

Il modello di Ising

Autore: Filippo Negrini
Corso: Simulazione di Materia Condensata e Biosistemi
Università: Università degli Studi di Milano

10 gennaio 2025

Indice

1	Modello di Ising 1D	2
1.1	Teoria di campo medio	2
1.1.1	Magnetizzazione	3
1.1.2	Esponenti critici	4
1.2	Soluzione esatta	5
1.2.1	Magnetizzazione	6
1.2.2	Correlazioni fra spin	6
1.3	Simulazioni Monte-Carlo	7
1.3.1	Generatore di numeri casuali	8
1.3.2	Termalizzazione	9
1.3.3	Misure e Data-Blocking	9

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.

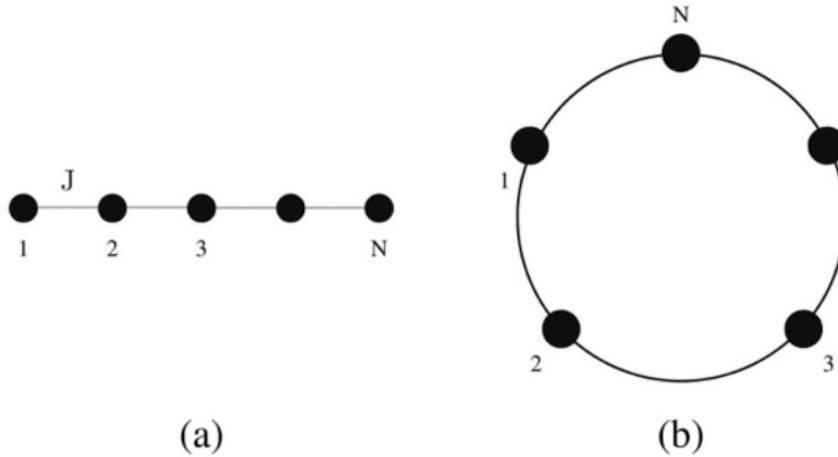


Figura 1: L'immagine (a) è un esempio di modello di Ising 1D senza pbc, mentre in (b) si può apprezzare come la catena si chiuda su se stessa nel caso di condizioni periodiche al contorno.

Sebbene il modello di Ising 1D ammetta soluzione esatta, è istruttivo lavorare inizialmente con una teoria di campo medio, in cui il termine d'interazione presente nell'Hamiltoniana viene sostituito da un termine efficace (di campo medio appunto), andando a trascurare le fluttuazioni degli spin.

1.1 Teoria di campo medio

Il punto di partenza di una teoria di campo medio è la semplificazione del termine 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 risulti 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 il numero di primi vicini per la geometria presa in considerazione. L'energia libera per particella è data da

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

da cui è possibile ricavare tutta la termodinamica del sistema.

1.1.1 Magnetizzazione

La magnetizzazione si ricava a partire dall'energia libera per spin mediante una derivata rispetto al campo magnetico h . 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. Così facendo risulta evidente che quando $T > T_c$ l'unica soluzione possibile dell'equazione (1.5) è $m = 0$, ossia mancanza di magnetizzazione finita. 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, poichè 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.

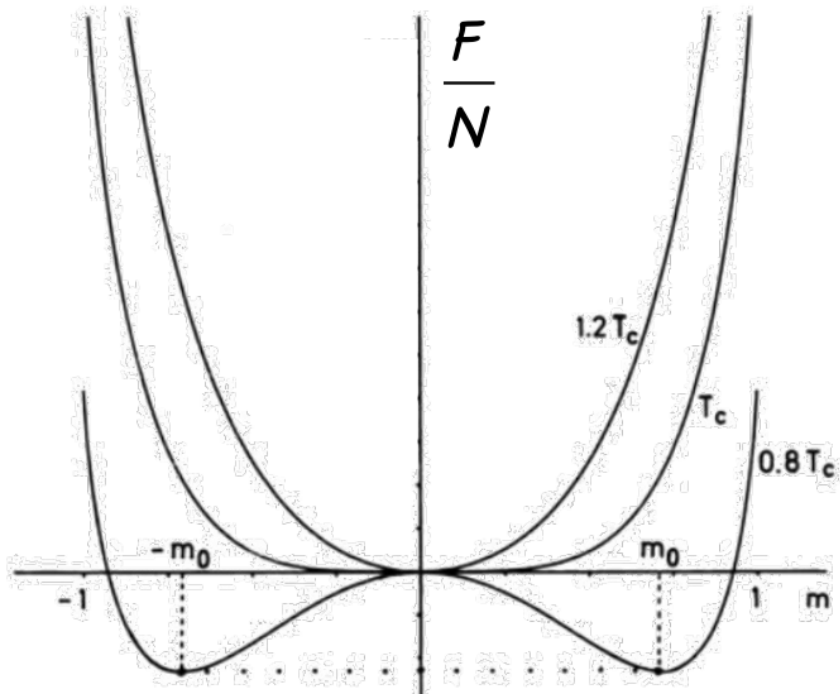


Figura 2: Energia libera per particella al variare della temperatura del sistema. Quando la temperatura è maggiore o uguale di quella critica è presente un solo minimo in $m = 0$, mentre al di sotto sono presenti due minimi globali equivalenti e simmetrici rispetto ad $m = 0$, che è un massimo locale.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

1.1.2 Esponenti critici

E' possibile caratterizzare il comportamento di un certo sistema nell'intorno del punto critico in termini di leggi di potenza che presentano un set di esponenti critici. La seguente analisi è rivolta a

Esponente	Significato fisico
α	Descrive l'andamento del calore specifico al punto critico
β	Descrive l'andamento del parametro d'ordine al punto critico
γ	Descrive 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

$$m = \tanh\left(m \frac{T_c}{T}\right) \simeq m \frac{T_c}{T} - \frac{m^3}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \quad (1.7)$$

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

$$m \simeq \sqrt{3 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)}, \quad (1.8)$$

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

$$m = \tanh\left(\frac{h}{k_B T} + m \frac{T_c}{T}\right) \simeq \frac{h}{k_B T} + m \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3} \left(\frac{h}{k_B T} + m \frac{T_c}{T}\right)^3 \quad (1.9)$$

che porta all'equazione di stato approssimata

$$\frac{h}{k_B T} = m \frac{T - T_c}{T} + 3m^3. \quad (1.10)$$

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

$$m \simeq \left(\frac{3h}{k_B T_c}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (1.11)$$

che di conseguenza consente di identificare come $\delta = 3$.

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 come

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}), \quad (1.12)$$

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

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left\{ \beta \left[J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right\} \quad (1.13)$$

Definendo una matrice P come

$$P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

è possibile riscrivere la funzione di partizione in termini matriciali

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle \sigma_1 | P | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | P | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_{N-1} | P | \sigma_N \rangle \langle \sigma_N | P | \sigma_1 \rangle \quad (1.15)$$

Notando che sono presenti $N - 1$ completezze, è possibile procedere ad una semplificazione estrema della relazione (1.15) che consente di apprezzare come la funzione di partizione altro non sia che la traccia della matrice P elevata alla N.

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle \sigma_1 | P^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr}(P^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \quad (1.16)$$

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

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h)}. \quad (1.17)$$

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

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N = 0. \quad (1.18)$$

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

$$A(h, T) = -k_B T \ln [Q(h, T)] \simeq -N k_B T \ln(\lambda_1). \quad (1.19)$$

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

$$m = - \left(\frac{\partial A/N}{\partial h} \right)_T = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta h)}} \quad (1.20)$$

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.

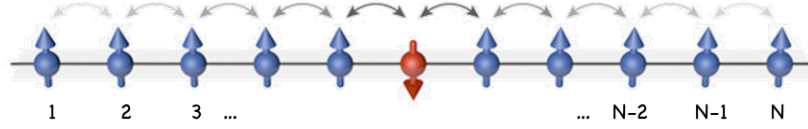


Figura 3: Esempio di catena di spin per la determinazione della funzione di correlazione fra due spin. Immagine da [1].

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

$$G_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (1.21)$$

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

$$G_{i,i+r} = (\tanh \beta J)^r. \quad (1.22)$$

Dall'equazione (1.22) 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.

$$G_{i,i+r} = e^{r[\ln(\tanh \beta J)]} = e^{-r/\xi}, \quad (1.23)$$

da cui risulta che la lunghezza di correlazione è pari a

$$\xi = -\frac{1}{\ln[\tanh(J/k_B T)]}. \quad (1.24)$$

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 $T \neq 0$.

1.3 Simulazioni Monte-Carlo

L'obiettivo di questa sezione è l'introduzione di delle tecniche Monte-Carlo che consentano di simulare un modello di Ising mono-dimensionale con numero di costituenti finito e che presenti condizioni periodiche al contorno, in modo tale che gli spin posti agli estremi della catena 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 della qualità dei risultati. Dopo aver definito una condizione iniziale, che solitamente sono quella a temperatura nulla, con tutti gli spin allineati, oppure quella a temperatura infinita caratterizzata da momenti magnetici orientati casualmente, il primo passo è quello di generare una nuova configurazione tentando di invertire uno spin. 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

$$A(\nu | \mu) = \min \left[1, e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \right] \quad (1.25)$$

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 ed il nuovo elemento della catena di Markov generata dall'algoritmo di Metropolis è identico a quello precedente. In seguito è possibile osservare l'implementazione di tale algoritmo in Nim: lo stesso calcolo viene eseguito nuovamente ad ogni iterazione, scegliendo lo spin di cui provare il flip in modo casuale.

1.3.1 Generatore di numeri casuali

Dato che i metodi Monte-Carlo sono una classe di algoritmi numerici che sfruttano i numeri pseudo-casuali, è auspicabile lavorare con un generatore dotato di un lungo periodo (i numeri generati non si ripetono spesso) e che sia efficiente, in modo da ridurre 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

```

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. Sebbene l'implementazione del PCG sia riportata nella sezione relativa al modello di Ising mono-dimensionale, tale algoritmo è stato utilizzato anche per l'Ising 2D.

1.3.2 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 scorre 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.

1.3.3 Misure e Data-Blocking

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 mosse da effettuare per passare da uno stato ad un secondo 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

$$\chi(t) = \frac{\langle m(t') m(t' + t) \rangle_{t'} - \langle m \rangle^2}{\sigma_m^2} \quad (1.26)$$

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

$$\chi(t) \sim e^{-t/t_c}. \quad (1.27)$$

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 $t = t_c$ in modo che il numero di misure significative in una simulazione di durata t_{max} è pari a

$$n = \frac{t_{max}}{2t_c}. \quad (1.28)$$

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 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 4 è presentata visivamente la tecnica del data-blocking. Le quantità g_i sono le medie di ciascun gruppo.

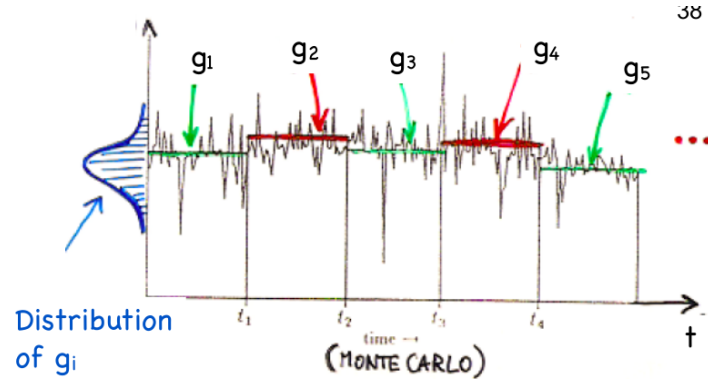


Figura 4: Esempio di applicazione della tecnica del data-blocking. Immagine da [2].

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

$$\sigma_{\langle g \rangle} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left(\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2 \right)} \quad (1.29)$$

tende a quello puramente statistico (poichè si va a perdere la correlazione fra le stime) e dopo una certa lunghezza L dei blocchi non aumenta più, ma 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 (ossia più lunga è la simulazione), migliore sarà la stima finale della osservabile d'interesse.

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