



# Il modello di Ising

Simulazione di Materia Condensata e Biosistemi

Filippo Negrini (Matricola: 47127A)





# Table of Contents

## 1 Introduzione

- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY

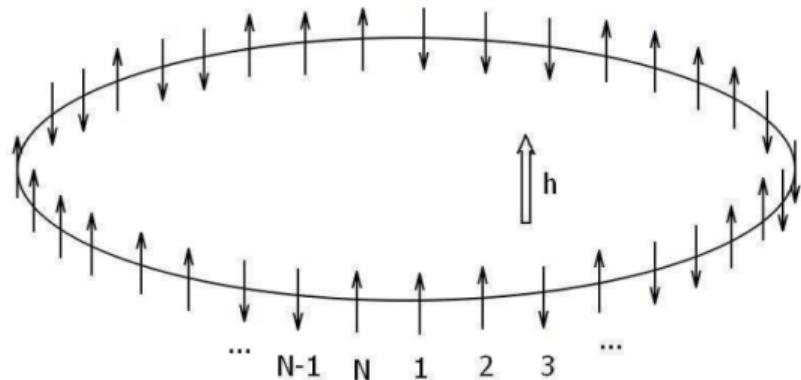


# Hamiltoniana

## 1 Introduzione

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

- ◊ Interazione fra primi vicini
- ◊ Accoppiamento con un campo esterno



Modello di Ising 1D con condizioni periodiche.



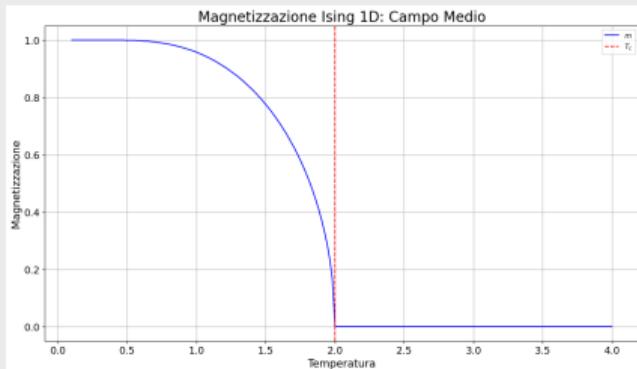
# Modello di Ising 1D

## 1 Introduzione

### Campo medio

- ◊ Transizione di fase a  $T_c \neq 0$

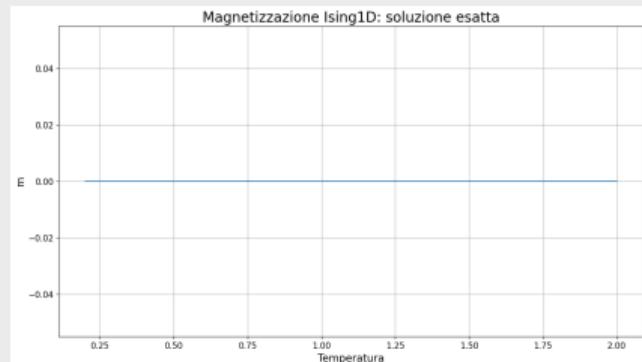
$$m = \tanh [\beta (h + Jn_{nn}m)]$$



### Soluzione analitica

- ◊ No magnetizzazione se  $T \neq 0, h = 0$

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



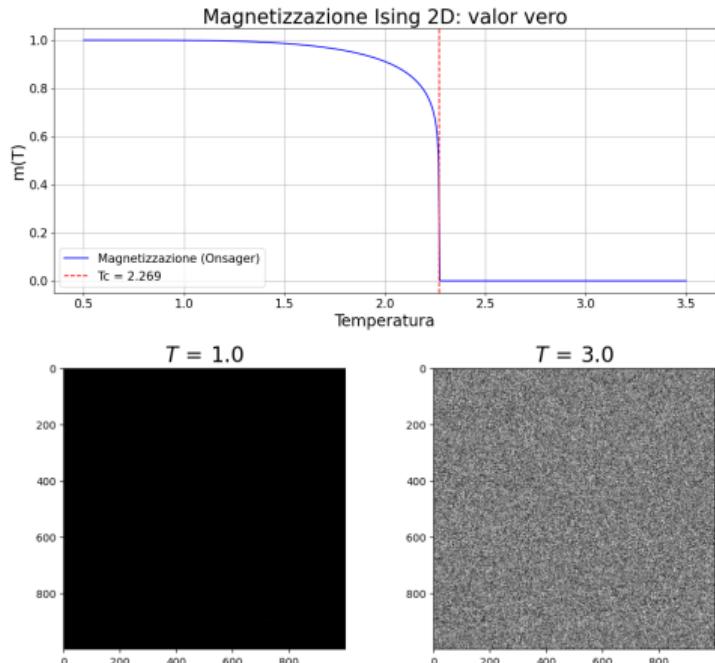


# Modello di Ising 2D

## 1 Introduzione

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

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





# Modello XY

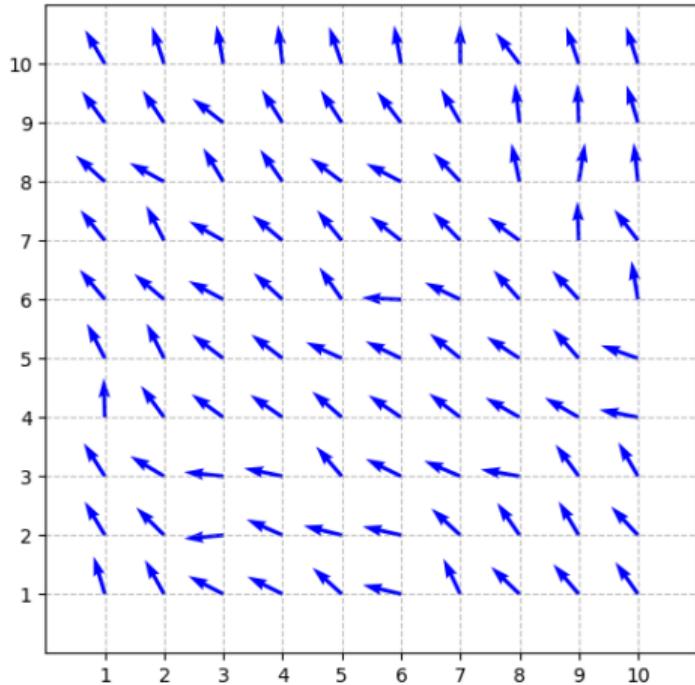
## 1 Introduzione

### Hamiltoniana

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \sum_i \vec{h} \cdot \vec{s}_i$$

- ◊ Simmetria continua
- ◊ Difetti topologici (vortici)

Modello XY





# Table of Contents

## 2 Metodi numerici

- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY

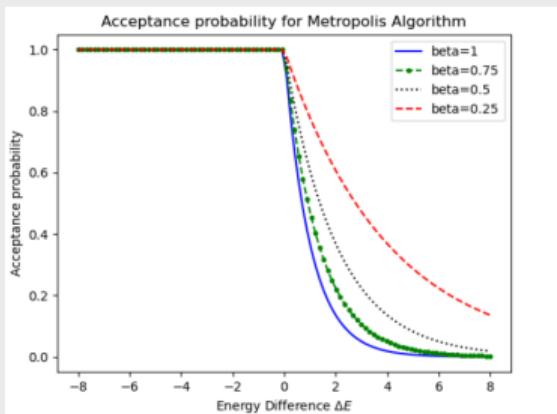


# Metropolis vs Wolff

## 2 Metodi numerici

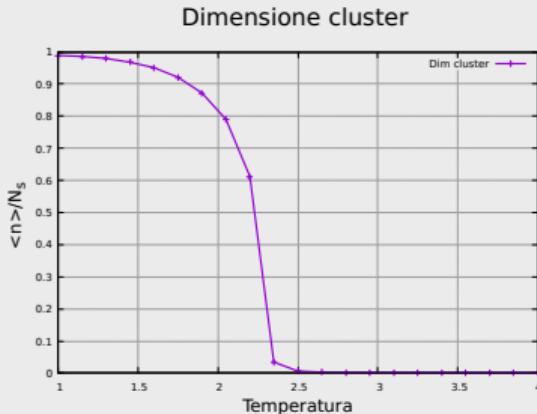
### Metropolis

- ◊ Tentata inversione di un singolo spin
- ◊  $A(\nu | \mu) = \min [1, e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}]$
- ◊ Ottimo per  $T \ll T_c$  oppure  $T \gg T_c$



### Wolff

- ◊ Algoritmo di clustering
- ◊  $P_{add} = 1 - \exp(-2\beta J)$
- ◊ Ottimo per  $T \simeq T_c$

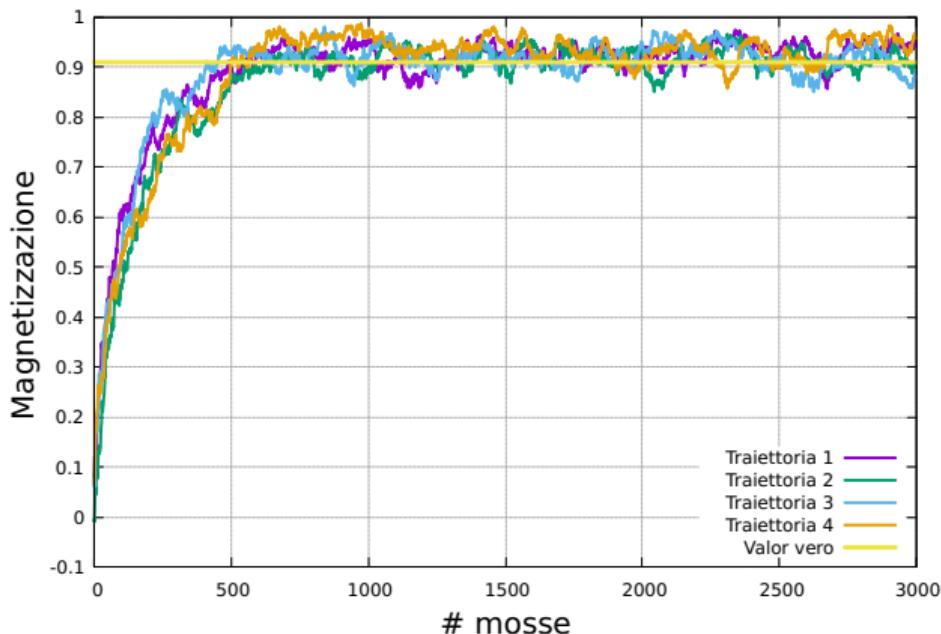




# Termalizzazione

2 Metodi numerici

Termalizzazione: 3000 spin,  $T = 0.5$



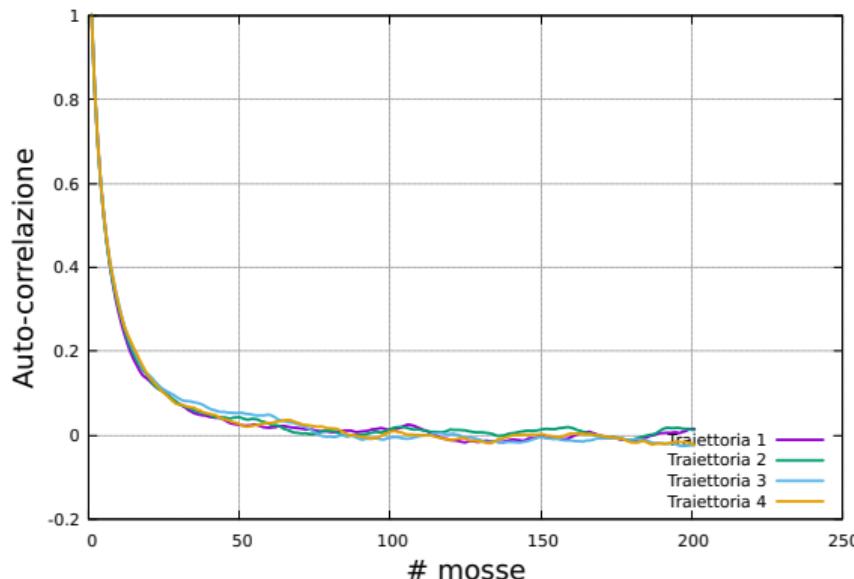
- ◊ Giungere all'equilibrio termodinamico
- ◊ Attenzione a stati metastabili
- ◊ Dipendenza dalla condizione iniziale



# Auto-correlazione

2 Metodi numerici

Autocorrelazione m: N = 500, T = 2.0



Autocorrelazione per modello di Ising 2D.

## Definizione

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

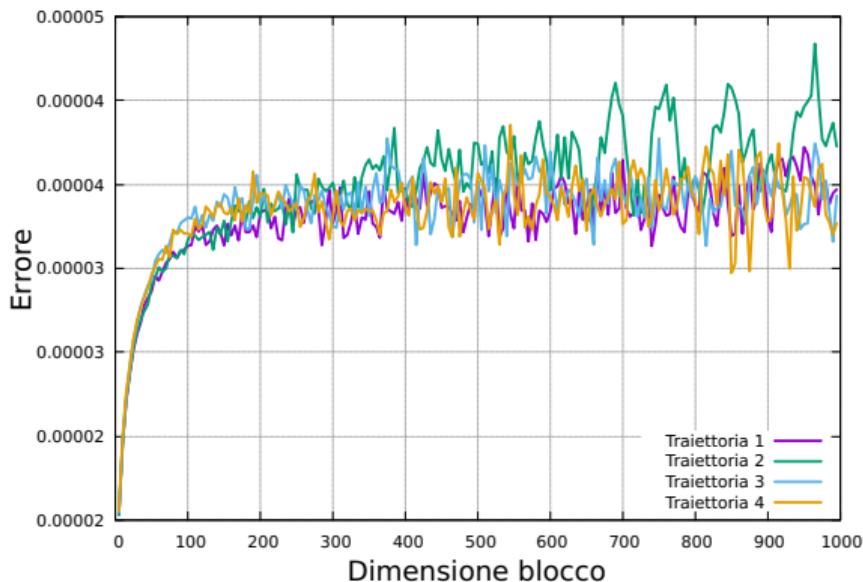
- ◊  $\chi(t) \propto e^{-t/t_c}$
- ◊ Indipendenza statistica fra configurazioni
- ◊  $n_{max} = \frac{t_{max}}{2t_c}$



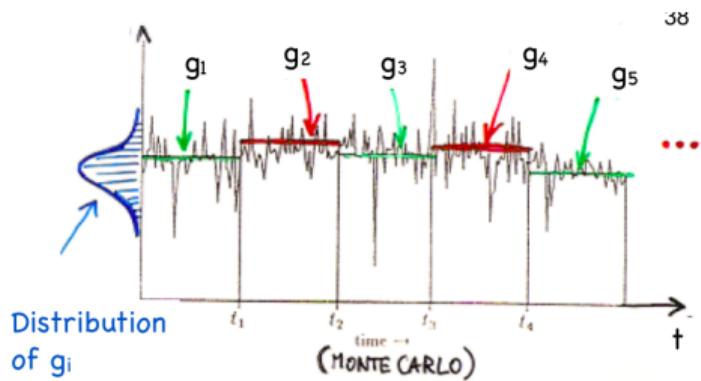
# Data-blocking

## 2 Metodi numerici

Dimensione blocco:  $N = 500$ ,  $T = 2.0$



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



- ◊ Dati raggruppati in blocchi
- ◊ Errore satura quando raggiunta  $l_{lim}$



# Table of Contents

## 3 Simulazioni modello di Ising 1D

- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY

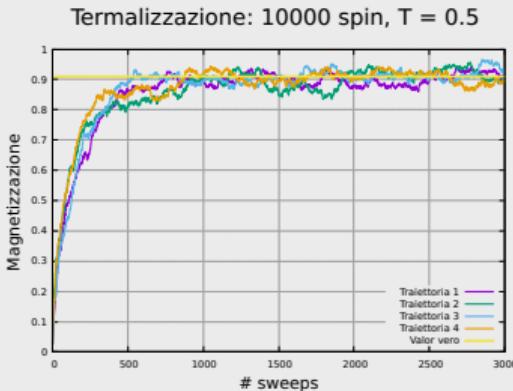


# Caratterizzazione

## 3 Simulazioni modello di Ising 1D

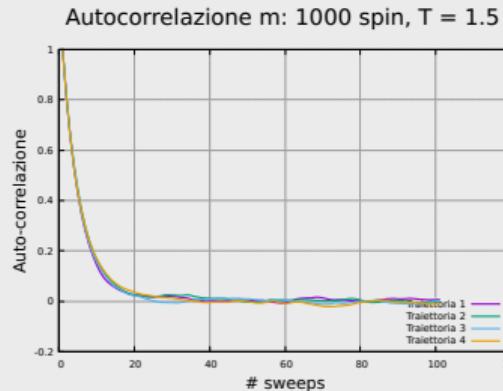
### Termalizzazione

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



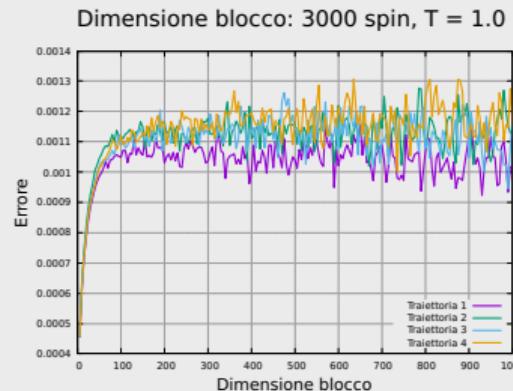
### Auto-correlazione

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



### Blocchi

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

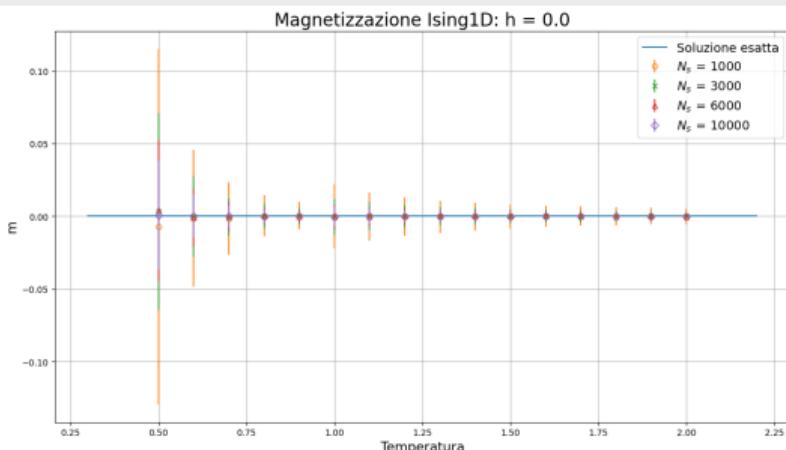




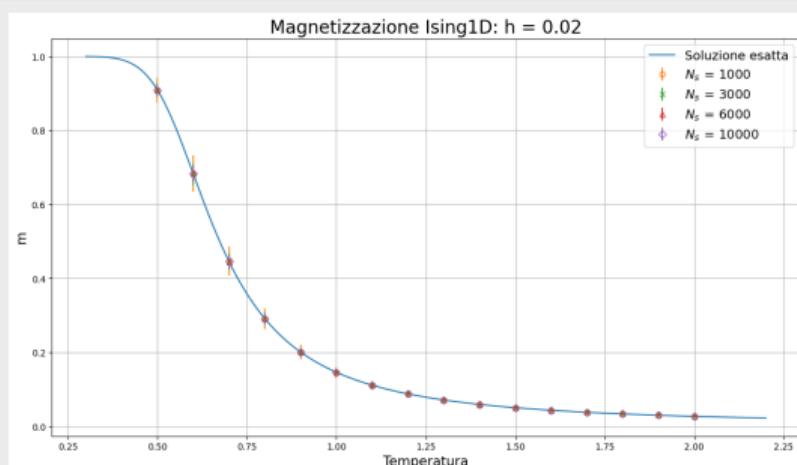
# Magnetizzazione

## 3 Simulazioni modello di Ising 1D

$$h = 0.0$$



$$h = 0.02$$



◊  $m = 0$  per ogni  $T \neq 0$

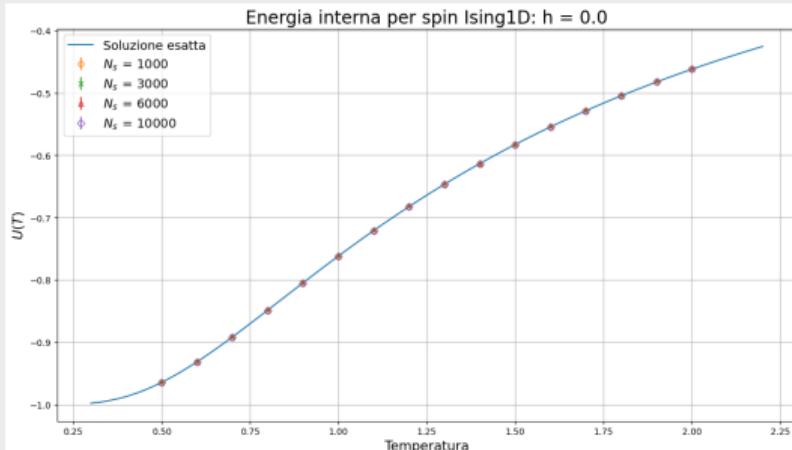
◊ campo magnetico impone ordine



# Energia interna

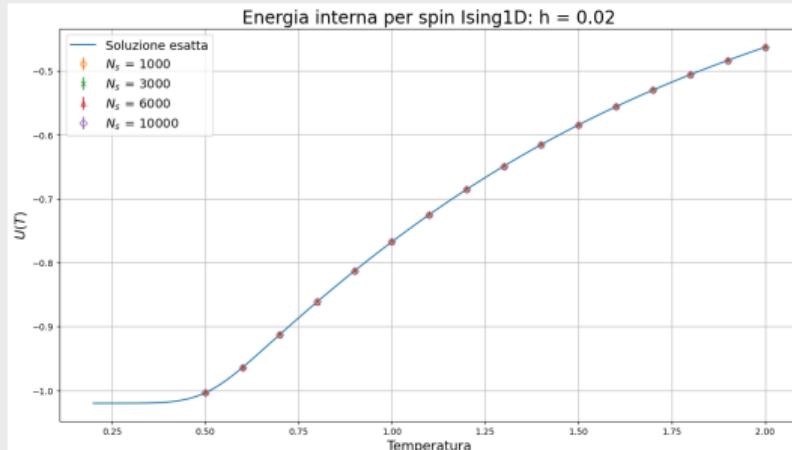
## 3 Simulazioni modello di Ising 1D

$$h = 0.0$$



◊ per  $T \rightarrow 0$  l'energia  $U(T) \rightarrow -1$

$$h = 0.02$$



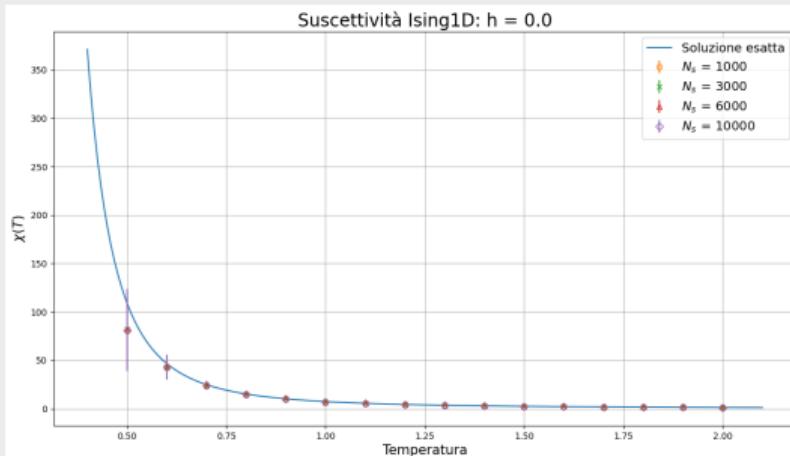
◊ per  $T \rightarrow 0$  l'energia  $U(T) \rightarrow -1.02$



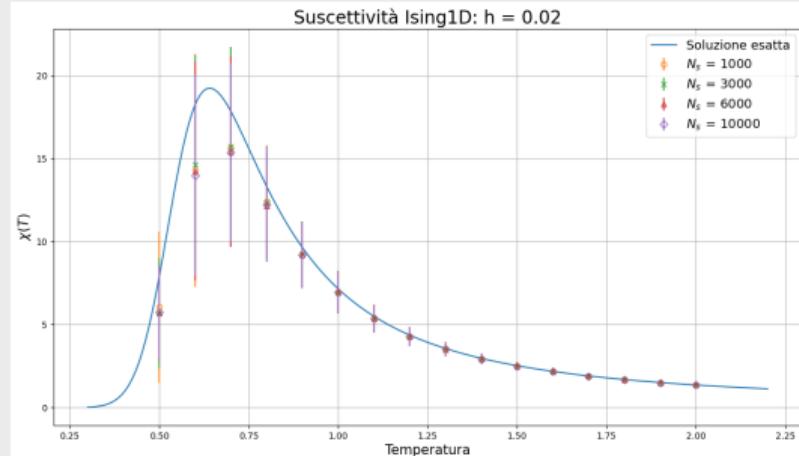
# Suscettività magnetica

## 3 Simulazioni modello di Ising 1D

$h = 0.0$



$h = 0.02$



◊ aumento per  $T \rightarrow 0$  perchè  $T_c = 0$

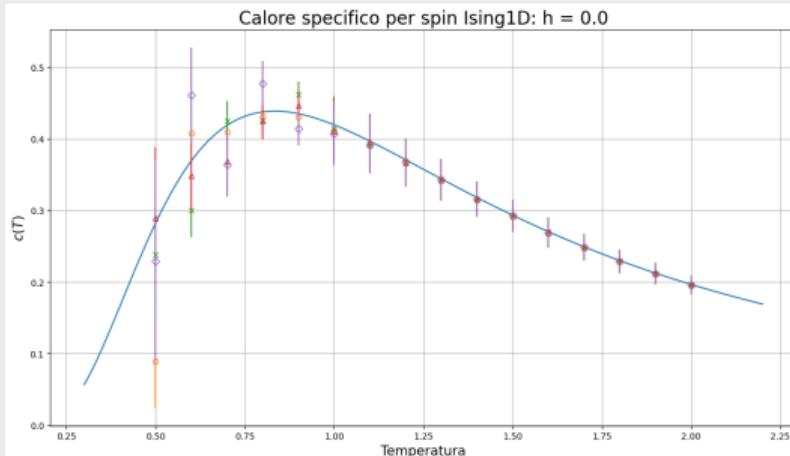
◊ picco a  $T \neq 0$  dovuto ad  $h$



# Calore specifico

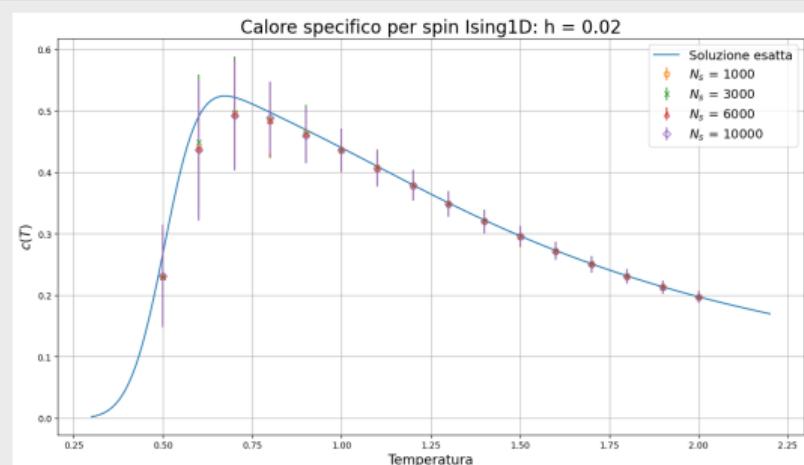
## 3 Simulazioni modello di Ising 1D

$h = 0.0$



◊ difficoltà a studiare il picco

$h = 0.02$



◊ campo magnetico semplifica lo studio



# Table of Contents

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D

- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY

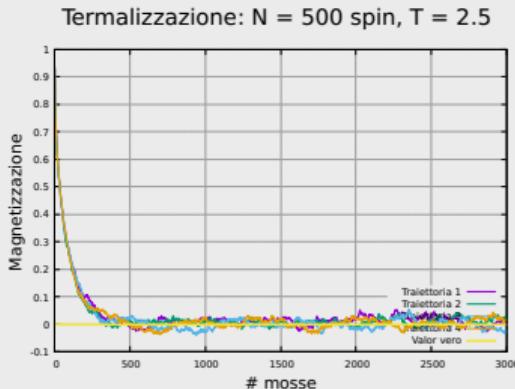


# Caratterizzazione con metropolis

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D

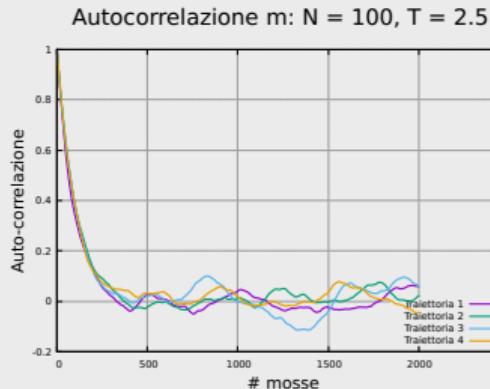
### Termalizzazione

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



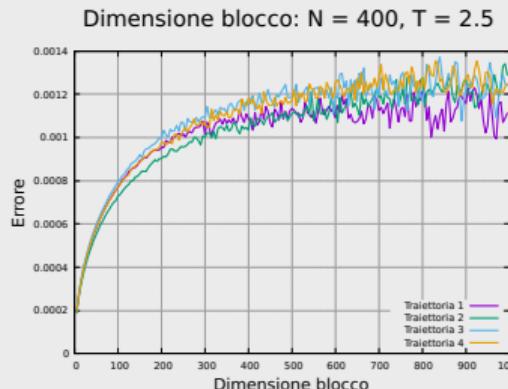
### Auto-correlazione

- ◊  $t_c$  maggiori per  $T \simeq T_c$
- ◊  $t_c^{max} \simeq 400$  sweeps



### Blocchi

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





# Caratterizzazione con Wolff

4 Simulazioni modello di Ising 1D

Termalizzazione

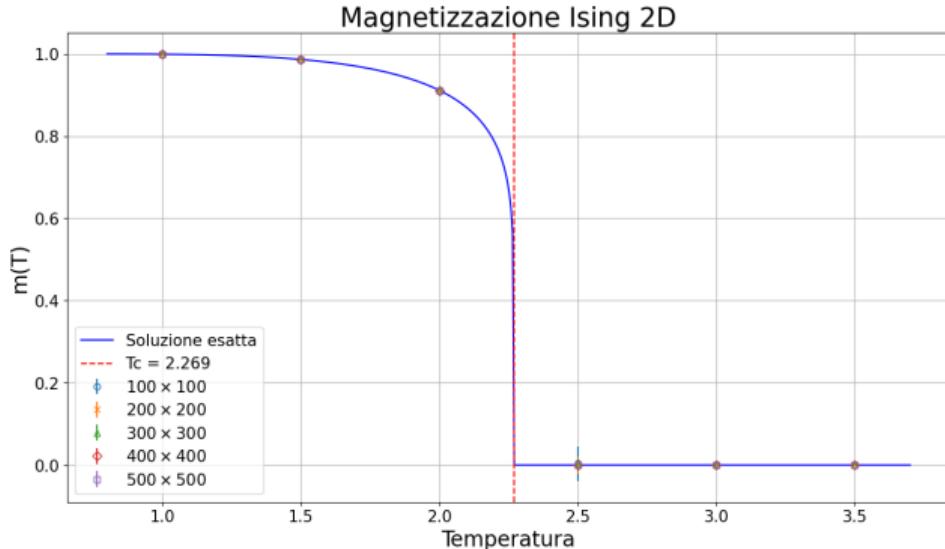
Auto-correlazione

Blocchi



# Magnetizzazione

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D



$T_c$

Ferromagnetico

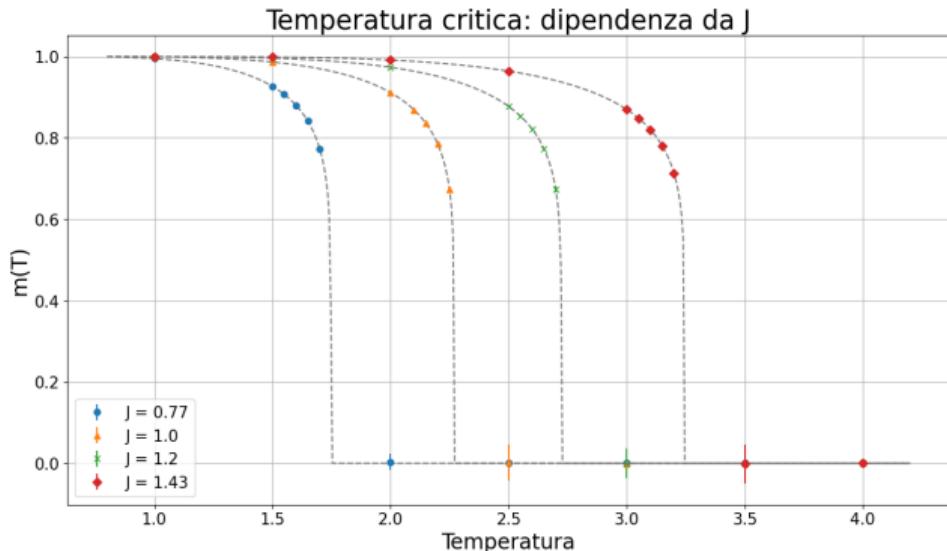
Paramagnetico

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



# Dipendenza da $J$

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D

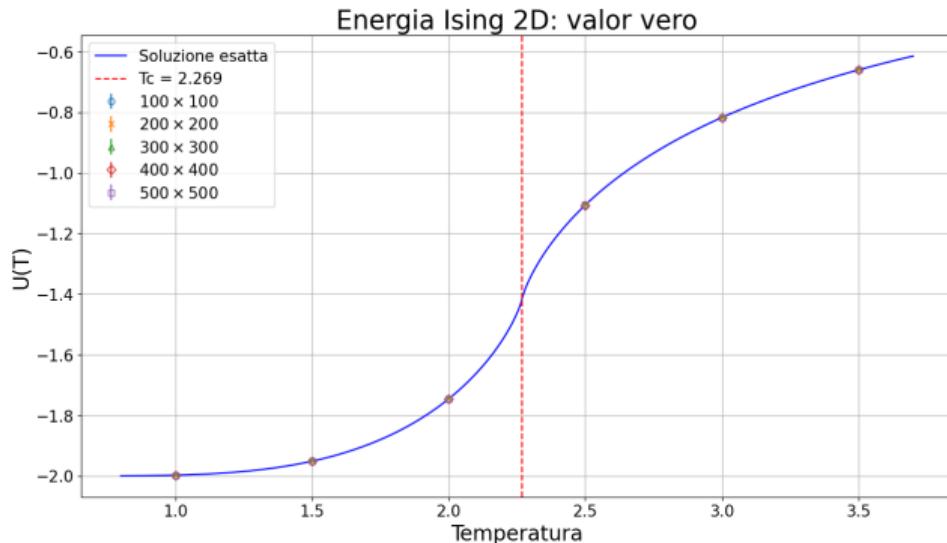


- ◊ Aumenta  $J$ , aumenta  $T_c$
- ◊ Presenza o meno di ordine dipende dall'intensità dell'interazione



# Energia

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D



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

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



# Calore specifico

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D



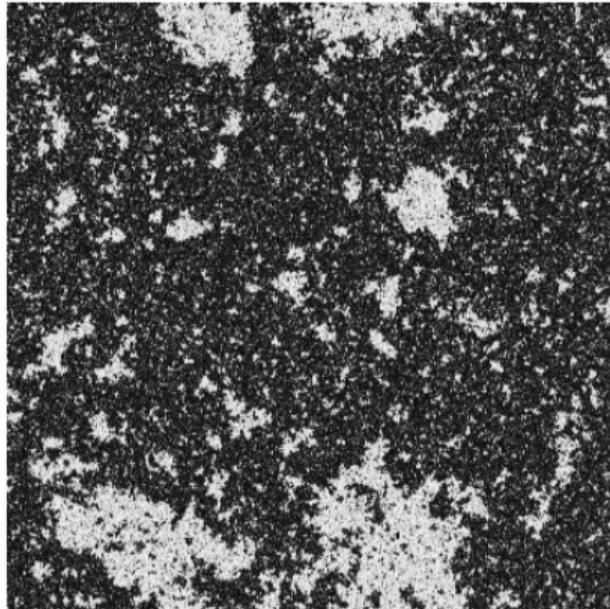
# Suscettività

4 Simulazioni modello di Ising 1D

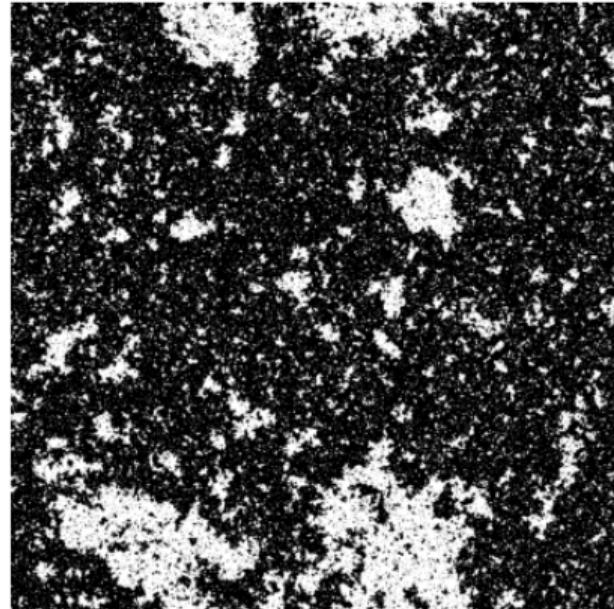


# Coarse graining

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D



CG →



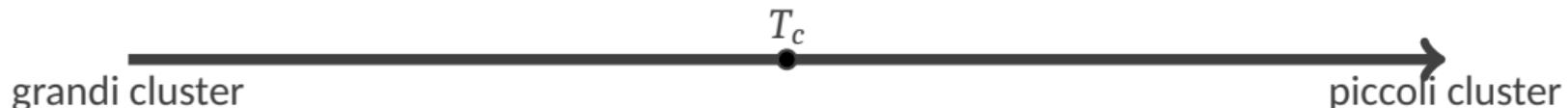


# Dimensioni cluster

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D



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





# Esponenti critici

## 4 Simulazioni modello di Ising 1D



# Table of Contents

## 5 Modello XY

- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY



# Caratterizzazione

5 Modello XY

Termalizzazione

Auto-correlazione

Blocchi

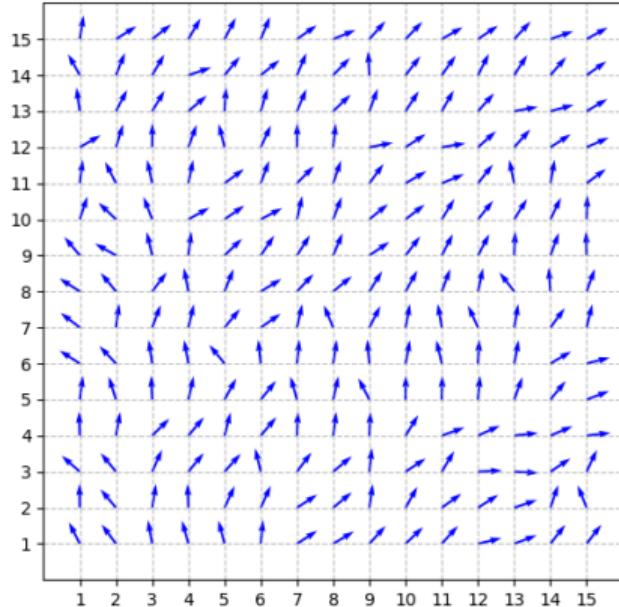


# Configurazioni

5 Modello XY

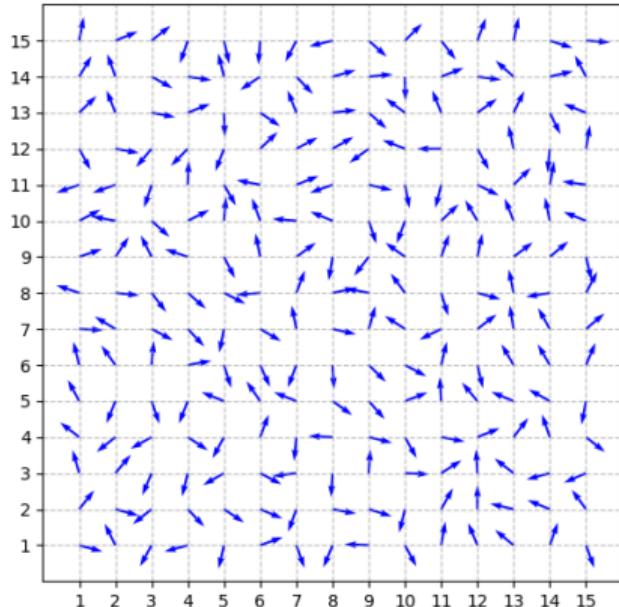
## Bassa temperatura

Modello XY:  $T = 0.5$



## Alta temperatura

Modello XY:  $T = 2.5$





# Vortice

## 5 Modello XY

- ◊ Winding number  $w = 1$
- ◊ Transizione di Kosterlitz-Thouless

$$T_c = \frac{\pi J}{2}$$



# Osservabili

## 5 Modello XY

Energia

Magnetizzazione



# Table of Contents

## 6 Conclusioni

- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY



**Fine**

6 Conclusioni

Grazie per l'attenzione



# Table of Contents

## 7 Backup modello di Ising 1D

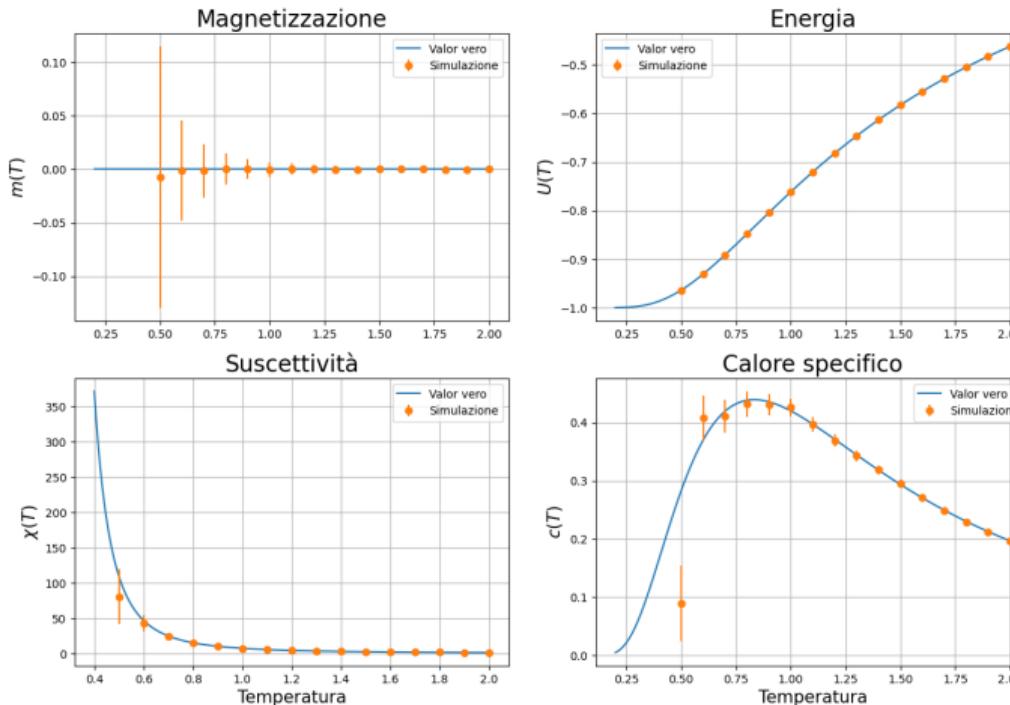
- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY



# Osservabili per $N_s = 1000$ , $h = 0.0$

7 Backup modello di Ising 1D

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

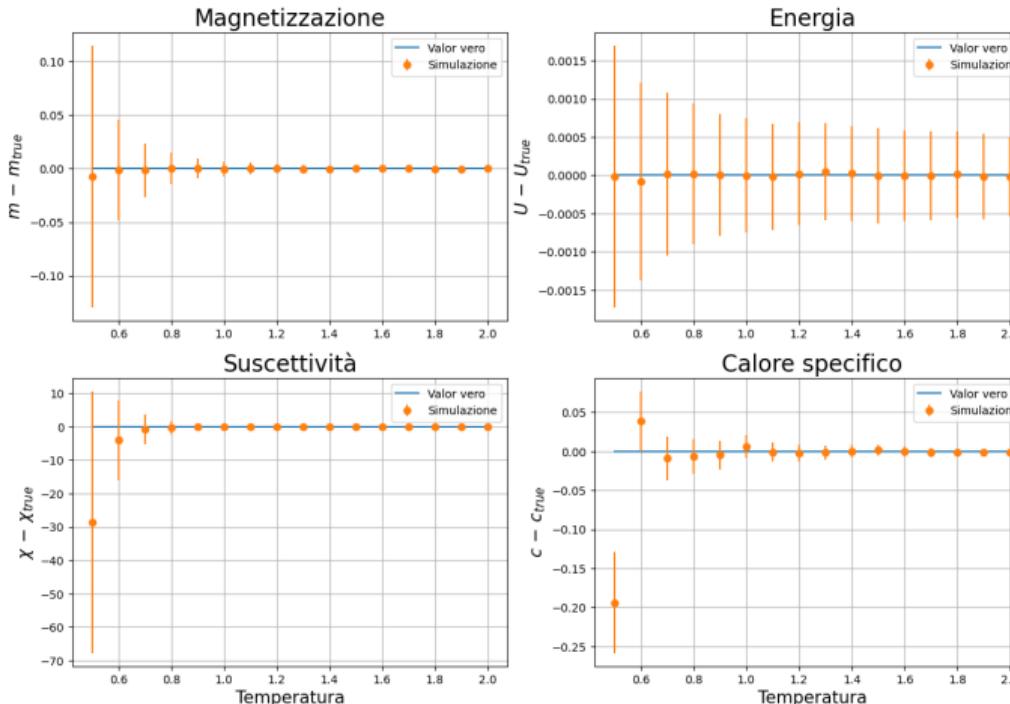




# Differenza dal valor vero per $N_s = 1000$ , $h = 0.0$

## 7 Backup modello di Ising 1D

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

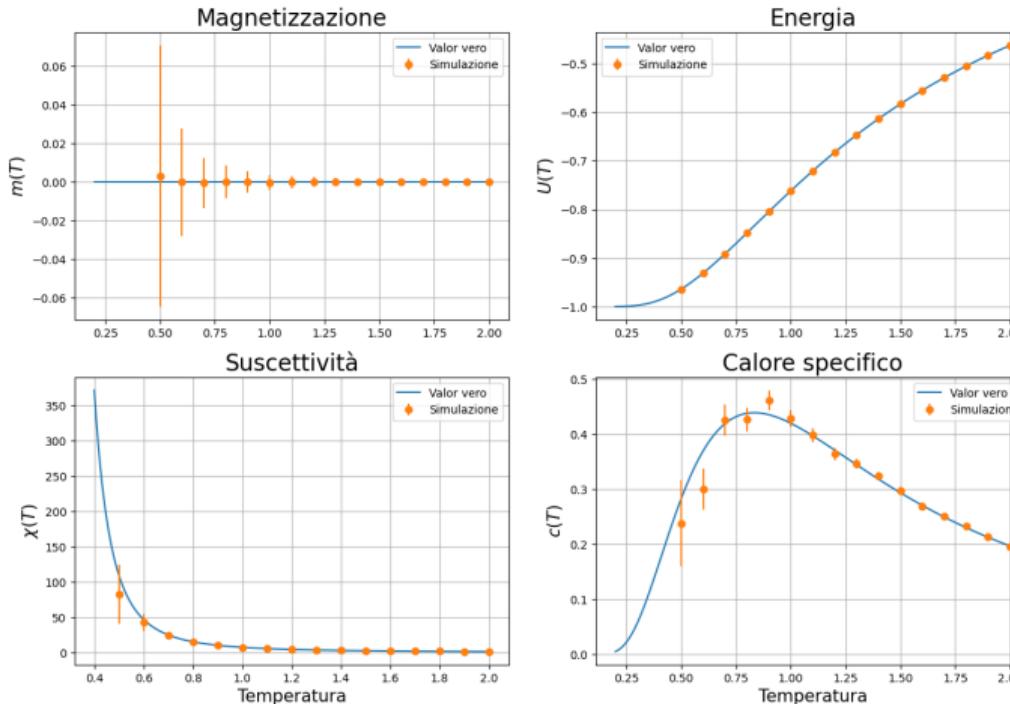




# Osservabili per $N_s = 3000$ , $h = 0.0$

7 Backup modello di Ising 1D

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

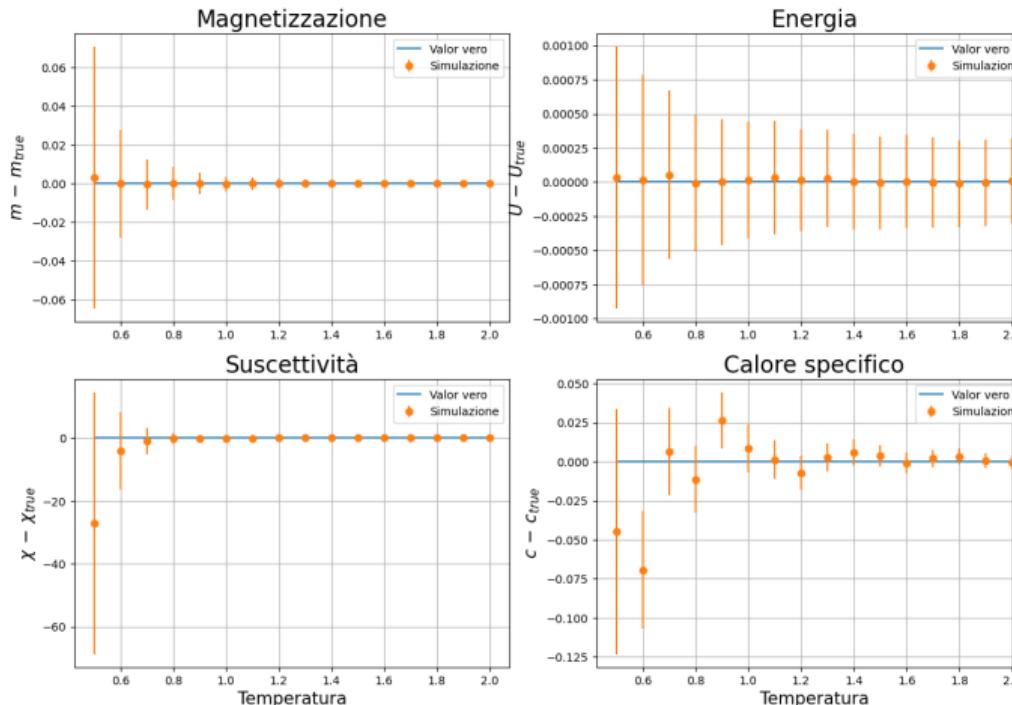




# Differenza dal valor vero per $N_s = 3000$ , $h = 0.0$

## 7 Backup modello di Ising 1D

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

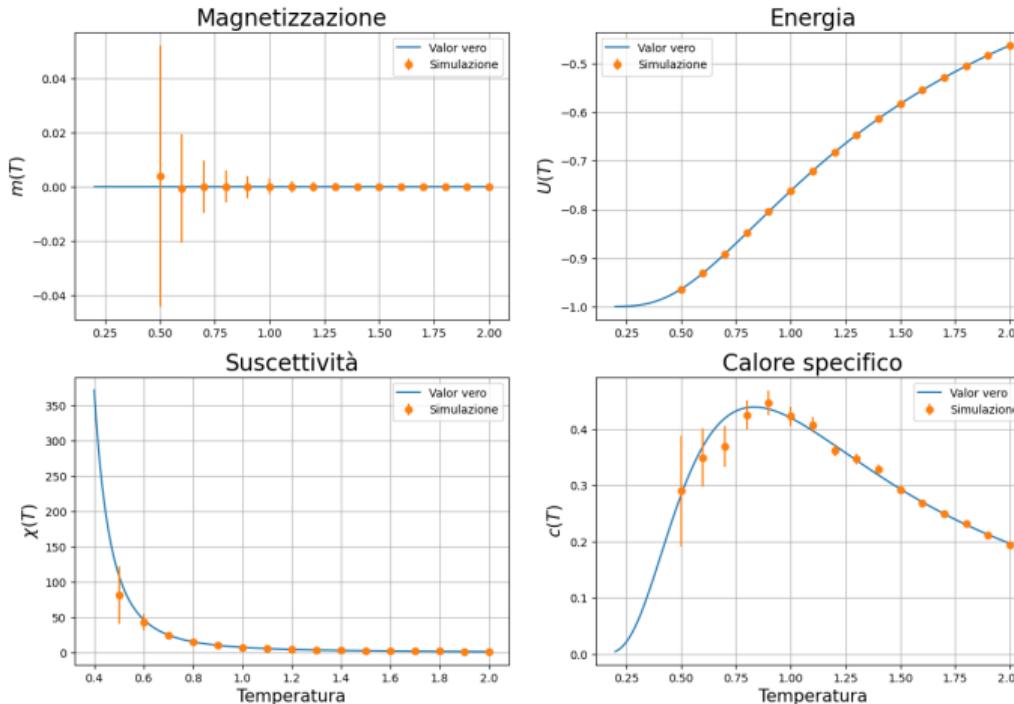




# Osservabili per $N_s = 6000$ , $h = 0.0$

7 Backup modello di Ising 1D

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

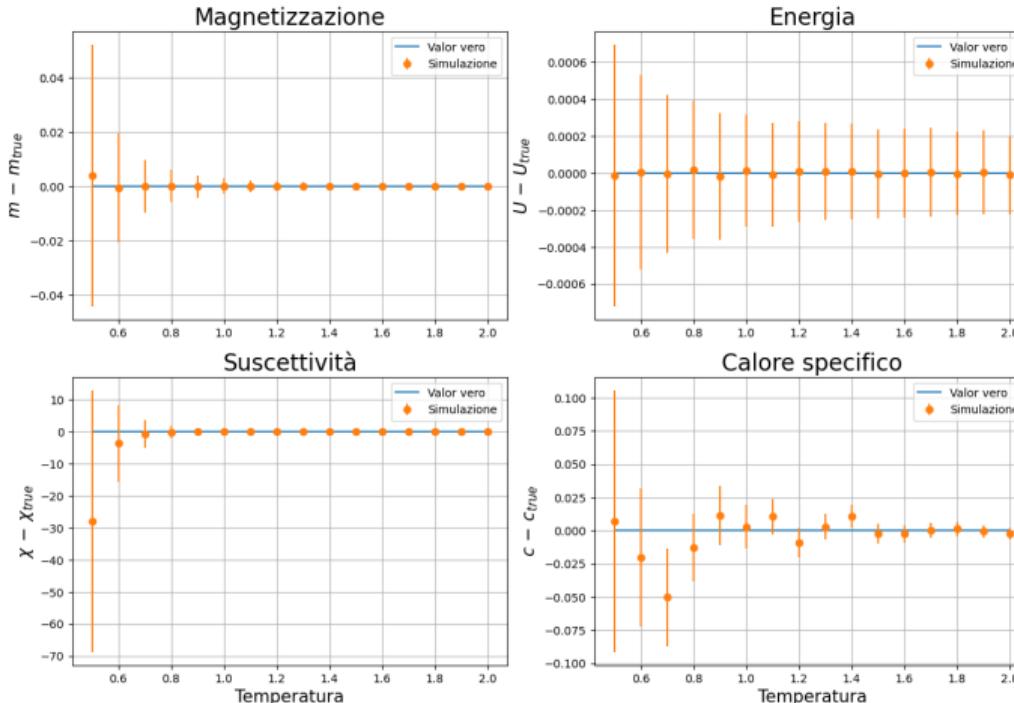




# Differenza dal valor vero per $N_s = 6000$ , $h = 0.0$

## 7 Backup modello di Ising 1D

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

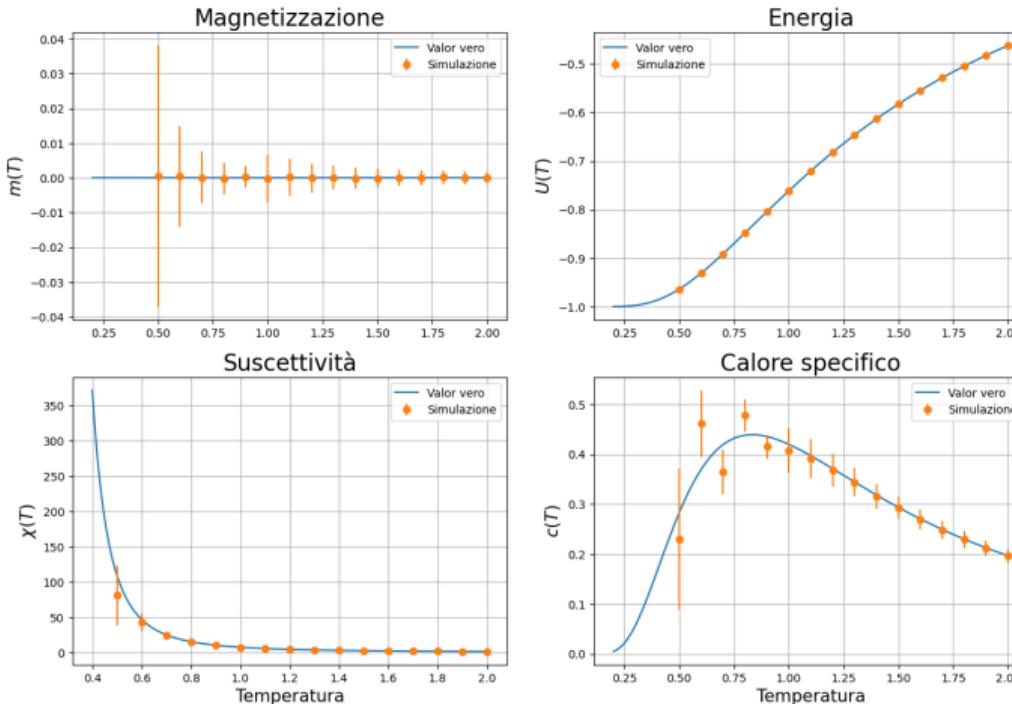




# Osservabili per $N_s = 10000$ , $h = 0.0$

7 Backup modello di Ising 1D

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

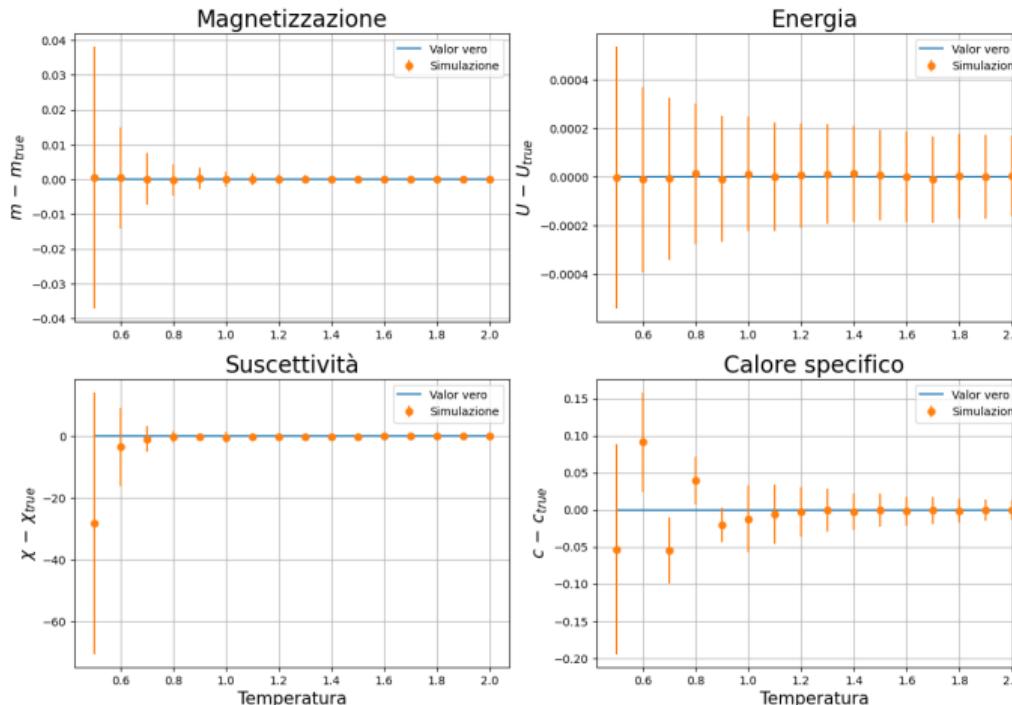




# Differenza dal valor vero per $N_s = 10000$ , $h = 0.0$

## 7 Backup modello di Ising 1D

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

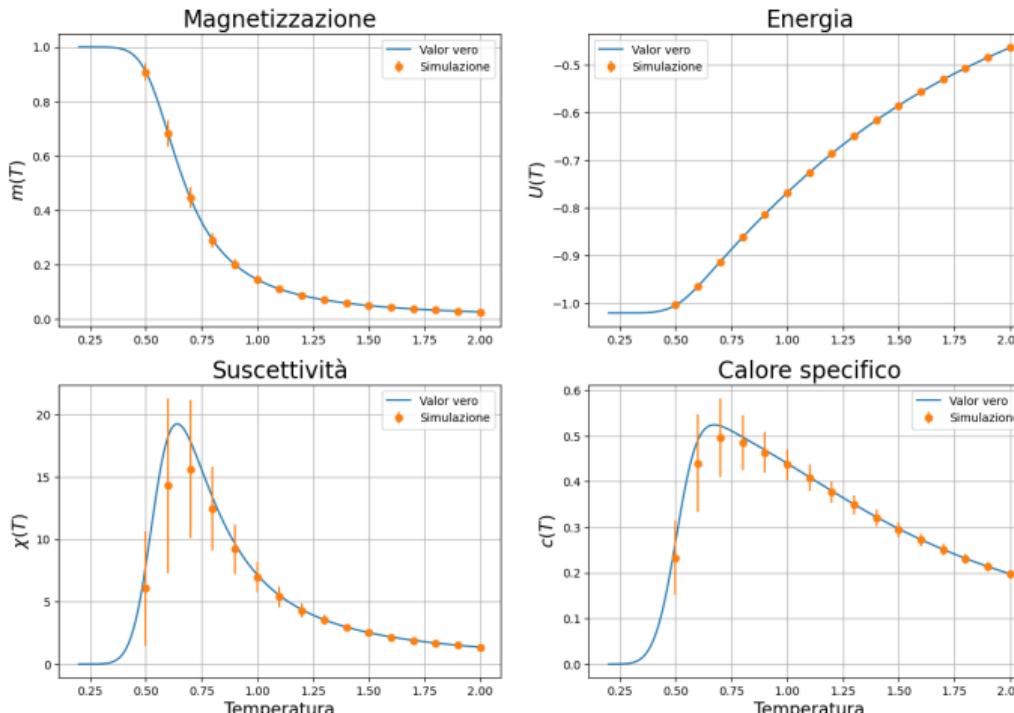




# Osservabili per $N_s = 1000$ , $h = 0.02$

7 Backup modello di Ising 1D

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

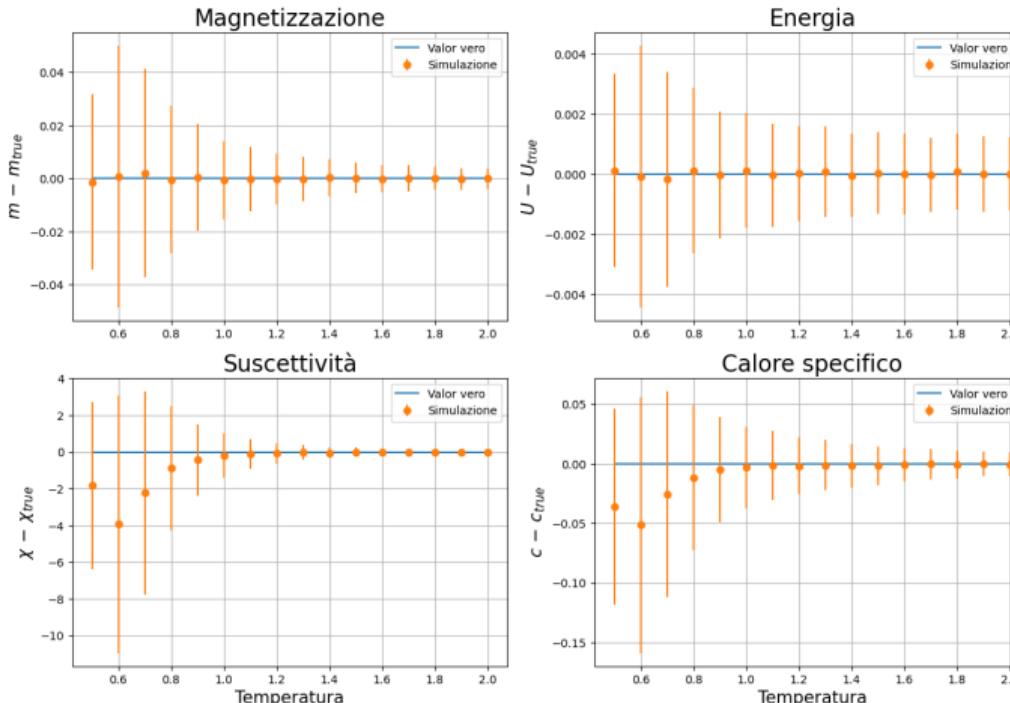




# Differenza dal valor vero per $N_s = 1000$ , $h = 0.02$

## 7 Backup modello di Ising 1D

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

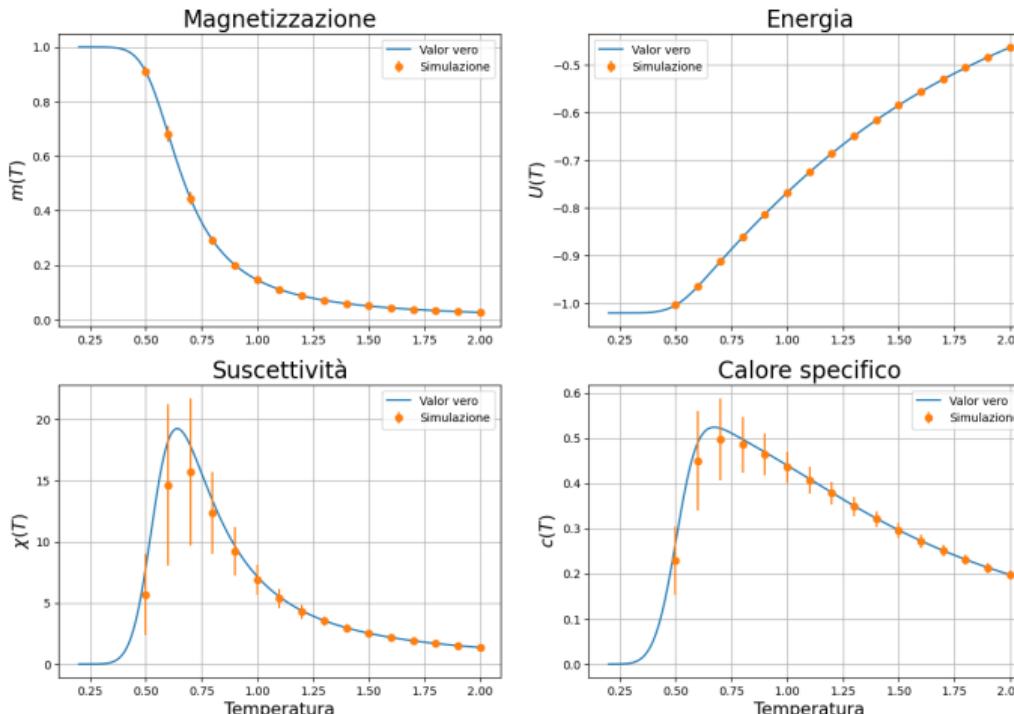




# Osservabili per $N_s = 3000$ , $h = 0.02$

7 Backup modello di Ising 1D

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

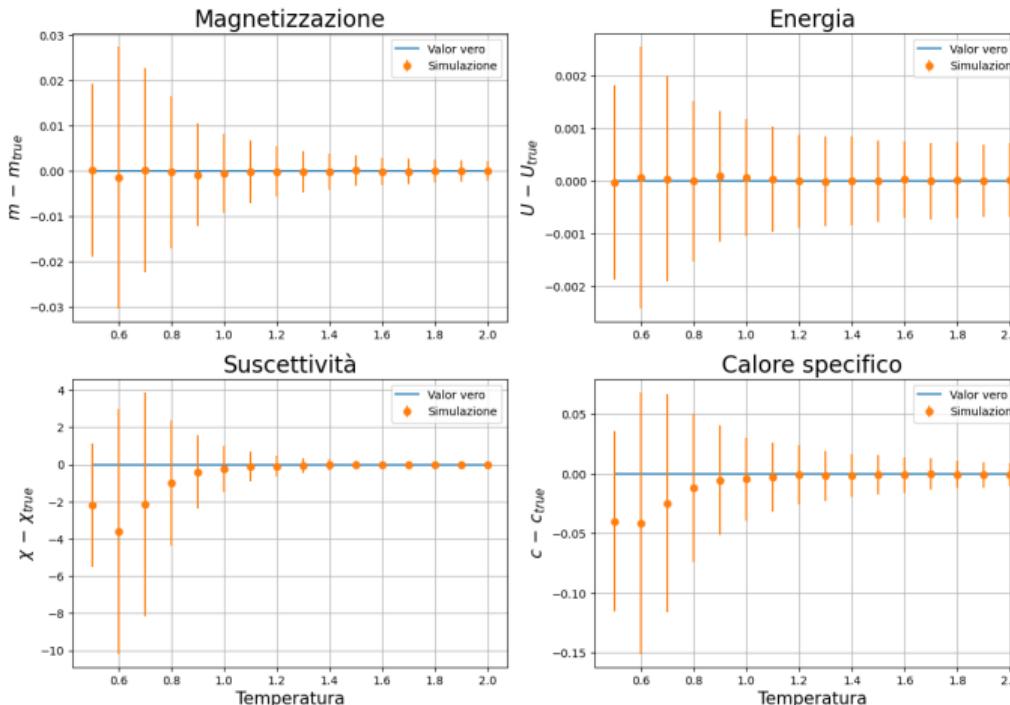




# Differenza dal valor vero per $N_s = 3000$ , $h = 0.02$

## 7 Backup modello di Ising 1D

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

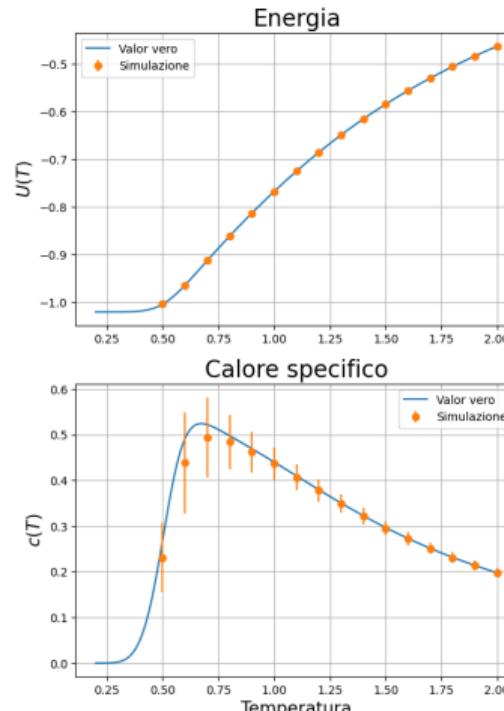
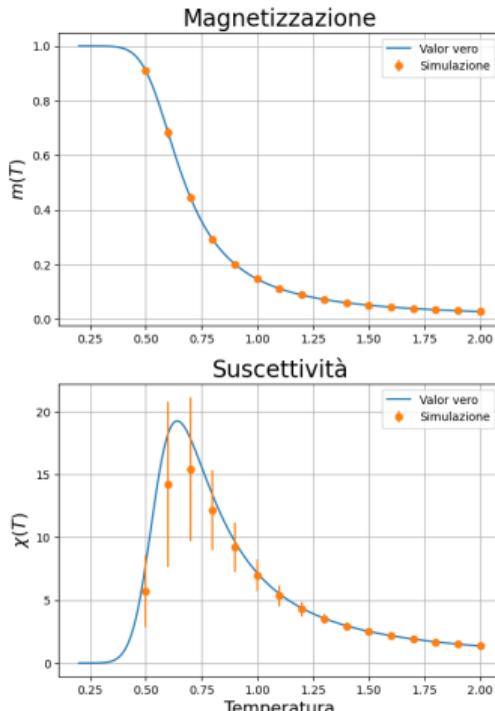




# Osservabili per $N_s = 6000$ , $h = 0.02$

7 Backup modello di Ising 1D

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

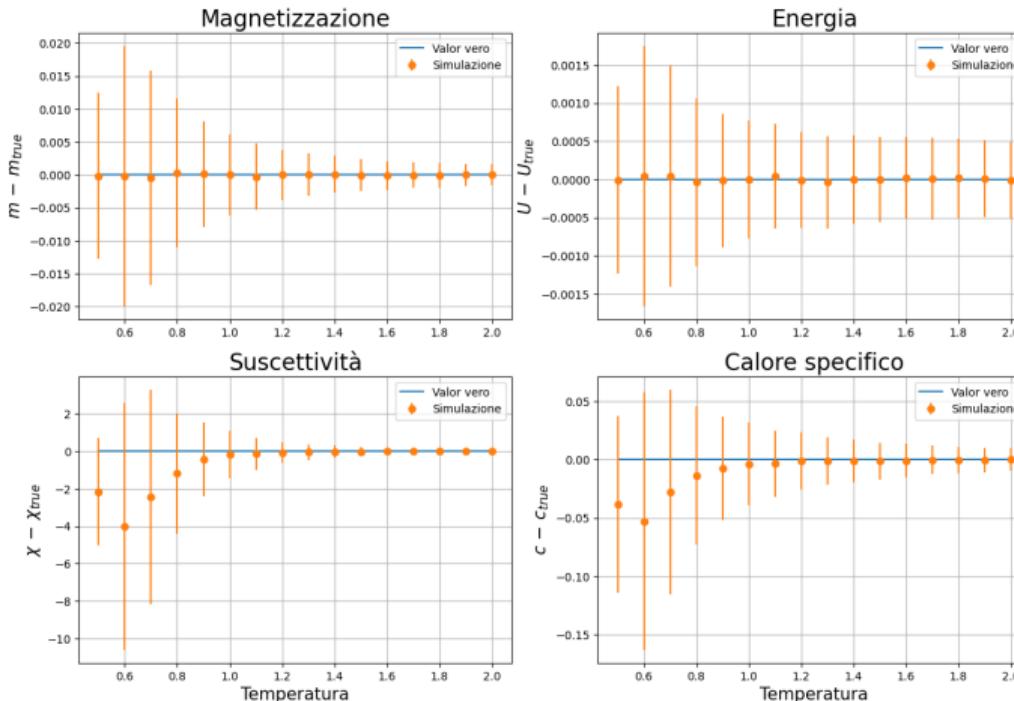




# Differenza dal valor vero per $N_s = 6000$ , $h = 0.02$

## 7 Backup modello di Ising 1D

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

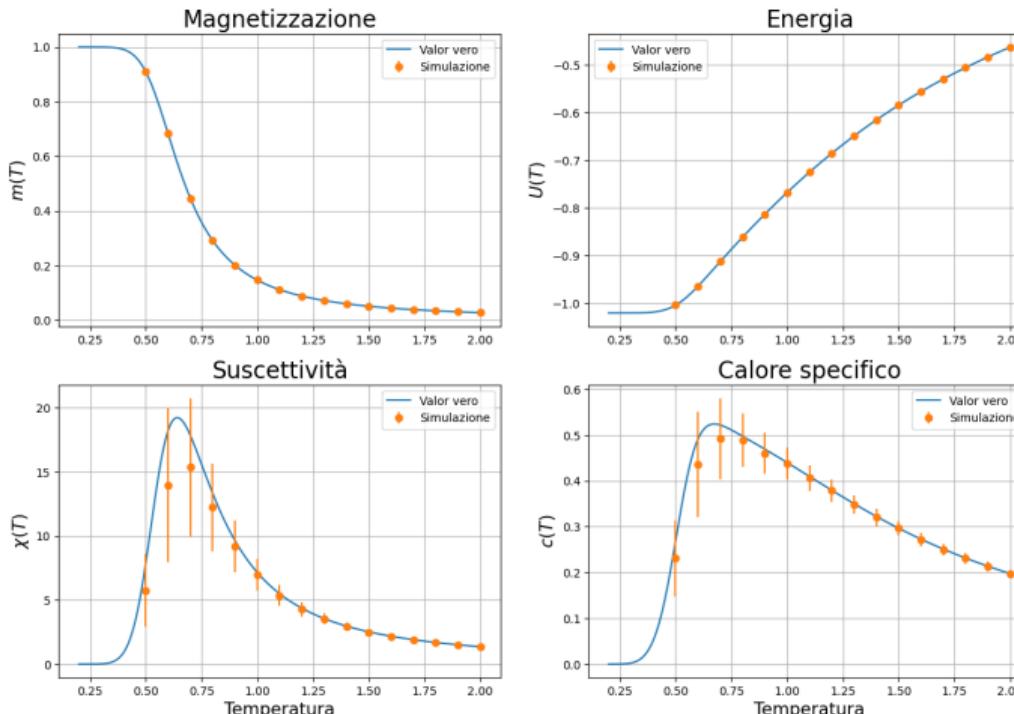




# Osservabili per $N_s = 10000$ , $h = 0.02$

7 Backup modello di Ising 1D

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

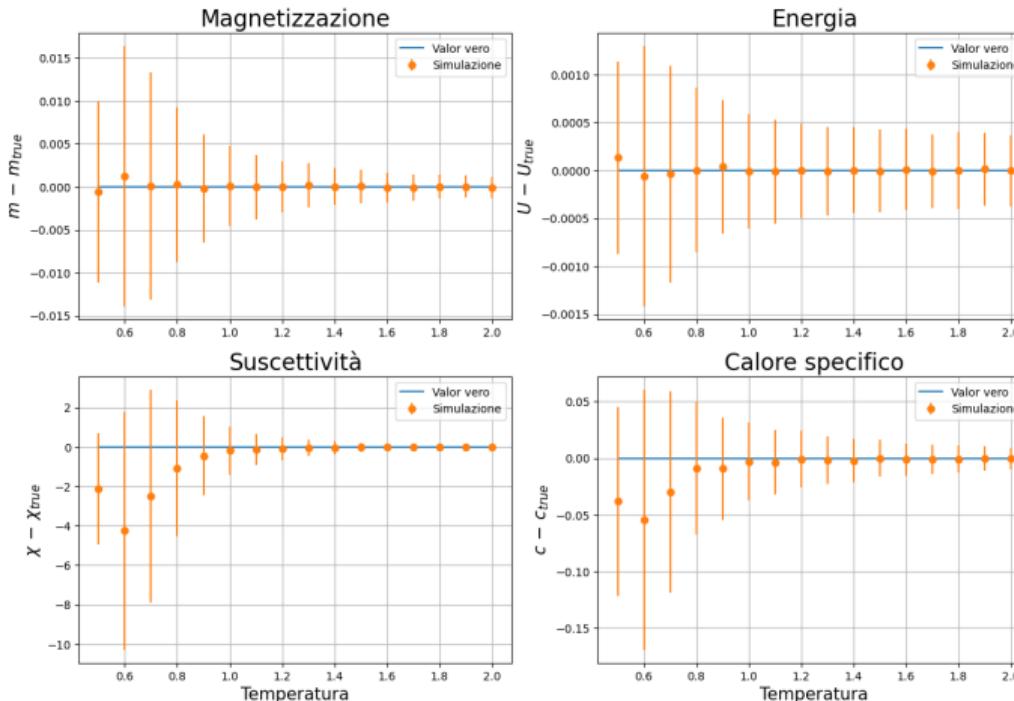




# Differenza dal valor vero per $N_s = 10000$ , $h = 0.02$

## 7 Backup modello di Ising 1D

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





# Table of Contents

## 8 Backup modello di Ising 2D

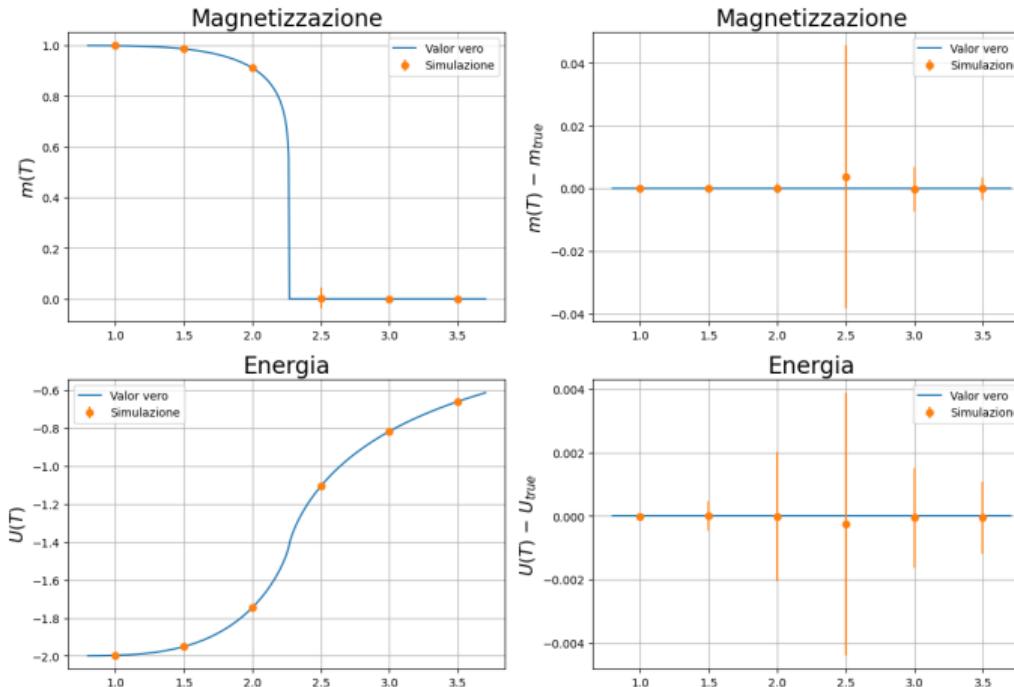
- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY



# Osservabili per reticolo $100 \times 100$

## 8 Backup modello di Ising 2D

Ising 2D: reticolo  $100 \times 100$

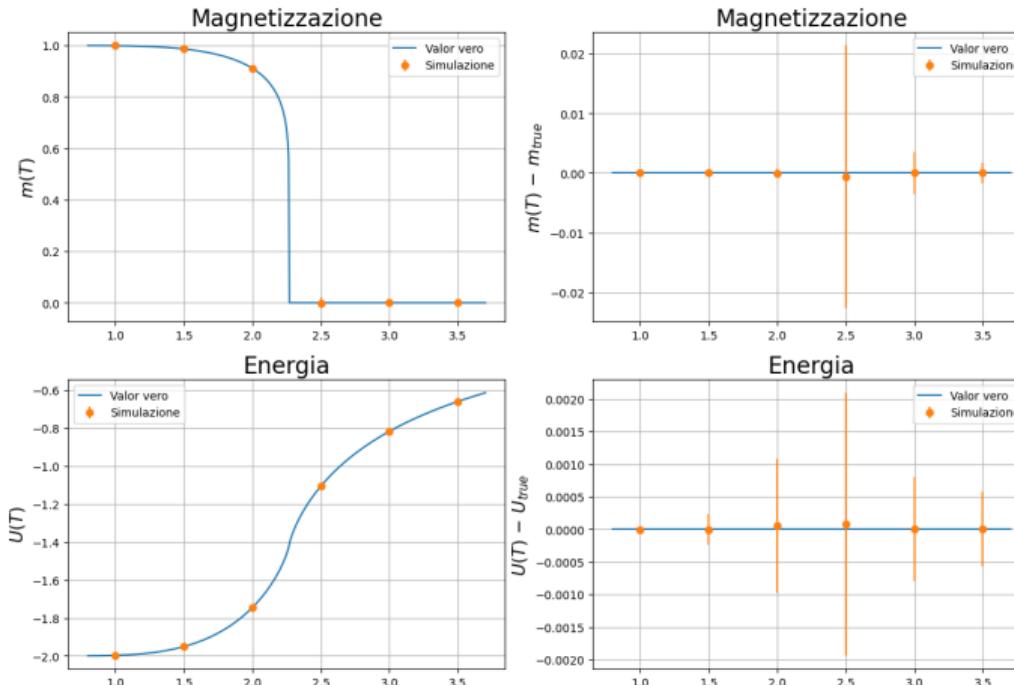




# Osservabili per reticolo $200 \times 200$

## 8 Backup modello di Ising 2D

Ising 2D: reticolo  $200 \times 200$

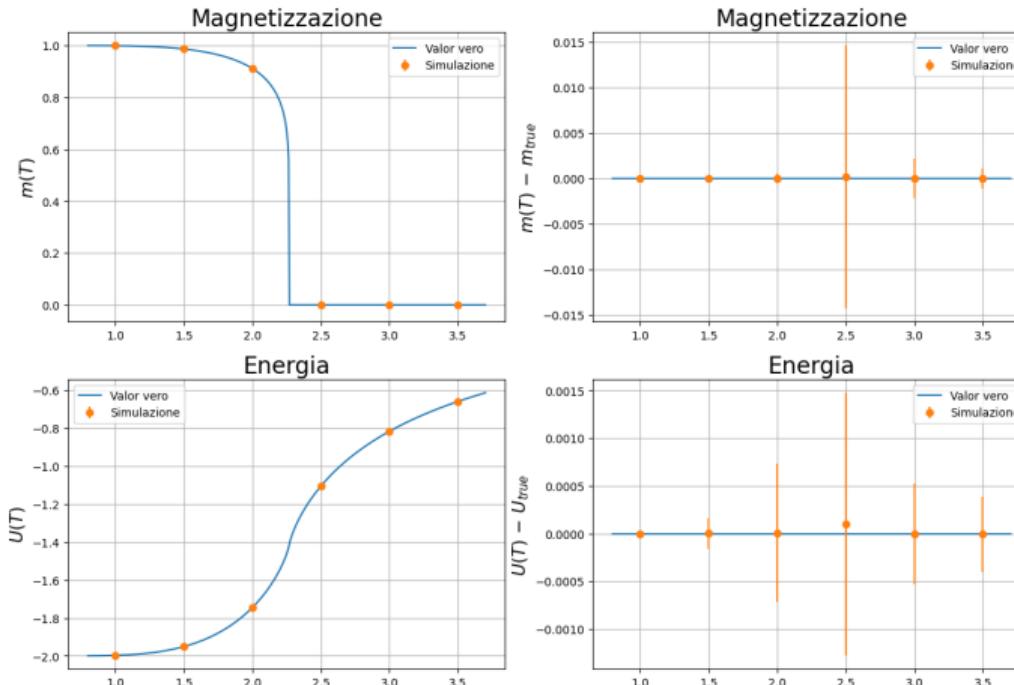




# Osservabili per reticolo $300 \times 300$

## 8 Backup modello di Ising 2D

Ising 2D: reticolo  $300 \times 300$

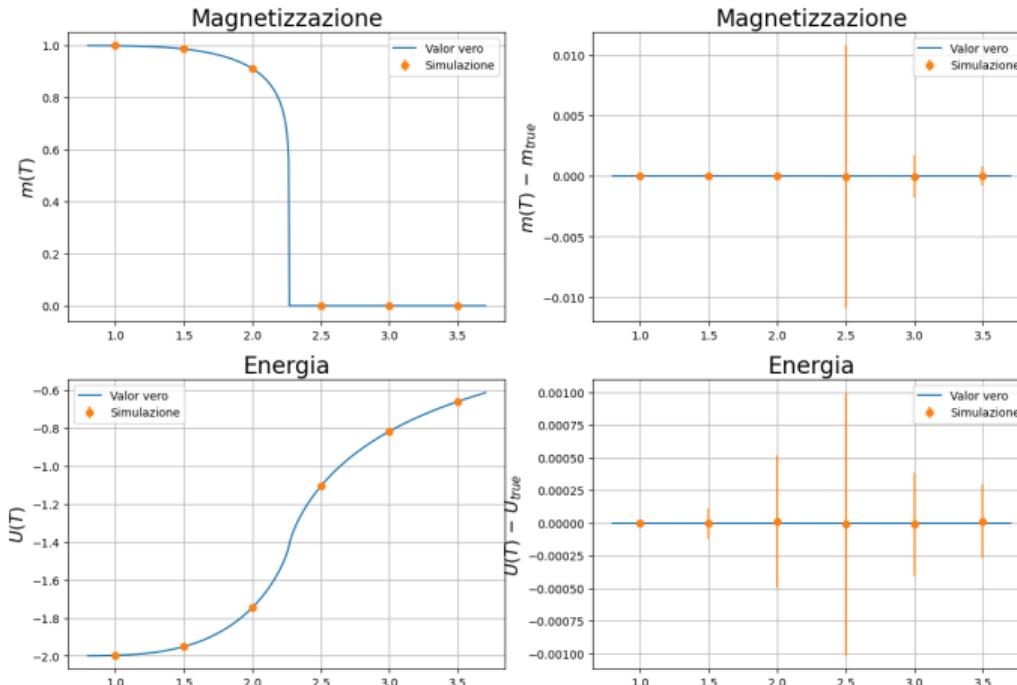




# Osservabili per reticolo $400 \times 400$

## 8 Backup modello di Ising 2D

Ising 2D: reticolo  $400 \times 400$

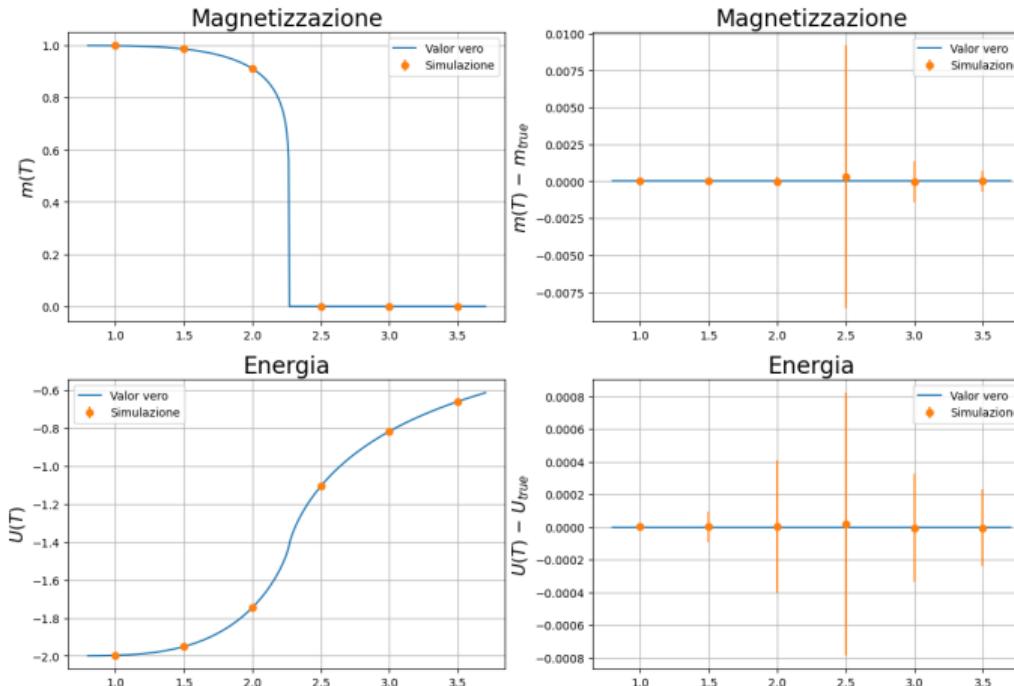




# Osservabili per reticolo $500 \times 500$

## 8 Backup modello di Ising 2D

Ising 2D: reticolo  $500 \times 500$





# Table of Contents

## 9 Backup modello XY

- ▶ Introduzione
- ▶ Metodi numerici
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Simulazioni modello di Ising 1D
- ▶ Modello XY
- ▶ Conclusioni
- ▶ Backup modello di Ising 1D
- ▶ Backup modello di Ising 2D
- ▶ Backup modello XY

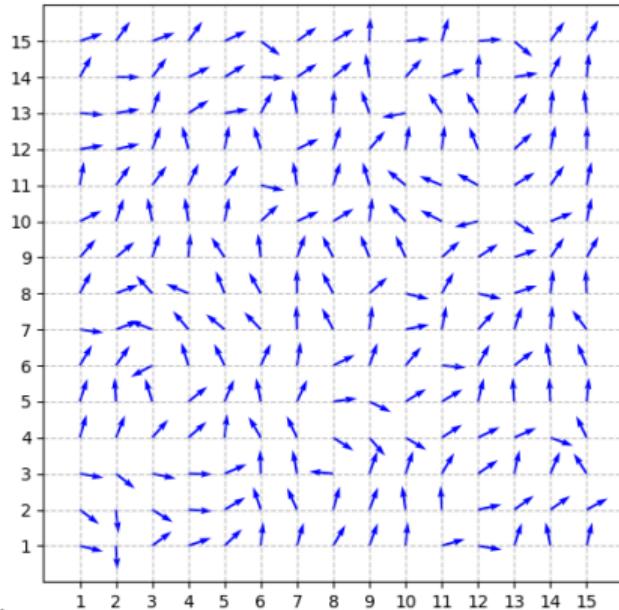


# Configurazioni

9 Backup modello XY

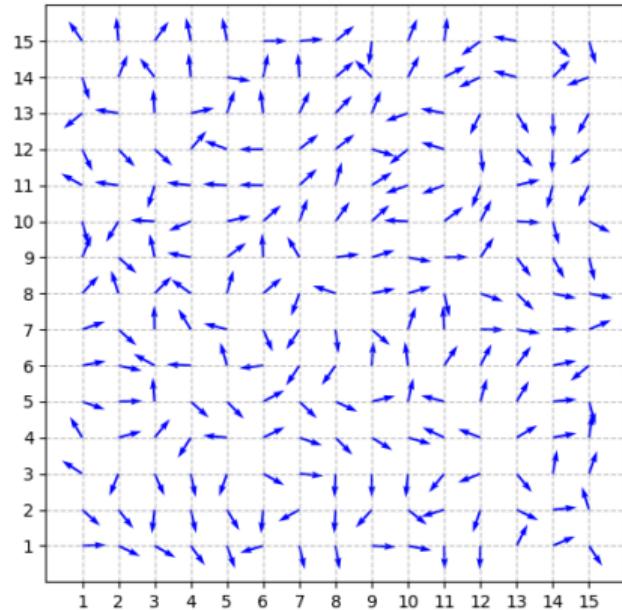
$T = 1.0$

Modello XY:  $T = 1.0$



$T = 1.5$

Modello XY:  $T = 1.5$



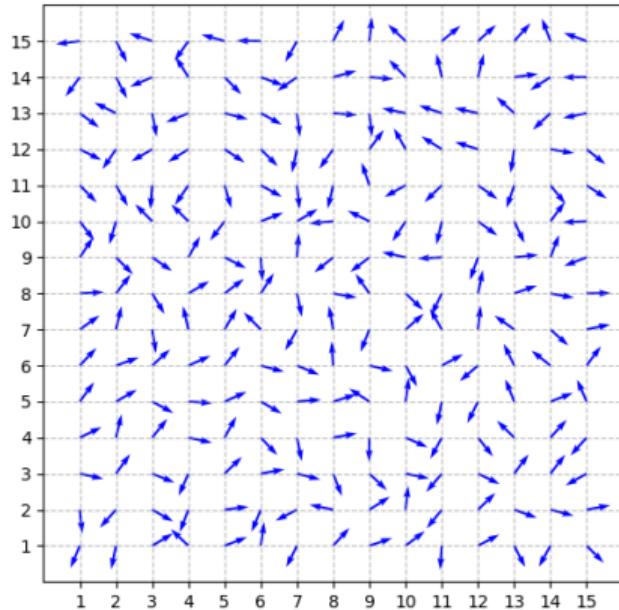


# Configurazioni

9 Backup modello XY

$T = 2.0$

Modello XY:  $T = 2.0$



$T = 3.0$

Modello XY:  $T = 3.0$

