

Metodi Montecarlo per modello 2D Ising

Amico Valerio, Bensch Fabio, Pariente Ruben

March 2023

1 Introduzione

L'obiettivo di questa relazione è l'analisi numerica del modello di Ising 2D su reticolo quadrato mediante tecniche Montecarlo. In particolare è stato utilizzato l'algoritmo Wolff per studiare la transizione di fase del secondo ordine nel caso di Ising senza campo trasverso caratterizzando la classe di universalità mediante la stima degli esponenti critici.

1.1 Modello di Ising

L'Hamiltoniana di Ising in campo trasverso (TFIM) è data dalla seguente espressione;

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i \quad (1)$$

Questa Hamiltoniana rappresenta un modello statistico di interazione fra spin classici dati dalle variabili s_i che possono assumere valori $s_i = \pm 1$. La costante J definisce l'accoppiamento ferromagnetico fra gli spin mentre la costante h rappresenta il campo magnetico ortogonale al reticolo.

Il modello di Ising in campo trasverso presenta una transizione di fase da un regime di ordine magnetico a bassa temperatura a un regime di disordine magnetico ad alta temperatura. Per studiare il caso di transizione del secondo ordine lavoriamo per comodità nel caso $J = 1$ e campo magnetico nullo $h = 0$ su un reticolo di dimensione L^2 .

1.2 Medie ed osservabili

Le medie termiche delle osservabili per un modello statistico a temperatura fissata possono essere ottenuti dalla distribuzione di Boltzmann dunque data una configurazione $\{s_i\}$ la probabilità ad essa associata sarà data da:

$$\mathcal{P}(\{s_i\}) = \frac{e^{-\beta H(\{s_i\})}}{\sum_{s_i} e^{-\beta H(\{s_i\})}} \quad (2)$$

La media termica di una osservabile = sarà dunque:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{s_i} \mathcal{P}(\{s_i\}) \mathcal{O}(\{s_i\}) \quad (3)$$

Per caratterizzare la transizione di fase siamo interessati all'analisi delle seguenti osservabili:

- $M = \left\langle \frac{\sum_i s_i}{L^2} \right\rangle \sim |t|^\beta$ Magnetizzazione per sito
- $E = \left\langle \frac{H}{L^2} \right\rangle$ Energia per sito
- $\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = L^2(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \sim |t|^{-\gamma}$ Suscettività Termica
- $C = \frac{\partial E}{\partial T} = L^2(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \sim |t|^{-\gamma}$ Capacità Termica
- $\langle s_i s_j \rangle \sim e^{-|i-j|/\xi}$ Correlazione spin
- $\xi \sim |t|^{-\nu}$ Lunghezza di correlazione

Per il modello di Ising 2D la soluzione esatta è nota (Onsager 1944) così come la temperatura critica $\beta_c \approx 0.4406$ e i relativi esponenti critici: $\nu = 1$, $\beta = \frac{1}{8}$, $\gamma = \frac{7}{4}$, $\alpha = 1$, $\eta = \frac{1}{4}$, $\delta = 15$ Sono inoltre valide le seguenti leggi di scaling:

- $(2 - \eta)\nu = \gamma$
- $\gamma = \beta(\delta - 1)$
- $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
- $2 - \alpha = 2\nu$

Come vedremo in seguito, lavorando con reticoli finiti non si osservano vere divergenze nelle osservabili. Tuttavia tramite l'ipotesi di scaling possiamo trovare informazioni sull'andamento attorno al punto critico. In particolare sono valide le seguenti relazioni:

$$M(\beta, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \Phi_M((\beta - \beta_c) \dot{L}^{\frac{1}{\nu}}) \quad (4)$$

$$\chi(\beta, L) = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \Phi_\chi((\beta - \beta_c) \dot{L}^{\frac{1}{\nu}}) \quad (5)$$

$$C(\beta, L) = L^{\frac{\alpha}{\nu}} \Phi_C((\beta - \beta_c) \dot{L}^{\frac{1}{\nu}}) \quad (6)$$

Nel caso specifico della capacità termica il fatto che dipenda da $\alpha = 0$ renderà dominanti le correzioni logaritmiche che dipenderanno dalla dimensione del reticolo. L'obiettivo nel seguente sezione sarà, tramite metodi Montecarlo, di riuscire a stimare gli esponenti critici e verificare la validità delle leggi di scaling. In particolare possiamo notare come le relazioni di scaling ci assicurano che solo due esponenti critici sono indipendenti.

2 Implementazione Numerica

Per la simulazione numerica del modello di Ising è stato utilizzato l'algoritmo di Wolff su un generico reticolo quadrato di dimensione L^2 con Periodic Boundary Conditions (PBC). Il codice è stato interamente sviluppato in C mentre per la parte di plot e fit è stato utilizzato il pacchetto matplotlib e curve-fit di Python.

2.1 L'algoritmo di Wolff

L'algoritmo di Wolff è un algoritmo Montecarlo accept-reject come il Metropolis ma con la differenza che in questo caso vengono flippati dei cluster di spin invece che i singoli spin. L'algoritmo inizia selezionando un punto casuale nella griglia di Ising e costruendo un cluster di spin interconnessi tramite spin adiacenti. Una volta che il cluster viene identificato, viene flipato e aggiunto alla lista del cluster flipato. Questo cluster flipato viene utilizzato per calcolare l'energia totale della nuova configurazione di spin e la probabilità di accettazione.

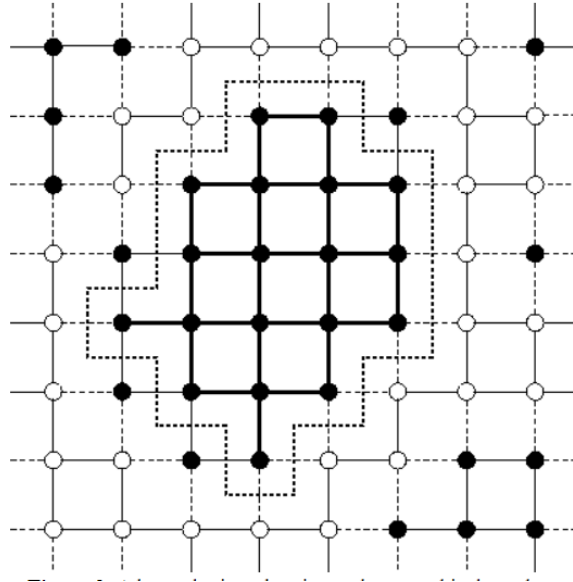


Figure 1: Esempio cluster

La procedura nello specifico per un update può essere descritta nel seguente modo:

- Scelgo randomicamente un sito del reticolo da cui iniziare a costruire un cluster
- Considero tutti i link adiacenti, se sono discordi non includo lo spin relativo mentre se sono concordi lo accetto nel cluster con probabilità $p =$

- dato il nuovo set di spin nel cluster dato dal precedente update considero tutti i link a loro connessi e ripeto lo step precedente.
- Continuo questo procedimento fino a quando non ho più link da esplorare e dopodichè flippo tutto il cluster con probabilità 1

L'algoritmo di Wolff risulta essere efficiente perché il flip dei cluster di spin consente di creare configurazioni di spin altamente correlate, che possono essere flipate con una sola mossa. Ciò riduce significativamente il tempo necessario per generare una nuova configurazione di spin e quindi accelerare la convergenza dell'algoritmo. In particolare, al contrario del Metropolis, è più efficiente a basse temperature che ad alte come si può notare dalle autocorrelazioni.

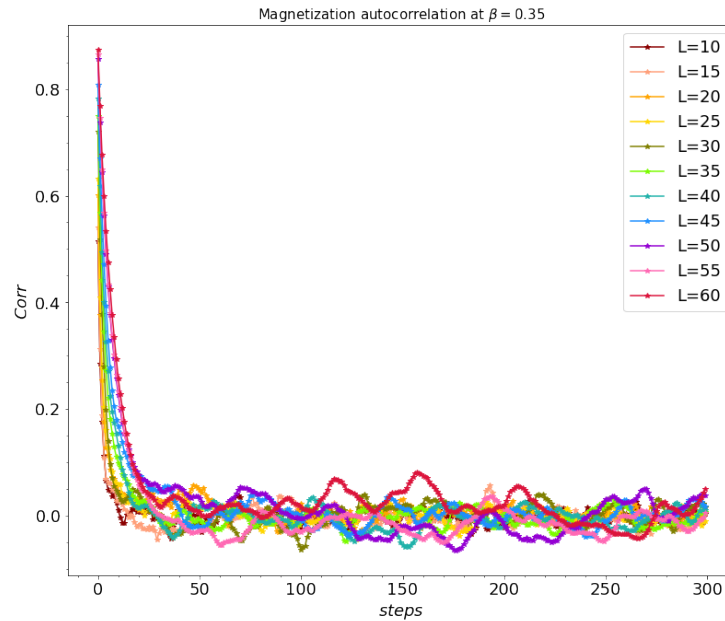


Figure 2: Autocorrelazione Magnetizzazione a $\beta = 0.35$

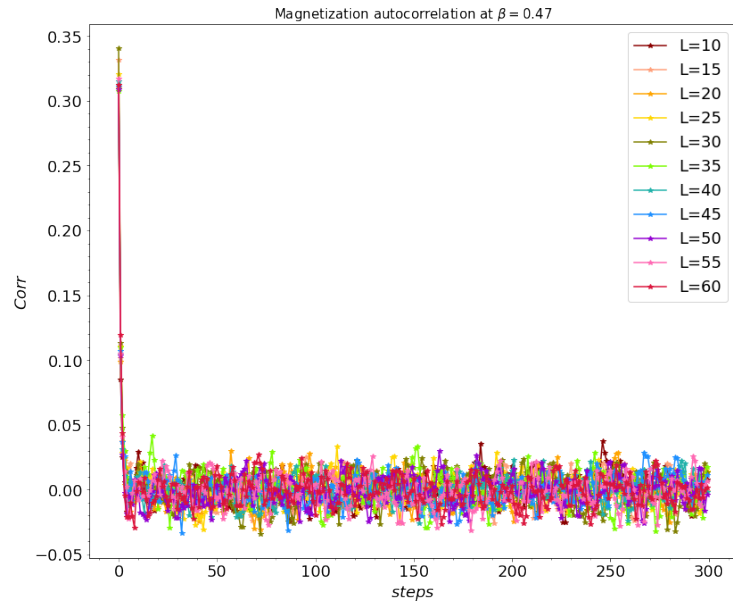


Figure 3: Autocorrelazione Magnetizzazione a $\beta = 0.35$

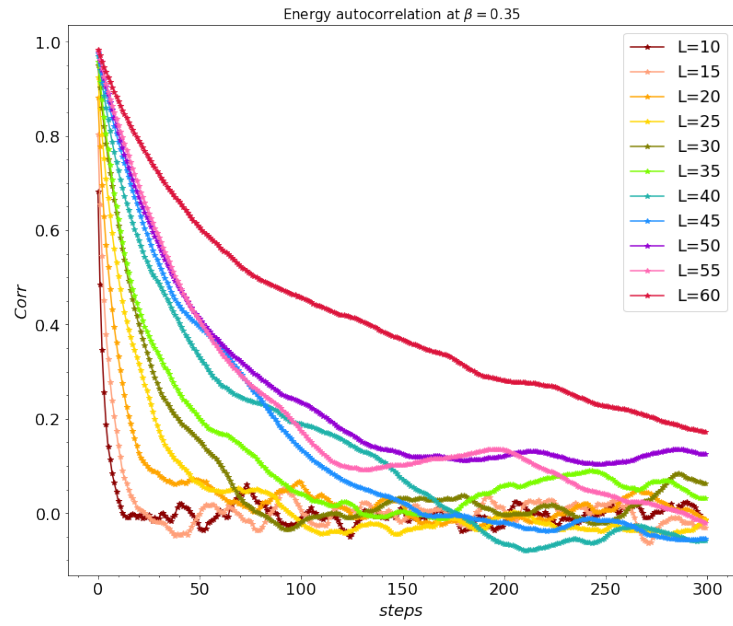


Figure 4: Autocorrelazione Energia a $\beta = 0.35$

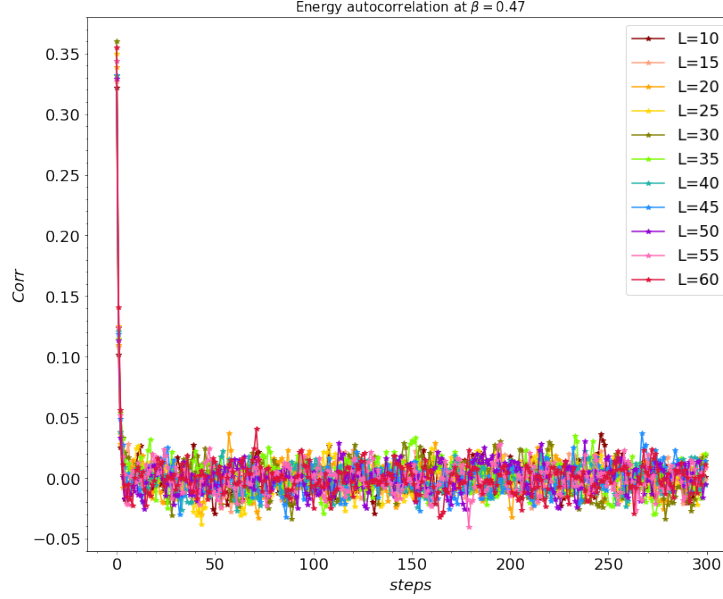


Figure 5: Autocorrelazione Energia a $\beta = 0.35$

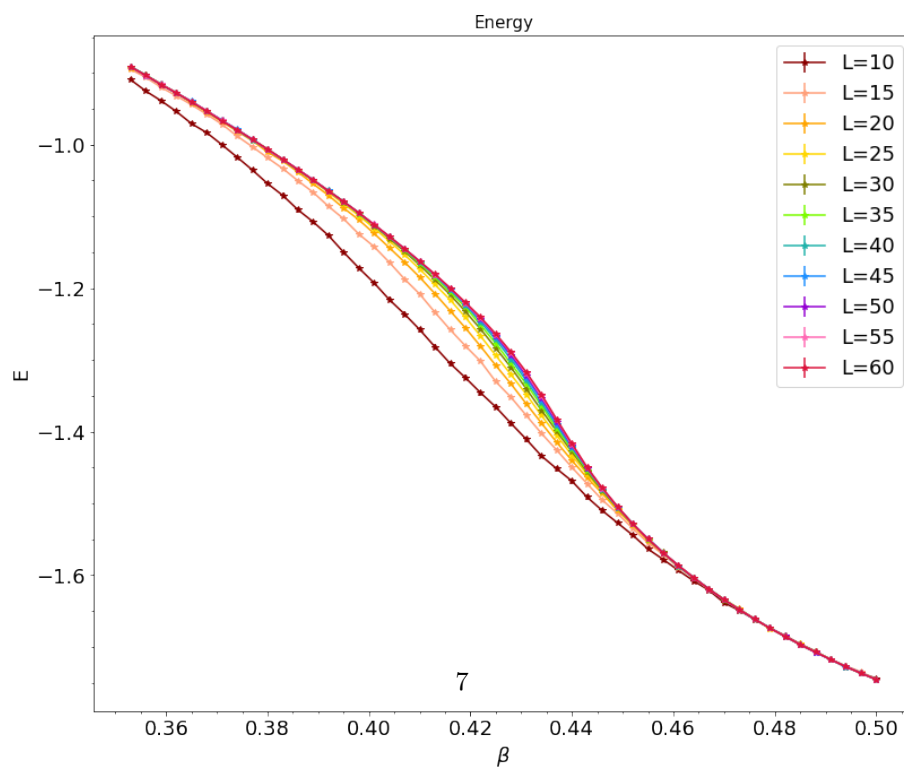
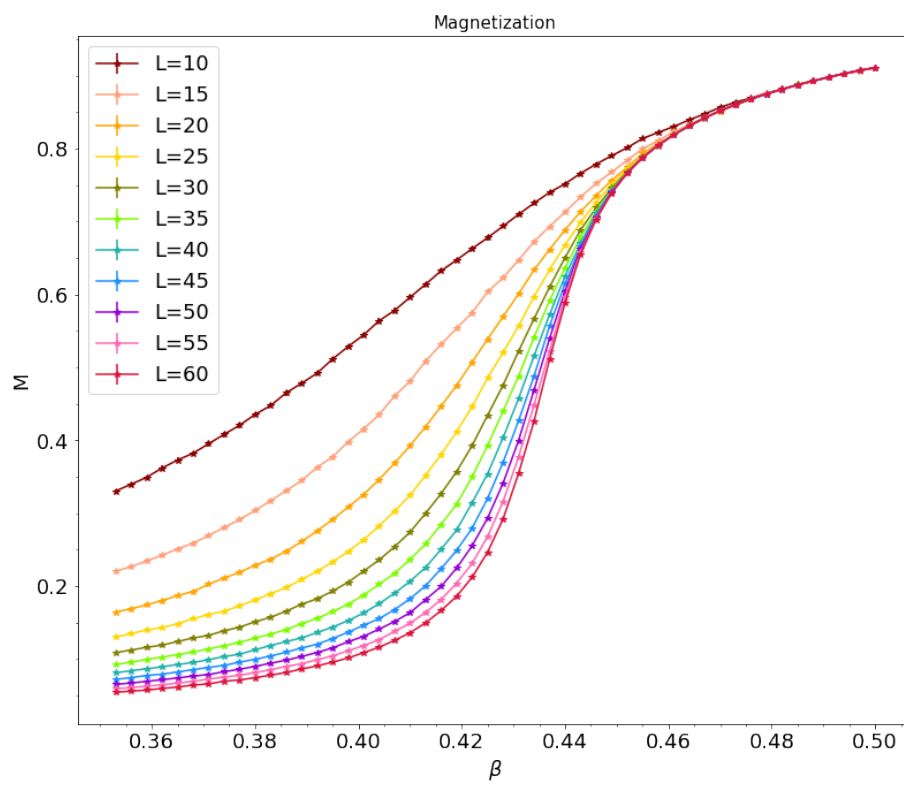
2.2 Descrizione delle misure

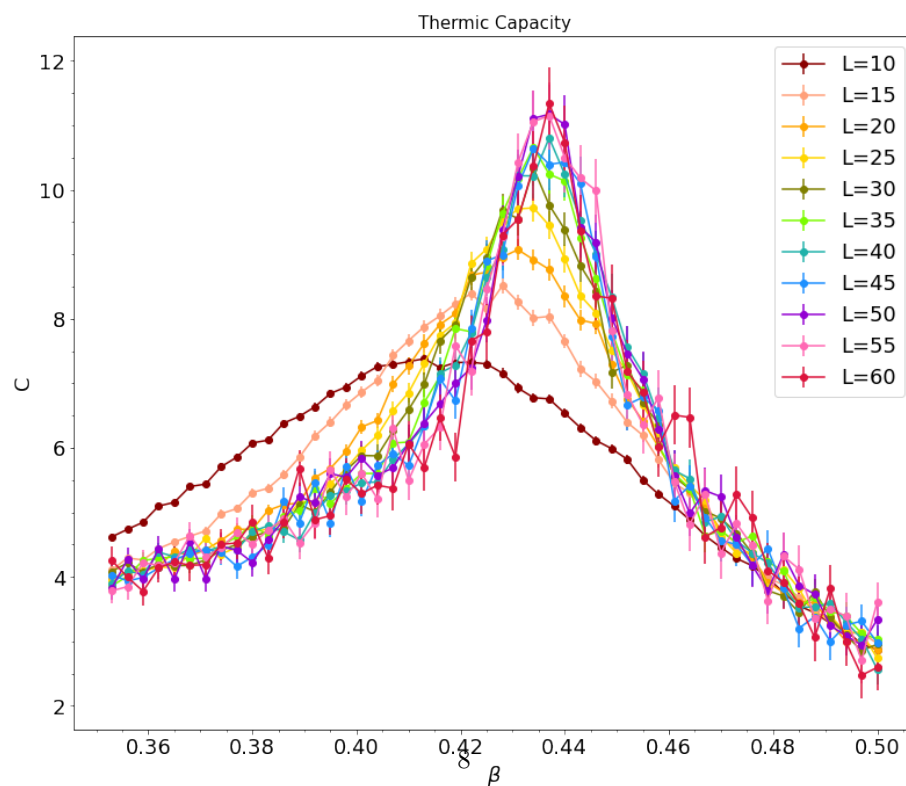
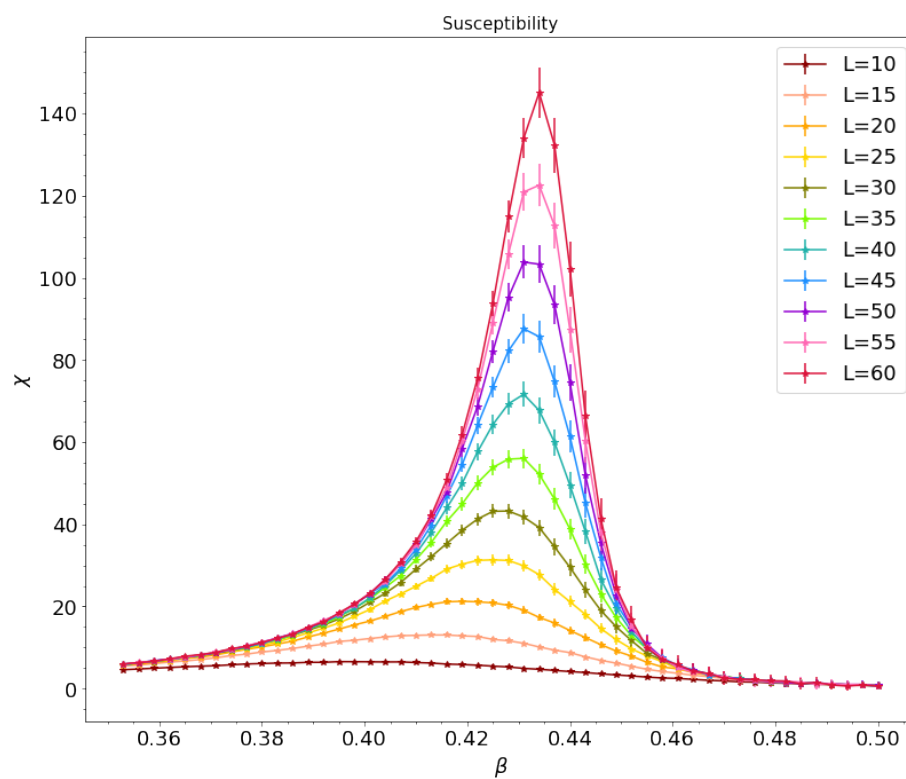
Abbiamo simulato numericamente 10 reticoli di lato L crescente pari a $L=10,15,20,25,30,35,40,45,50,60$. Per ognuno di questi reticoli sono stati effettuate $5 \cdot 10^5$ misure di magnetizzazione ed energia presi ogni 100 aggiornamenti tramite Wolff. Prendendo i dati ogni 100 aggiornamenti Wolff siamo sicuri che i dati di magnetizzazione possono essere assunti scorrelati in tal modo. Per ogni catena di Markov sono stati scartati i primi 100 aggiornamenti per assicurarci la termalizzazione. Le singole misure di magnetizzazione ed energia sono state eseguite mediante media campionaria sulle configurazioni del reticolo della catena di Markov. Sono state analizzate, per ogni dimensione, 30 misure di temperature comprese fra $\beta = 0.35$ e $\beta = 0.46$, con $\beta = \frac{1}{T}$.

2.3 Stima degli errori

Gli errori per le stime delle osservabili sono stati calcolati tramite bootstrap senza binning. Questo ha comportato degli errori più grandi nella stima della capacità termica e dell'energia a causa della correlazione della catena di Markov. Il bootstrap effettuato consiste in 50 ricampionamenti del set di dati di cardinalità $\mathcal{N} = 10^4$ di cui sono stati presa media e deviazione standard bootstrap per effettuare i plots.

2.4 Plots





3 Stima degli esponenti critici

Dalle relazioni di scaling precedentemente definite sappiamo che è sufficiente calcolare 2 esponenti critici. In questa sezione ci proponiamo di trovare gli esponenti γ e ν tramite fit dalla posizione e dalla altezza dei picchi della suscettività. Per ogni dimensione del reticolo abbiamo stimato la posizione e l'altezza dei picchi effettuando un fit parabolico con 3,4,5,6,7,8 punti attorno al massimo. Calcolato per ognuno di questi fit la posizione del massimo e il massimo usando i parametri di best fit trovati effettuato media e deviazione standard

3.1 Fit per esponente critico ν

Gli effetti volumi fanno sì che la posizione della transizione di fase non sia esattamente a β_c ma si discosti al diminuire della dimensione del reticolo. Ciò è ben visibile nella posizione dei picchi della suscettività. Definendo $\tilde{\chi} = (\beta_{max}(L) - \beta_c)L^{\frac{1}{\nu}}$ il picco delle funzioni di scaling abbiamo una relazione da poter invertire per poter stimare l'esponente critico ν :

$$\beta_{max}(L) = \beta_c + \tilde{\chi}L^{-\frac{1}{\nu}} \quad (7)$$

effettuando il fit, riportato in figura, abbiamo ottenuto i seguenti parametri:

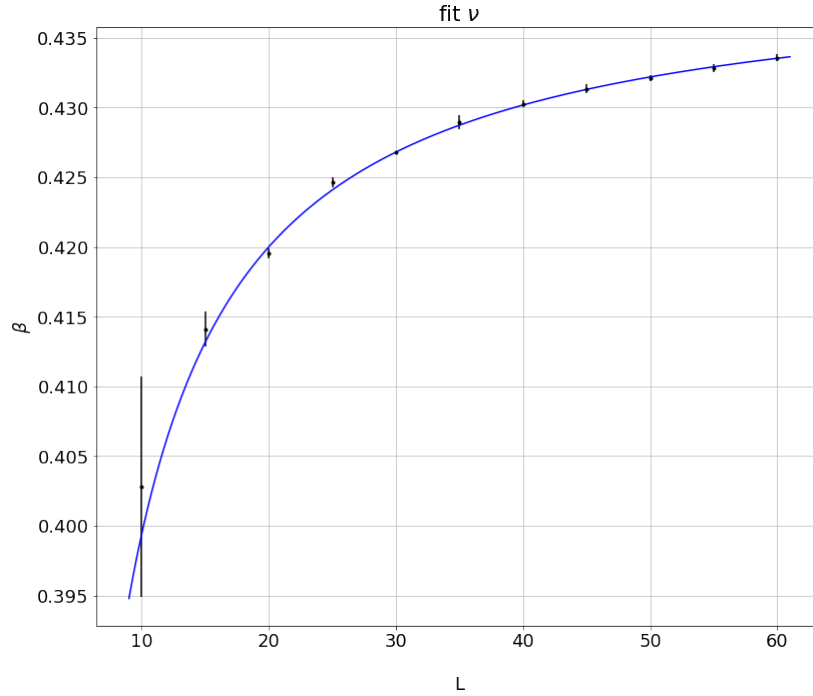


Figure 6: Fit temperature critiche

- $\nu = 0.98 \pm 0.08$
- $\beta_c = 0.4401 \pm 0.001$
- $\chi^2/ndof = 5.70/8$

3.2 Fit per esponente critico γ

Dall'ipotesi di scaling è inoltre noto che il picco della suscettività magnetica in funzione di L è atteso crescere con una legge di potenza:

$$\tilde{\chi} = cL^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (8)$$

Dunque utilizzando il valore dell'esponente critico ν precedentemente stimato possiamo calcolare il valore di γ attraverso un fit della legge di potenza sull'altezza dei picchi della suscettività. I valori ottenuti dal fit sono:

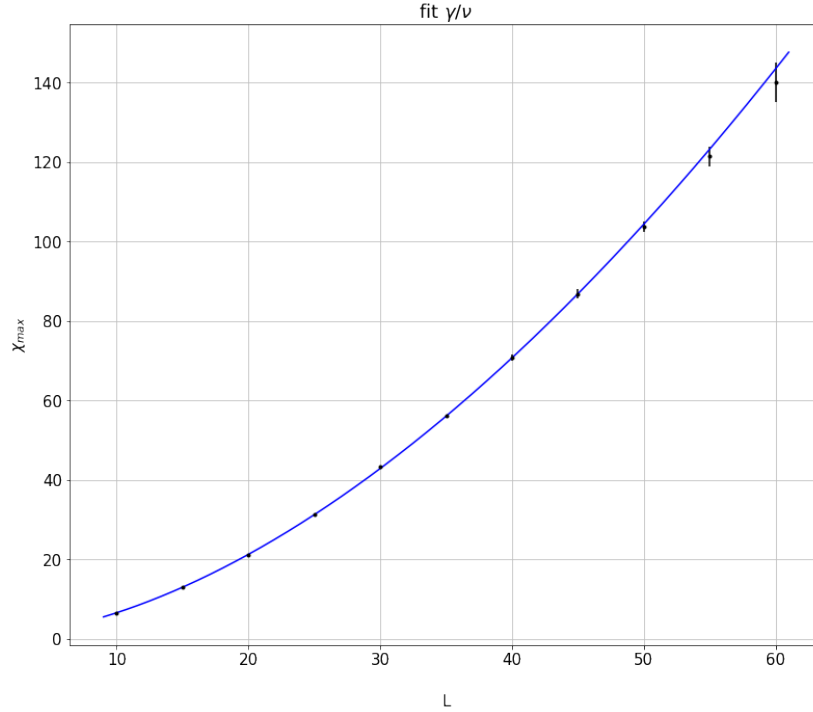


Figure 7: Fit Picchi Suscettività

- $\gamma = 1.72 \pm 0.15$
- $\chi^2/ndof = 33/8$

3.3 Stima esponenti critici $\alpha, \eta, \beta, \delta$

Dalle leggi di scaling precedentemente definite è possibile determinare i restanti esponenti critici tramite propagazione degli errori. I valori ottenuti per i restanti esponenti critici sono:

- $\alpha = 0.37 \pm 0.17$
- $\eta = 0.25 \pm 0.01$
- $\beta = 0.12 \pm 0.6$
- $\delta = 15 \pm 7$

4 Finite Size Scaling

Ora che abbiamo stimato gli tutti gli esponenti critici e verificato la loro compatibilità con quelli esatti calcolati da Onsager possiamo verificare l'ipotesi di scaling data dalle equazioni () per magnetizzazione, suscettività e capacità termica.

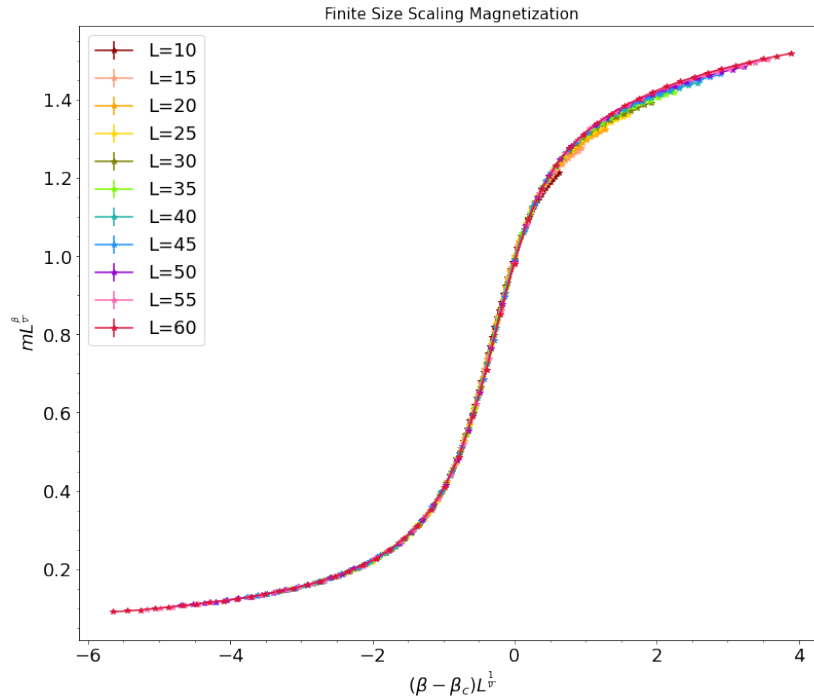


Figure 8: Rescaling Magnetizzazione

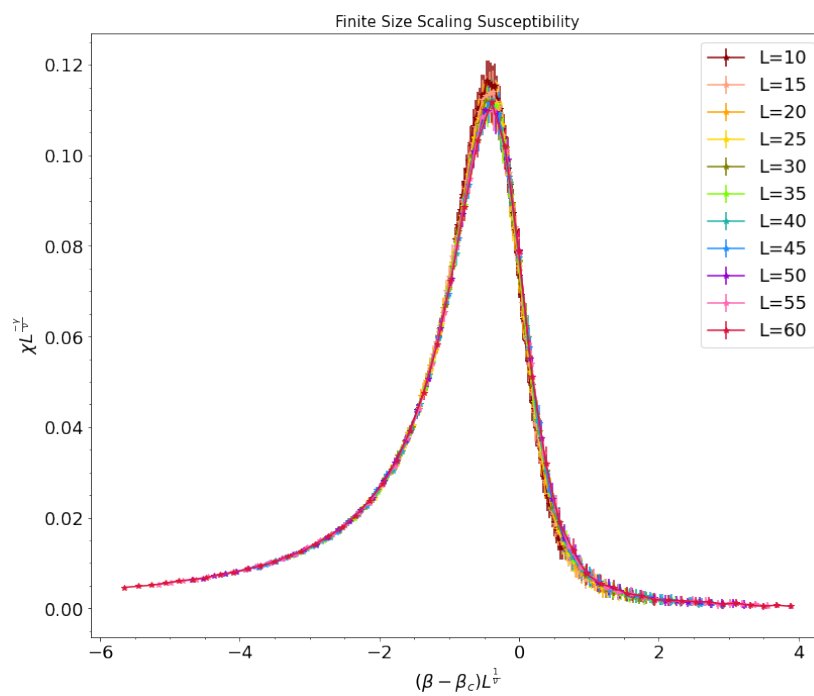


Figure 9: Rescaling Suscettività

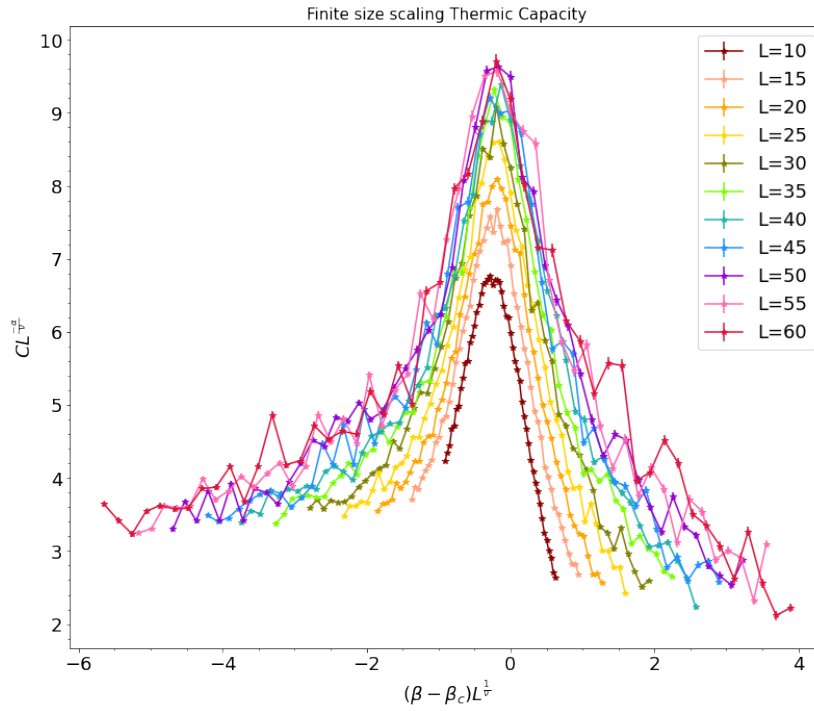


Figure 10: Rescaling Capacità Termica

Possiamo notare come sia la magnetizzazione che la suscettività collasino su una sola curva confermando l'ipotesi di scaling mentre per la capacità termica le correzioni logartmiche, date da $\alpha = 0$, portano ad una traslazione che va con $\log(L)$.

5 Bibliografia