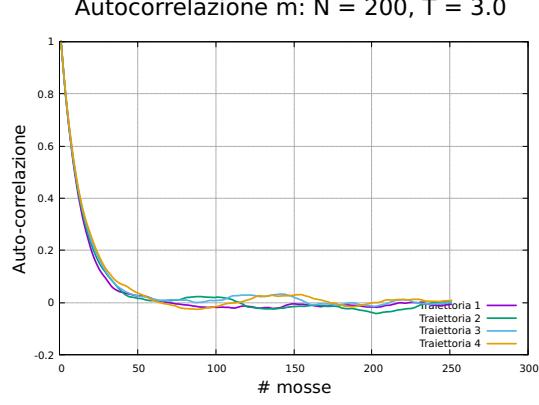
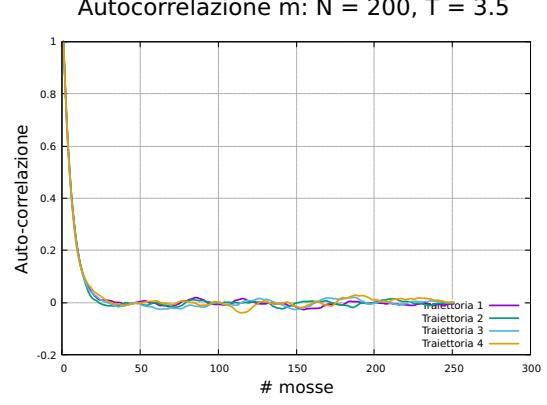
Figura 183: $T = 1.0$ Figura 184: $T = 1.5$ Figura 185: $T = 2.0$ Figura 186: $T = 2.5$ Figura 187: $T = 3.0$ Figura 188: $T = 3.5$

Figura 189: Studio dell'autocorrelazione di un modello di Ising 2D costituito da 200×200 spin.

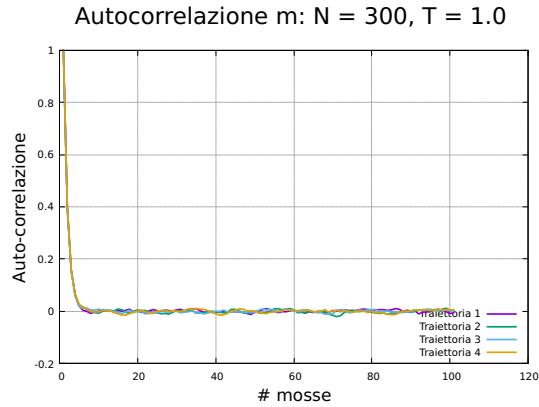
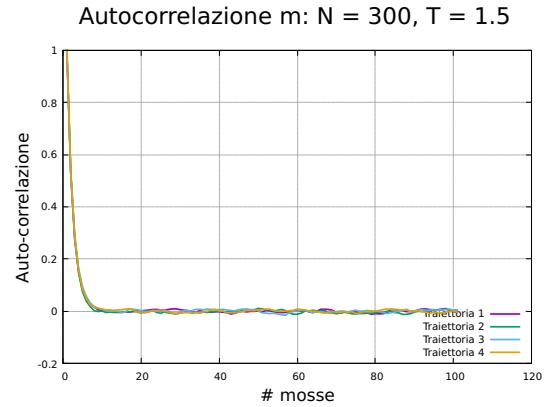
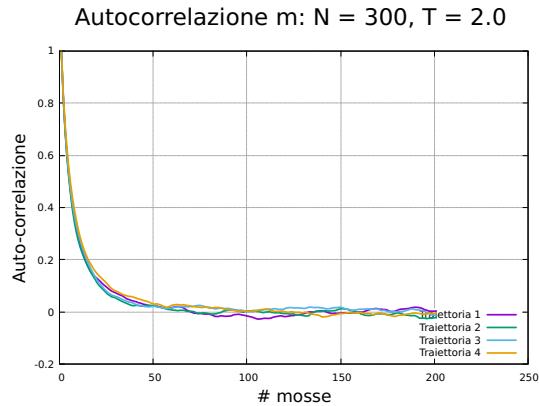
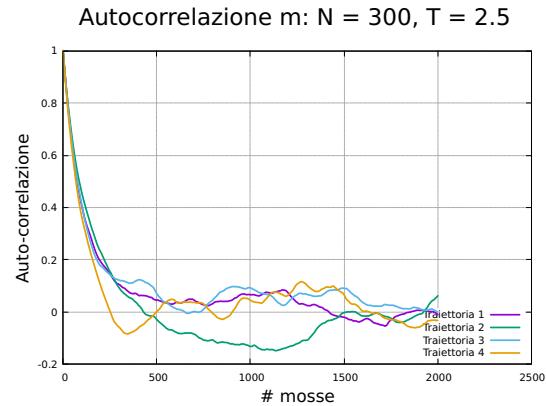
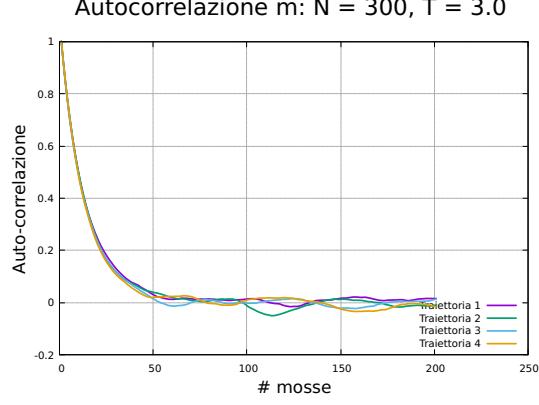
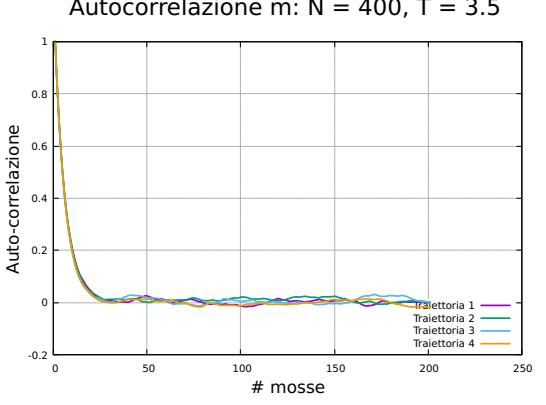
Figura 190: $T = 1.0$ Figura 191: $T = 1.5$ Figura 192: $T = 2.0$ Figura 193: $T = 2.5$ Figura 194: $T = 3.0$ Figura 195: $T = 3.5$

Figura 196: Studio dell'autocorrelazione di un modello di Ising 2D costituito da 300×300 spin.

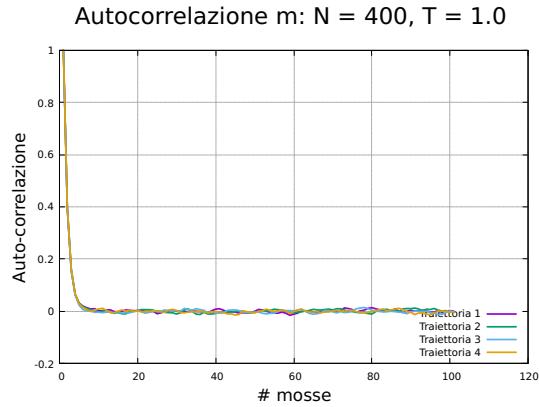
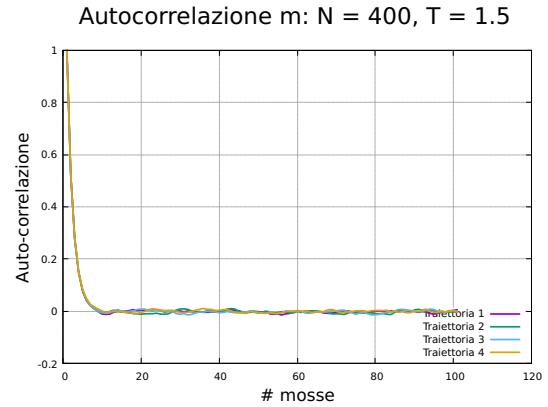
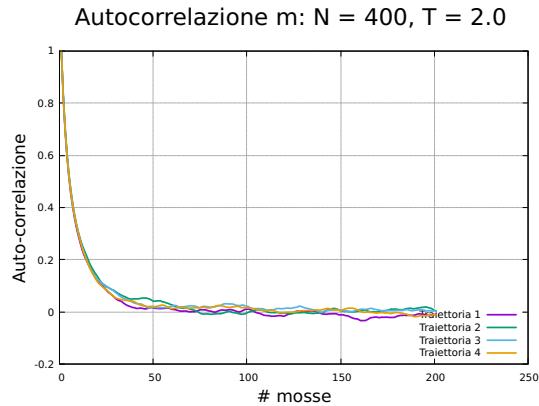
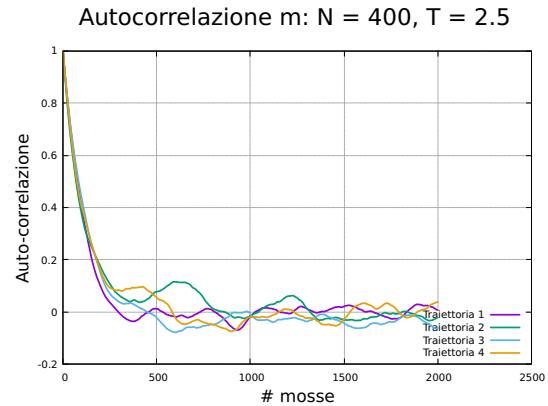
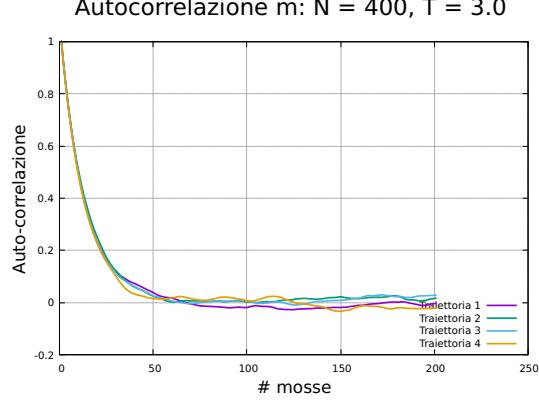
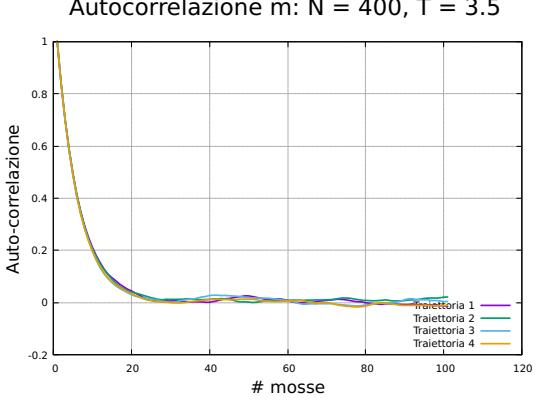
Figura 197: $T = 1.0$ Figura 198: $T = 1.5$ Figura 199: $T = 2.0$ Figura 200: $T = 2.5$ Figura 201: $T = 3.0$ Figura 202: $T = 3.5$

Figura 203: Studio dell'autocorrelazione di un modello di Ising 2D costituito da 400×400 spin.

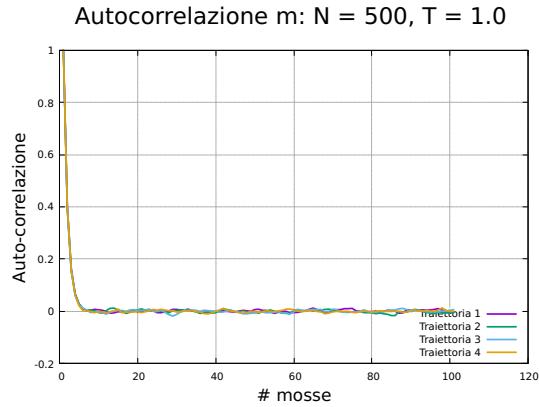
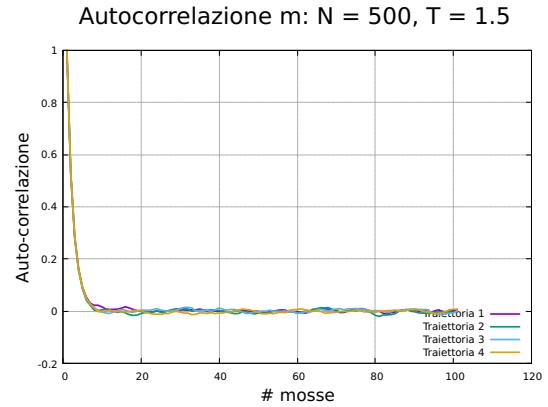
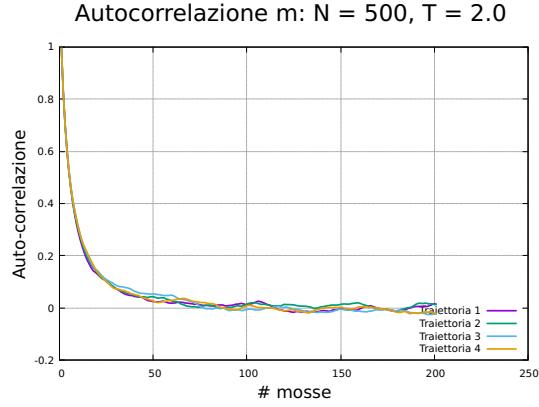
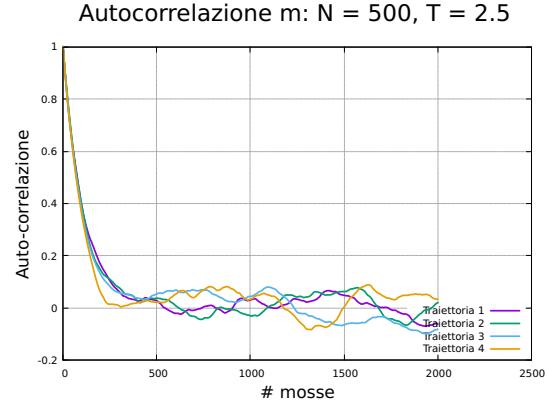
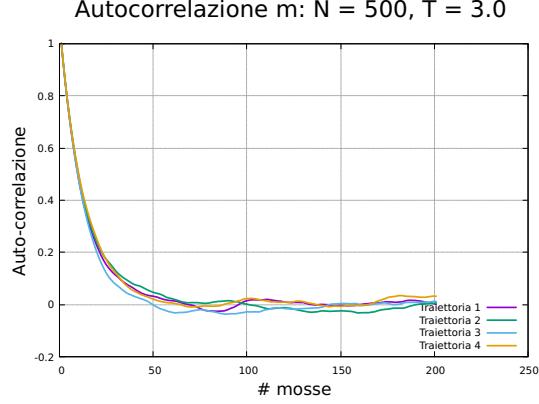
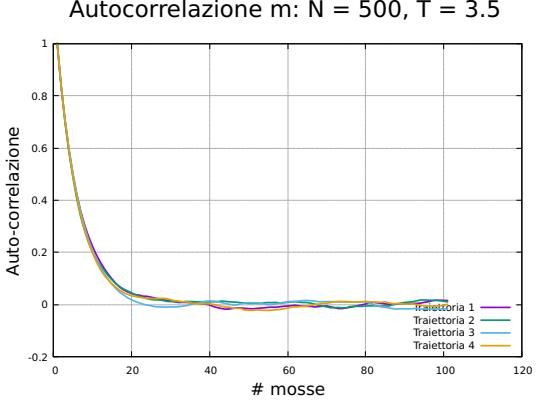
Figura 204: $T = 1.0$ Figura 205: $T = 1.5$ Figura 206: $T = 2.0$ Figura 207: $T = 2.5$ Figura 208: $T = 3.0$ Figura 209: $T = 3.5$

Figura 210: Studio dell'autocorrelazione di un modello di Ising 2D costituito da 500×500 spin.

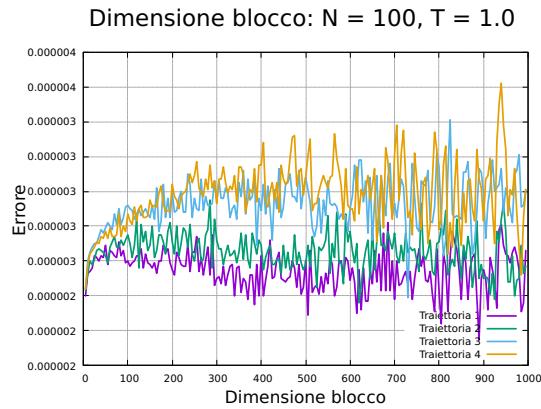
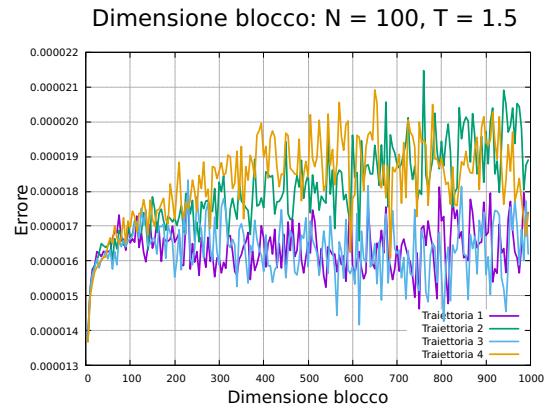
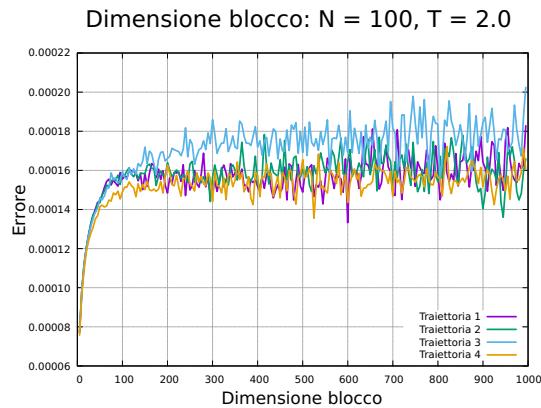
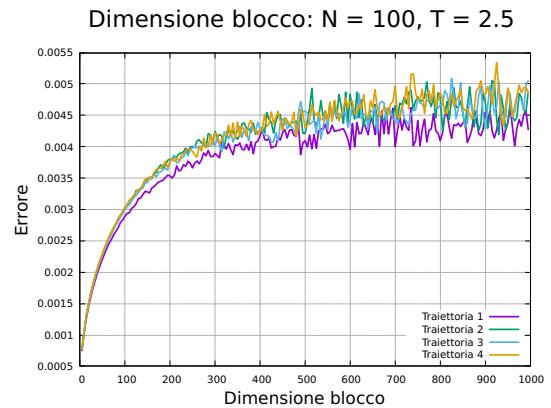
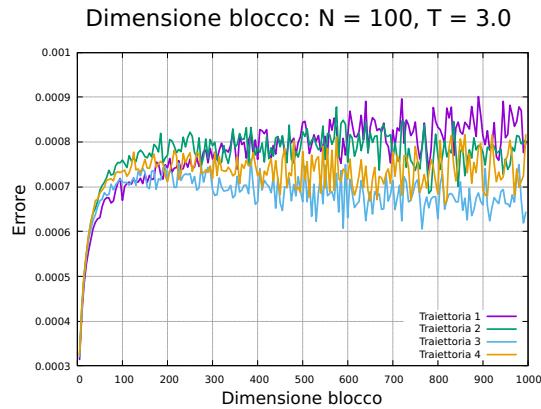
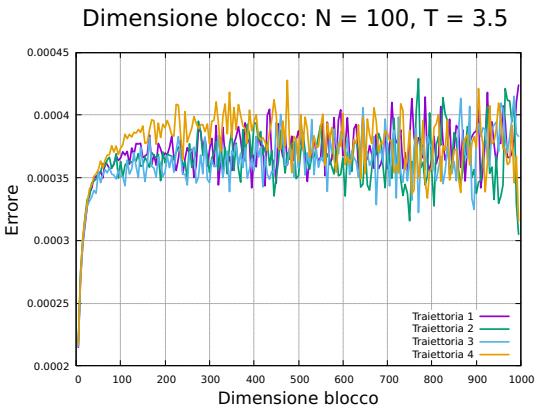
Figura 211: $T = 1.0$ Figura 212: $T = 1.5$ Figura 213: $T = 2.0$ Figura 214: $T = 2.5$ Figura 215: $T = 3.0$ Figura 216: $T = 3.5$

Figura 217: Studio della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 2D costituito da 100×100 spin.

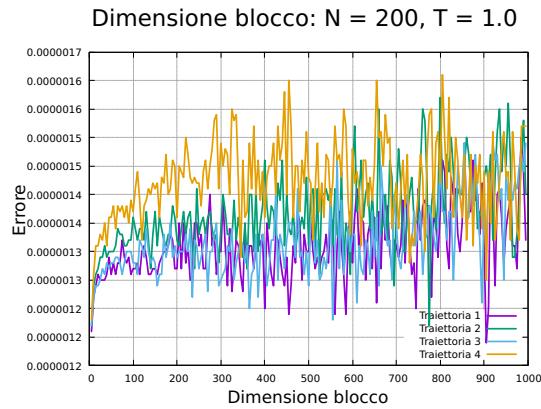
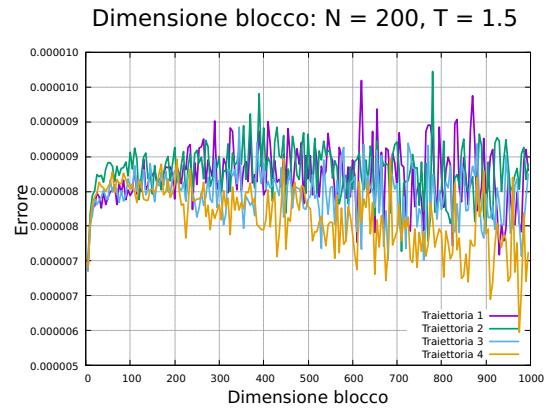
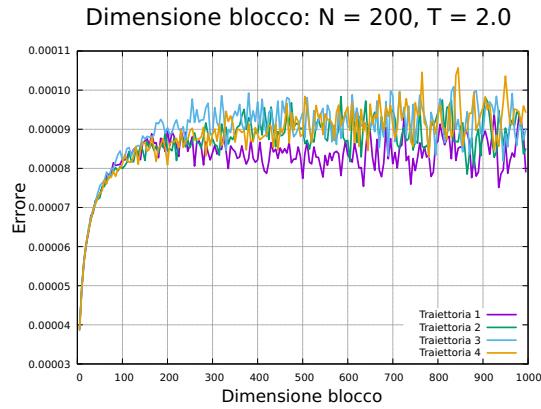
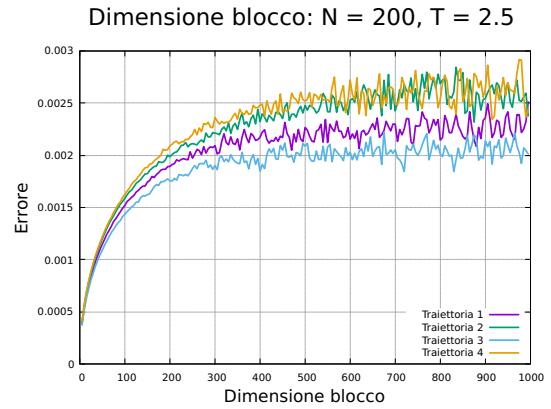
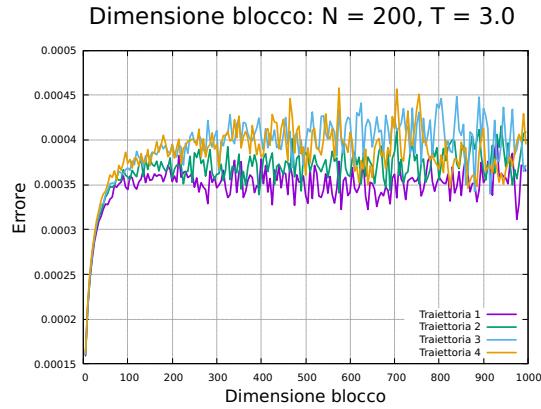
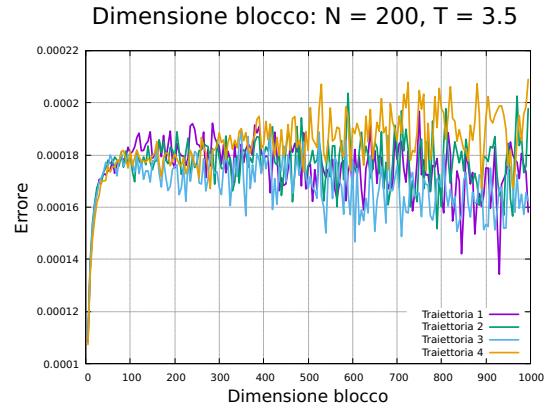
Figura 218: $T = 1.0$ Figura 219: $T = 1.5$ Figura 220: $T = 2.0$ Figura 221: $T = 2.5$ Figura 222: $T = 3.0$ Figura 223: $T = 3.5$

Figura 224: Studio della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 2D costituito da 200×200 spin.

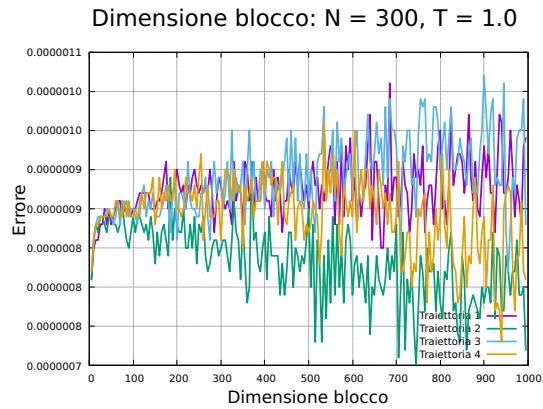
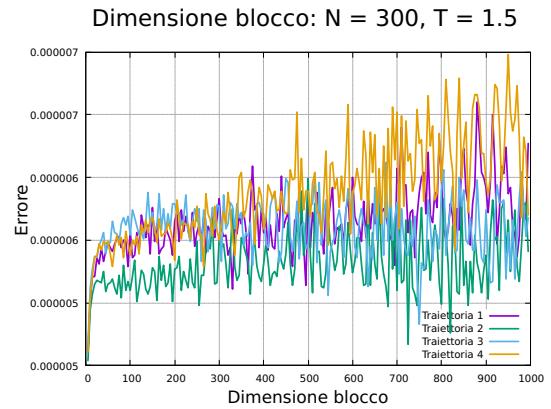
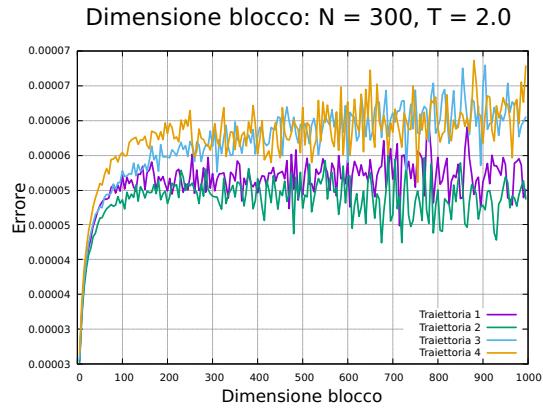
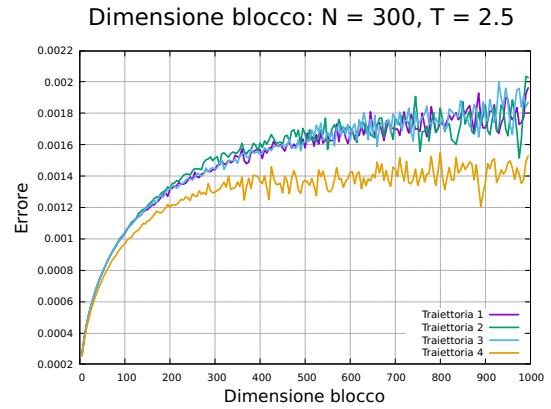
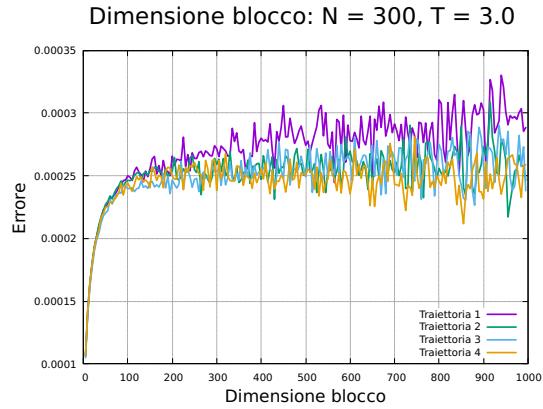
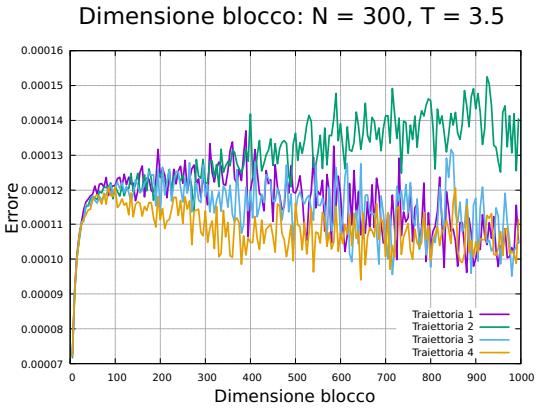
Figura 225: $T = 1.0$ Figura 226: $T = 1.5$ Figura 227: $T = 2.0$ Figura 228: $T = 2.5$ Figura 229: $T = 3.0$ Figura 230: $T = 3.5$

Figura 231: Studio della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 2D costituito da 300×300 spin.

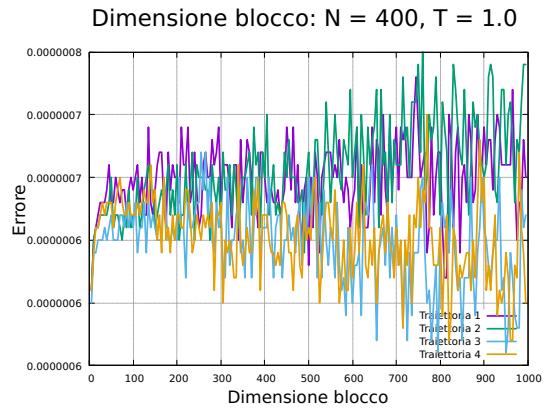
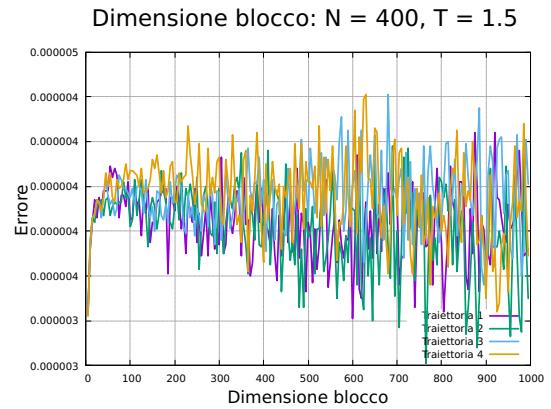
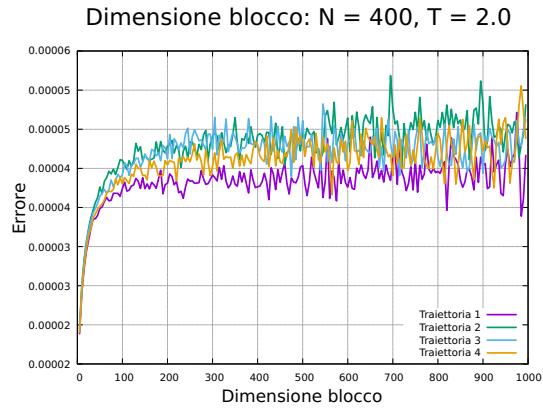
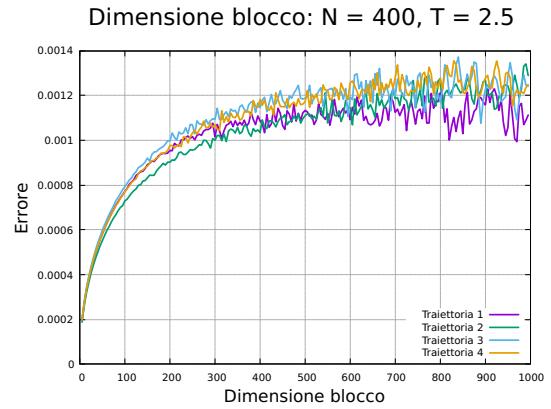
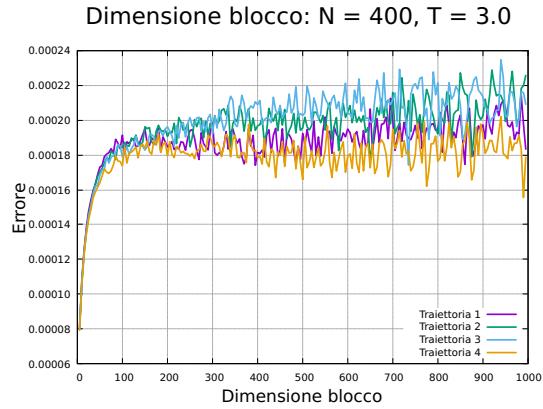
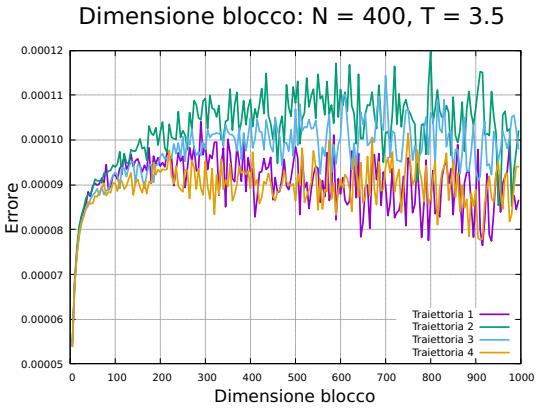
Figura 232: $T = 1.0$ Figura 233: $T = 1.5$ Figura 234: $T = 2.0$ Figura 235: $T = 2.5$ Figura 236: $T = 3.0$ Figura 237: $T = 3.5$

Figura 238: Studio della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 2D costituito da 400×400 spin.

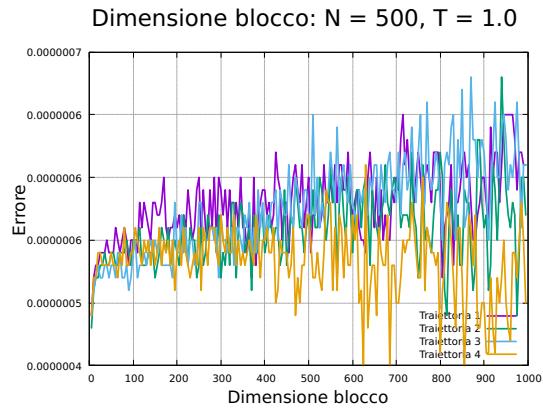
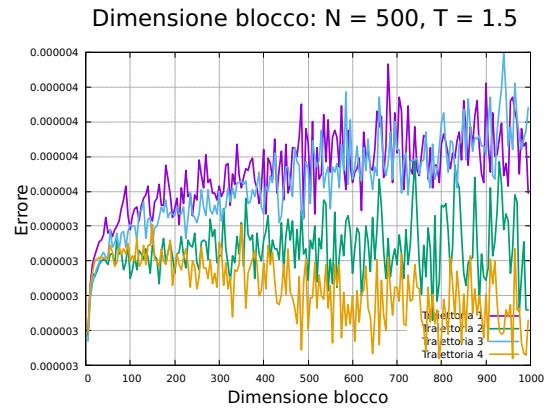
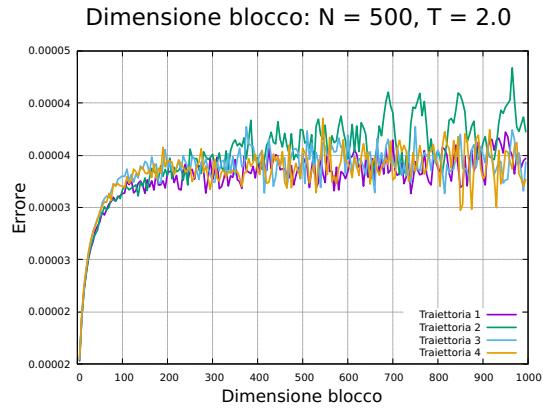
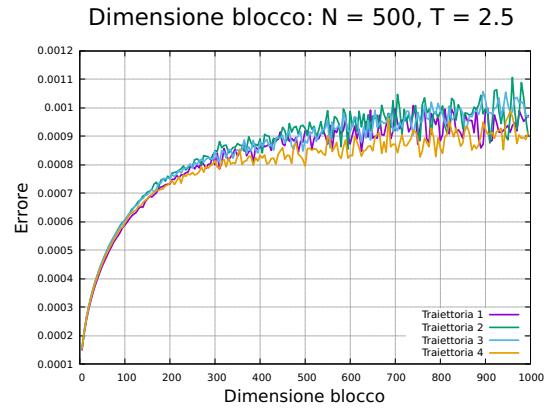
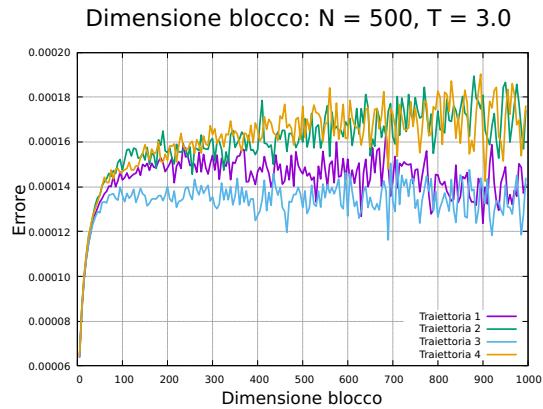
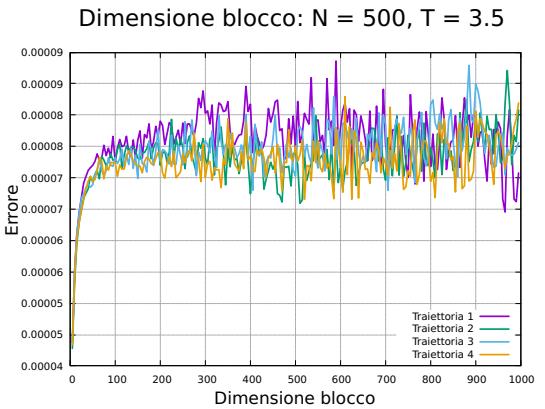
Figura 239: $T = 1.0$ Figura 240: $T = 1.5$ Figura 241: $T = 2.0$ Figura 242: $T = 2.5$ Figura 243: $T = 3.0$ Figura 244: $T = 3.5$

Figura 245: Studio della lunghezza dei blocchi per un modello di Ising 2D costituito da 500×500 spin.

Riferimenti bibliografici

- [1] Davide E. Galli, *Advanced Statistical Physics*, Università degli Studi di Milano, 2024.
- [2] Davide E. Galli, *Laboratorio di Simulazione Numerica*, Università degli Studi di Milano, 2023.
- [3] Metropolis, Nicholas and Rosenbluth, Arianna W. and Rosenbluth, Marshall N. and Teller, Augusta H. and Teller, Edward, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, The Journal of Chemical Physics, 1953
- [4] Melissa E. O'Neill, *PCG: A Family of Simple Fast Space-Efficient Statistically Good Algorithms for Random Number Generation*, Harvey Mudd College, 2014
- [5] M. E. J. Newman, G.T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, 1999