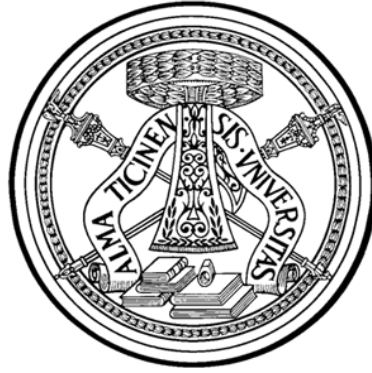


UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PAVIA
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA IN FISICA



ENTROPIC SAMPLING IN SISTEMI DI SPIN

Tesi per la laurea di
Antonio Gelameris
Mat. 364743/22

Relatore
Dott. Marco Guagnelli

Anno Accademico 2014/2015

Indice

1	Modello di Ising	7
1.1	Il modello in una dimensione	8
1.2	Approssimazione di campo medio	10
1.2.1	Un metodo alternativo	12
1.3	Soluzioni dell'equazione di campo medio	12
1.4	Un modello esattamente risolubile	15
1.5	Transizioni di fase	16
1.6	Modello di Potts	17
1.6.1	Descrizione modello	18
2	Simulazioni Monte Carlo	21
2.1	Introduzione al metodo Monte Carlo	21
2.2	Applicazione metodo e Importance Sampling	23
2.3	Algoritmo di Metropolis	26
2.4	Entropic Sampling	27
2.5	Algoritmo Wang-Landau	29
2.5.1	Descrizione Algoritmo	29
2.6	Analisi degli errori	33
2.6.1	Autocorrelazione	33
2.6.2	Binning	34
2.6.3	Jackknife	34
2.6.4	Reweighting	34
3	Applicazioni	37
3.1	Simulazione del modello di Ising	37
3.2	Simulazione del modello di Potts	40
	Bibliografia	43

Introduzione

La simulazione numerica oggi giorno gioca un ruolo chiave nella fisica statistica, in particolare per lo studio di processi fisici che potrebbero non essere accessibili sperimentalmente, quali le transizioni di fase e i fenomeni di punto critico, fornendo la possibilità di ottenere risultati quantitativi di grandezze significative per il sistema oggetto di studio e, in generale, contribuendo notevolmente allo sviluppo del modello teorico ad esso associato. La ragione della sua importanza risiede nel fatto che anche i modelli più semplici sono spesso di difficile trattazione teorica; basti pensare al modello di Ising in 2 dimensioni in presenza di campo magnetico esterno, o alla sua formulazione tridimensionale, le cui soluzioni analitiche rimangono tutt'ora sconosciute. In questo caso, molto rappresentativi, il comportamento del sistema in prossimità delle transizioni di fase, la localizzazione dei suoi punti critici e i valori più raffinati degli esponenti critici che descrivono questi comportamenti sono tutti frutto dello studio e dell'ideazione degli algoritmi di simulazione numerica, della loro applicazione e della potenza di calcolo fornitaci dai computer negli ultimi 50 anni.

In questo lavoro verranno presentate alcune delle molte tecniche di simulazione Monte Carlo applicate a modelli di meccanica statistica di interazione di spin su reticolo. In particolare verrà affrontato lo studio dei modelli di Ising e Potts bidimensionali.

Dopo un'introduzione in cui entrambi i modelli verranno descritti dal punto di vista teorico, e in parte anche dal punto di vista applicativo, evidenziando le analogie tra i due, concentreremo la nostra attenzione sulla descrizione dell'algoritmo di importance sampling di Metropolis e in particolare ne illustreremo le caratteristiche di località che non permettono uno studio computazionalmente semplice dei sistemi (come quello descritti dal modello di Potts) caratterizzati dalla coesistenza di più fasi in prossimità del punto critico alla luce della scarsa probabilità di saltare il gap in energia che separa le due fasi. Ai fini dello studio di questi sistemi descriveremo due algoritmi di più recente sviluppo, ovvero l'algoritmo di Entropic Sampling e un caso particolare di quest'ultimo che è stato trattato nello specifico da Wang e Landau. Entrambi questi algoritmi partono dall'idea di porsi nello spazio delle energie e di campionare la densità degli stati in funzione dell'energia per il nostro sistema. Il grande vantaggio rappresentato da questo tipo di analisi è la possibilità di calcolare numericamente la probabilità $P(E)$ che il sistema si trovi in uno stato di energia E , per ogni valore dell'energia e della temperatura. Da questo discende la possibilità di calcolare non solo tutte le grandezze direttamente dipendenti dall'energia ma anche la funzione di partizione e quindi l'energia libera del sistema.

Nella parte finale di questa tesi verranno presentati i risultati del nostro lavoro di implementazione di tali algoritmi allo studio del modello di Ising in due dimensioni in assenza di campo magnetico esterno, dove si è posta l'attenzione in particolare sulla compatibilità dei due metodi mostrando l'accordo perfetto tra i dati ottenuti con il metodo di Metropolis e di Wang-Landau, e allo studio del modello di Potts in due dimensioni con $Q = 10$ su due reticoli (16×16 e 24×24) per cui abbiamo ottenuto un risultato per la $P(E)$ in perfetto accordo con il modello teorico.

Capitolo 1

Modello di Ising

Introduzione

Molti sistemi fisico-chimici possono essere rappresentati in maniera più o meno accurata come un reticolo di molecole, atomi o in generale particelle caratterizzate da un'interazione tra primi vicini. Il modello che meglio descrive questo genere di sistemi è il modello di Ising, presentato da Ernst Ising nel 1925 e ad oggi il modello più gettonato come punto di partenza per la descrizione di fenomeni di interazione collettivi. Per quanto possa sembrare semplicistica e inapplicabile una rappresentazione di questo tipo per sistemi reali, si nota che in realtà le caratteristiche fondamentali dei fenomeni di interazione collettiva (specialmente in prossimità delle transizioni di fase) dipendono non tanto dalle caratteristiche specifiche della particolare interazione ma dai suoi meccanismi di propagazione a lungo raggio, ed il modello di Ising permette uno studio accurato e matematicamente rigoso (oltre che in alcuni casi particolari esatto) di questi fenomeni, tra i quali troviamo le transizioni di fase gas-liquido e liquido-solido, la separazione in fasi distinte di alcune soluzioni liquide ma soprattutto il comportamento critico (cioè alla transizione) di alcuni materiali ferromagnetici.

L'Hamiltoniana del modello di Ising è data da:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

in cui:

- gli indici interi i, j etichettano i siti di un reticolo;
- la scrittura $\langle i, j \rangle$ indica la somma su i e j primi vicini;
- σ_i è una variabile di spin il cui valore può essere ± 1 ;
- J è il parametro di interazione. Se $J > 0$ gli spin primi vicini tendono a stare allineati (la configurazione è energeticamente favorita);

- h è un eventuale campo magnetico esterno.

Come affermavamo prima, questo modello permette uno studio preliminare del comportamento critico dei materiali ferromagnetici: tali materiali mostrano una magnetizzazione spontanea se la temperatura d'equilibrio è inferiore a una temperatura critica T_c , detta *temperatura di Curie*.

Nel linguaggio del nostro modello la magnetizzazione totale M è data da

$$M = \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle \quad (1.2)$$

dove $\langle \dots \rangle$ indica il valore d'aspettazione statistico nell'ensemble canonico. Se il sistema è composto da N spin possiamo definire una densità di magnetizzazione $m = \frac{M}{N}$, che continueremo a chiamare magnetizzazione. Il valore d'aspettazione di una generica osservabile A nell'ambito del formalismo canonico è definita in questo modo:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Q} \sum_{[\sigma]} A[\sigma] e^{-\beta \mathcal{H}[\sigma]} \quad (1.3)$$

in cui

$$\sum_{[\sigma]} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \quad (1.4)$$

L'equazione (1.4) è nota come "somma sulle configurazioni", o, secondo la definizione originale di Boltzmann, "somma sugli stati". Un sistema di Ising con N spin ammette 2^N possibili configurazioni. Si vede subito che

$$M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Q}{\partial h} \quad (1.5)$$

dove Q è la funzione di partizione canonica del sistema:

$$Q = \sum_{[\sigma]} e^{-\beta \mathcal{H}[\sigma]} \quad (1.6)$$

Pur nella sua semplicità, il modello di Ising è stato risolto in maniera esatta solo in dimensione $D = 1$ per ogni valore di h e in dimensione $D = 2$ ma solamente per $h = 0$.

1.1 Il modello in una dimensione

Imponendo condizione periodiche al contorno¹ (ossia $\sigma_{N+1} = \sigma_1$) possiamo riscrivere l'Hamiltoniana in maniera simmetrica:

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1.7)$$

¹Poiché siamo interessati al limite termodinamico in cui $N \rightarrow \infty$, per i ragionamenti che seguono la scelta delle condizioni al contorno gioca un ruolo inessenziale

Introducendo i vettori di stato $|\sigma_i\rangle$ e l'operatore \hat{P} , con elementi di matrice uguali a

$$\langle\sigma_i|\hat{P}|\sigma_{i+1}\rangle = \exp\{\beta[J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})]\} \quad (1.8)$$

possiamo riscrivere la funzione di partizione in questo modo:

$$Q = \sum_{[\sigma]} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle\sigma_1|\hat{P}|\sigma_2\rangle \langle\sigma_2|\hat{P}|\sigma_3\rangle \cdots \langle\sigma_N|\hat{P}|\sigma_1\rangle \quad (1.9)$$

Poichè vale la relazione di completezza

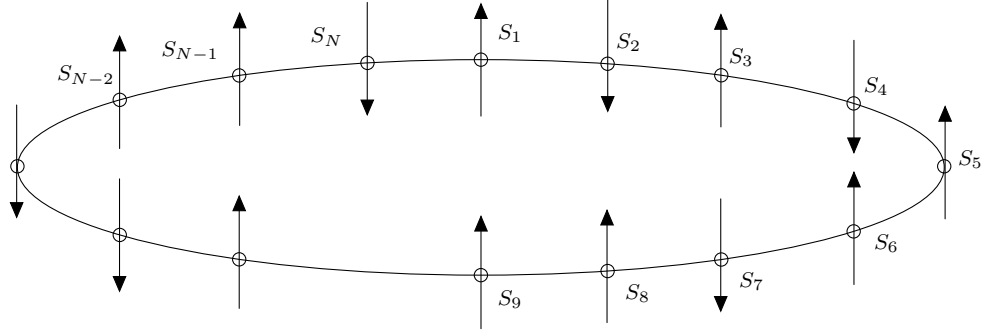


Figura 1.1: Rappresentazione del modello di Ising 1-D come un anello di N spin

$$\sum_{\sigma_i=\pm 1} |\sigma_i\rangle \langle\sigma_i| = 1 \quad \forall i \quad (1.10)$$

otteniamo facilmente

$$Q = \sum_{\sigma_1} \langle\sigma_1|\hat{P}^N|\sigma_1\rangle = \text{Tr}(\hat{P}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (1.11)$$

in cui λ_1 e λ_2 sono gli autovalori della matrice rappresentativa di \hat{P} . L'equazione quadratica che li definisce è:

$$\lambda^2 - \lambda(e^{\beta h} + e^{-\beta h}) + e^{2\beta J} - e^{-2\beta J} = 0 \quad (1.12)$$

Con un po' di algebra troviamo

$$\lambda = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{(e^{-2\beta J} + e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h))} \quad (1.13)$$

Poiché $\lambda_2 < \lambda_1$ possiamo scrivere

$$Q = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \quad (1.14)$$

e quindi nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$) conta solo l'autovalore più grande. Quindi per l'energia libera di Von Helmholtz otteniamo

$$A = -\frac{1}{\beta} \ln Q \simeq -\frac{N}{\beta} \ln \lambda_1 \quad (1.15)$$

e per la magnetizzazione otteniamo

$$M = -\left(\frac{\partial A}{\partial h}\right)_T = \frac{N \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta h)}} \quad (1.16)$$

Vediamo subito che se $h = 0$ la magnetizzazione è nulla per tutte le temperature maggiori di zero. Questo significa che in una dimensione il modello di Ising non presenta la transizione di fase ferromagnetica.

Se $J = 0$ ritroviamo il risultato paramagnetico, ossia

$$M = N \tanh(\beta h) \quad (1.17)$$

1.2 Approssimazione di campo medio

Il conto esatto in due dimensioni risulta abbastanza complicato. Come prima approssimazione, valida in dimensione D qualsiasi, partiamo dal cosiddetto *campo medio*, un approccio variazionale basato sulla minimizzazione dell'energia libera. Ciò che si minimizza, però, non è la *vera* energia libera, ma un funzionale "energia libera" che deriva da una distribuzione di probabilità fattorizzata. Scriviamo cioè

$$\rho_{mf}[\sigma] = \prod_i \rho_i(\sigma_i) \quad (1.18)$$

in cui

$$\rho_i(\sigma) = \frac{1 + m_i}{2} \delta_{\sigma,1} + \frac{1 - m_i}{2} \delta_{\sigma,-1} \quad (1.19)$$

in cui m_i è il parametro su cui effettueremo la minimizzazione. Il suffisso "*mf*" sta per *mean field*, ossia campo medio. La ρ di campo medio è normalizzata a 1:

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} \rho_i(\sigma_i) = \frac{1 + m_i}{2} + \frac{1 - m_i}{2} = 1 \quad (1.20)$$

e quindi

$$Q_{mf} = \sum_{[\sigma]} \rho_{mf} = 1 \quad (1.21)$$

e otteniamo subito

$$\langle A[\sigma_i] \rangle_{mf} = \frac{1 + m_i}{2} A(1) + \frac{1 - m_i}{2} A(-1) \quad (1.22)$$

In particolare l'ultima equazione implica

$$\langle \sigma_i \rangle_{mf} = \frac{1 + m_i}{2} - \frac{1 - m_i}{2} = m_i \quad (1.23)$$

e quindi m_i è proprio la magnetizzazione locale nel punto i . Nel seguito per semplicità ometteremo il pedice " mf ". La fattorizzazione di ρ implica

$$\langle AB \rangle = \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (1.24)$$

in modo tale che possiamo immediatamente scrivere

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle = -J \sum_{\langle i,j \rangle} m_i m_j - h \sum_i m_i \quad (1.25)$$

Per l'entropia otteniamo invece

$$S = -\langle \ln \rho \rangle = -\sum_i \langle \ln \rho_i \rangle = \sum_i s_i \quad (1.26)$$

in cui

$$s_i = \frac{1 + m_i}{2} \ln \left(\frac{1 + m_i}{2} \right) + \frac{1 - m_i}{2} \ln \left(\frac{1 - m_i}{2} \right) \quad (1.27)$$

Definiamo un funzionale Φ tale che se ρ fosse la giusta distribuzione di Boltzmann allora Φ sarebbe l'energia libera:

$$\Phi = U - \frac{1}{\beta} S = -J \sum_{\langle i,j \rangle} m_i m_j - h \sum_i m_i - \frac{1}{\beta} \sum_i s_i \quad (1.28)$$

in cui abbiamo posto $k_B = 1$, e quindi la temperatura ha le stesse dimensioni fisiche di un'energia. Imponiamo ora la condizione di estremizzazione, ossia deriviamo Φ rispetto a m_i e imponiamo che la derivata sia nulla. Per semplificare i conti scriviamo

$$-J \sum_{\langle i,j \rangle} m_i m_j = -\sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j \quad (1.29)$$

in cui J_{ij} è una matrice i cui elementi valgono J e se i e j sono i primi vicini e 0 altrimenti. Otteniamo

$$\frac{\partial \Phi}{\partial m_i} = -\sum_j J_{ij} m_j - h + \operatorname{arctanh}(m_i) = 0 \quad (1.30)$$

nella quale è stata usata l'identità

$$\ln \sqrt{\frac{1+m}{1-m}} = \operatorname{arctanh}(m) \quad (1.31)$$

Troviamo quindi l'equazione fondamentale di campo medio:

$$m_i = \tanh \left[\beta \left(\sum_j J_{ij} m_j + h \right) \right] \quad (1.32)$$

1.2.1 Un metodo alternativo

Possiamo ricavare l'equazione di campo medio partendo da un'equazione esatta. Scriviamo

$$m_i = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Q} \sum_{[\sigma]} \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (1.33)$$

(in cui ora il valore d'aspettazione è il "vero" valore d'aspettazione, non quello di campo medio). Notiamo che possiamo scrivere

$$\mathcal{H} = \bar{\mathcal{H}} + \mathcal{H}_i \quad (1.34)$$

nella quale

$$\mathcal{H}_i = \sum_j -J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sigma_i \quad (1.35)$$

e $\bar{\mathcal{H}}$ contiene tutti gli altri termini che non coinvolgono σ_i . Il valore d'aspettazione di σ_i diventa quindi

$$m_i = \frac{1}{Q} \sum'_{[\sigma]} \left(\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} \right) e^{-\beta \bar{\mathcal{H}}} \quad (1.36)$$

in cui l'apice sulla prima sommatoria significa che stiamo escludendo la somma sui σ_i , che è scritta esplicitamente dopo. Ora possiamo moltiplicare e dividere per la stessa quantità, ossia $\sum_{\sigma_i} e^{-\beta \mathcal{H}_i}$, e otteniamo

$$m_i = \frac{1}{Q} \sum_{[\sigma]} e^{-\beta \mathcal{H}} \left(\frac{\sum_{\sigma_i} \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{\sum_{\sigma_i} e^{-\beta \mathcal{H}_i}} \right) = \left\langle \tanh \left[\beta \left(\sum_j J_{ij} \sigma_j + h \right) \right] \right\rangle \quad (1.37)$$

Se ora assumiamo che la distribuzione di probabilità sia fattorizzata possiamo dire che

$$\left\langle \tanh \left[\beta \left(\sum_j J_{ij} \sigma_j + h \right) \right] \right\rangle = \tanh \left\langle \left[\beta \left(\sum_j J_{ij} \sigma_j + h \right) \right] \right\rangle \quad (1.38)$$

Ciò è facilmente comprensibile pensando alla tangente iperbolica come al suo sviluppo in serie di potenze e considerando che per una distribuzione di probabilità fattorizzata vale l'identità:

$$\langle x^n \rangle = \langle x \rangle^n \quad (1.39)$$

Otteniamo quindi l'equazione di campo medio.

1.3 Soluzioni dell'equazione di campo medio

In questa sezione poniamo per semplicità $J = 1$ (ossia misuriamo le energie e le temperature in unità di J). Inoltre se h è costante anche la magnetizzazione locale sarà costante, ossia $m_i = m \quad \forall i$. Abbiamo dunque, considerando che $\sum_j J_{ij} m_j = 2Dm$,

$$m = \tanh[\beta(2Dm + h)] \quad (1.40)$$

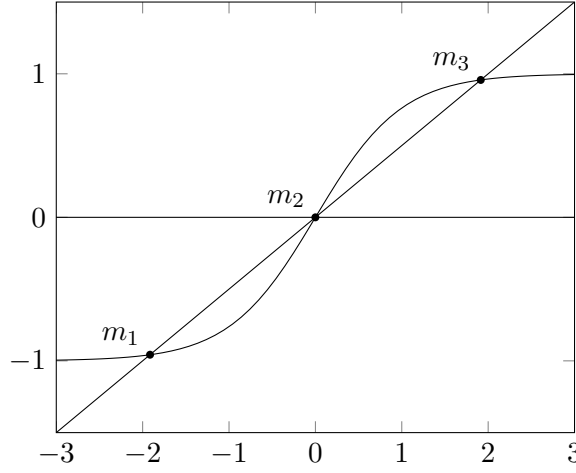


Figura 1.2: Soluzione grafica dell'equazione di campo medio per $h = 0$ e $\beta > \beta_c$ ($T < T_c$)

Poniamoci ora nel caso $h = 0$. In questo caso $m = 0$ è sempre soluzione dell'equazione precedente, ma vogliamo sapere se si tratta di un minimo o un massimo. Occorre calcolare la derivata seconda di Φ . Definendo $\phi = \Phi/N$, nella nuova notazione abbiamo

$$\frac{\partial \phi}{\partial m} = -2Dm + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1+m}{1-m} \quad (1.41)$$

e quindi

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial m^2} = -2D + \frac{1}{\beta} \frac{1}{1-m^2} \quad (1.42)$$

Perché una soluzione m che annulla la derivata prima di ϕ sia un minimo occorre che

$$1 - m^2 < \frac{1}{2D\beta} \quad (1.43)$$

Ora, se $1/2D\beta > 1$ la derivata seconda di ϕ è sempre maggiore di zero, perché m^2 è sempre minore di 1, quindi $m = 0$ costituisce un minimo ed è l'unica soluzione dell'equazione di campo medio. Invece se $1/2D\beta < 1$ allora $m = 0$ è un massimo, e compaiono altre soluzioni come mostrato in Figura 1.2. Appare dunque chiaro che $\beta_c \equiv 1/2D$ rappresenta un valore *critico* di β ; per valori di β minori di β_c (ovvero per valori di $T > T_c$) il sistema non presenta magnetizzazione spontanea, che si sviluppa invece per valori della temperatura inferiori a quella critica.

Calcoliamo la magnetizzazione spontanea m_s nel limite $T \rightarrow 0$, che equivale a $\beta \rightarrow \infty$. In questo caso possiamo scrivere

$$\tanh(2D\beta m) \simeq 1 - 2e^{-4D\beta m} \quad (1.44)$$

La magnetizzazione spontanea è dunque uguale a ± 1 a meno di correzioni esponenziali:

$$m_s \simeq \pm(1 - 2e^{-4D\beta m}) \quad (1.45)$$

Invece per $T \rightarrow T_c^-$, ossia per $2D\beta \rightarrow 1^+$, sappiamo che la magnetizzazione sarà vicina a zero, e questo ci permette di espandere la tangente iperbolica:

$$m_s \simeq 2D\beta m_s - \frac{8D^3\beta^3 m_s^3}{3} \quad (1.46)$$

Vediamo però che $8D^3\beta^3 = (\beta/\beta_c)^3$, e dunque a quest'ordine può essere trascurato: otteniamo quindi

$$m_s \propto (T_c - T)^{\frac{1}{2}} \quad (1.47)$$

Per quel che riguarda la densità di energia interna, abbiamo $u = -Dm^2$. Dunque per $T > T_c$ l'energia interna è nulla, mentre l'andamento critico al di sotto di T_c è chiaramente

$$u \propto (T_c - T)^1 \quad (1.48)$$

Il fatto che u non sia discontinuo nella transizione implica che la transizione stessa non è del prim'ordine (non c'è calore latente). Se $T = T_c$ e $h \neq 0$ (ma piccolo in valore assoluto) abbiamo

$$m = \tanh(m + h) \simeq m + h - \frac{m^3}{3} \quad (1.49)$$

(nella quale abbiamo trascurato un termine $O(h^3)$), e otteniamo quindi

$$m \propto h^{\frac{1}{3}} \quad (1.50)$$

Va notato che l'approssimazione di campo medio prevede una transizione di fase anche per $D = 1$, cosa che sappiamo essere falsa.

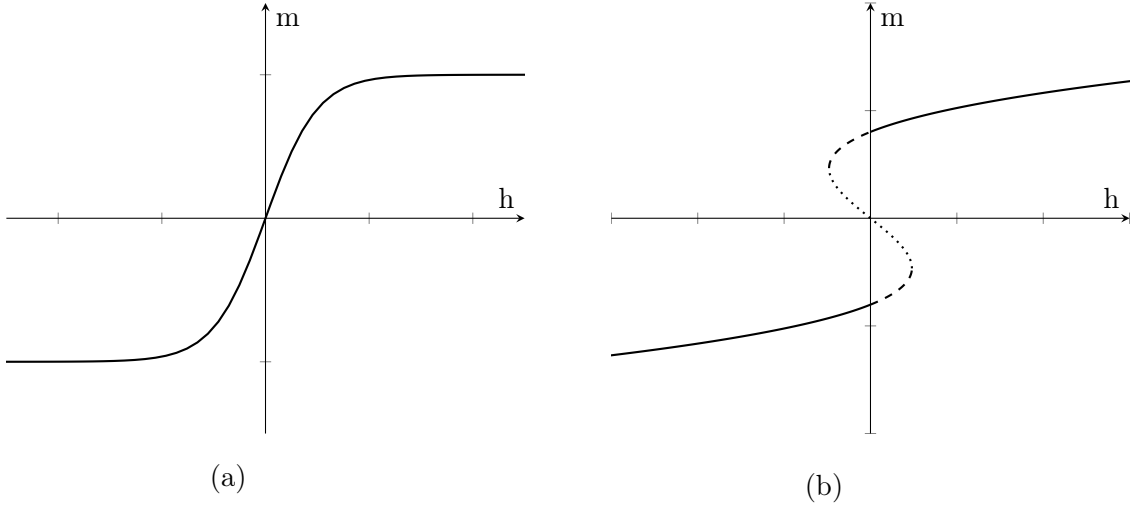


Figura 1.3: La magnetizzazione m come funzione del campo magnetico h : (a) $T > T_c$; (b) $T < T_c$; In figura 1.3 (b) le linee continue, tratteggiate e a punti indicano rispettivamente gli stati stabili, metastabili e instabili.

1.4 Un modello esattamente risolubile

La soluzione esatta del modello di Ising in $D = 2$ e le soluzioni numeriche in $D = 3$ e in dimensioni superiori mostrano che l'approssimazione di campo medio diventa sempre migliore al crescere di D . Questo risultato è intuitivamente corretto: al crescere di D cresce il numero di primi vicini di un determinato spin (il numero di coordinazione di un reticolo semplicemente cubico è pari a $2D$), e quindi è ragionevole supporre che l'approssimazione di campo medio, che si basa proprio sul fatto che la magnetizzazione locale è data dal "campo medio" dei primi vicini, migliori al crescere del numero di siti reticolari con i quali un dato spin interagisce direttamente.

Per rendere più concreta questa affermazione utilizziamo un modello esattamente risolubile. L'Hamiltoniana è uguale a quella di Ising, ma ogni spin interagisce con tutti gli altri spin del reticolo. Allo stesso tempo l'accoppiamento J decresce con N , il numero di spin totali. Abbiamo dunque

$$e^{\beta\mathcal{H}} = \exp\left(\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \beta h \sum_i \sigma_i\right) \quad (1.51)$$

in cui il fattore 2 in $\frac{\beta}{2N}$ ci permette di sommare due volte su tutti gli spin. La peculiarità di questo modello è che il fattore di Boltzmann può essere espresso come un integrale gaussiano:

$$e^{\beta\mathcal{H}} = \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp\left(-\frac{N\beta\lambda^2}{2} + \sum_i (\beta\lambda + \beta h)\sigma_i\right) \quad (1.52)$$

e possiamo quindi scrivere

$$Q = \sum_{[\sigma]} e^{-\beta\mathcal{H}} = \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp\left(-\frac{N\beta\lambda^2}{2}\right) \sum_{[\sigma]} \prod_i \exp((\beta\lambda + \beta h)\sigma_i) \quad (1.53)$$

Invertendo la somma sulle configurazioni con la produttoria sui siti, otteniamo

$$Q = \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp\left(-\frac{N\beta\lambda^2}{2}\right) \{2\cosh[\beta(\lambda + h)]\}^N \quad (1.54)$$

e in definitiva

$$Q = \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{N\beta B(\lambda)} \quad (1.55)$$

in cui

$$B(\lambda) = -\frac{\lambda^2}{2} + \frac{1}{\beta} \ln\{2\cosh[\beta(\lambda + h)]\} \quad (1.56)$$

Il metodo dello *steepest descent* ci dice che

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{Ng(x)} \right\} = \max_x \{g(x)\} + O(N^{-1}) \quad (1.57)$$

e per la densità di energia libera otteniamo proprio

$$f = \frac{A}{N} = -\frac{1}{N\beta} \ln Q \quad (1.58)$$

Dunque per calcolare f nel limite termodinamico sarà sufficiente calcolare il massimo della funzione $B(\lambda)$. Si ottiene facilmente che il valore di λ che massimizza la funzione $B(\lambda)$ soddisfa l'equazione

$$\bar{\lambda} = \tanh(\beta h + \beta \bar{\lambda}) \quad (1.59)$$

e ci chiediamo ora qual sia il significato fisico di $\bar{\lambda}$. Calcoliamo la magnetizzazione del sistema:

$$f = -\frac{B(\bar{\lambda})}{\beta} \quad m = -\frac{\partial f}{\partial h} \quad (1.60)$$

e si trova facilmente

$$m = \frac{1}{\beta} \frac{\partial B(\bar{\lambda})}{\partial h} = \tanh(\beta h + \beta \bar{\lambda}) \quad (1.61)$$

e dunque $\bar{\lambda} = m$. Quindi in questo caso l'equazione di campo medio risolve esattamente il modello.

1.5 Transizioni di fase

La maggior parte delle transizioni di fase può essere descritta da un parametro d'ordine. Esso vale 0 nella fase disordinata (cioè per alte T) ed è diverso da 0 nella fase ordinata (cioè per $T < T_c$).

Normalmente le transizioni si classificano in transizioni del primo e del secondo ordine. Il nome deriva dall'ordine di derivazione dell'energia libera necessaria per osservare il comportamento discontinuo: secondo la classificazione di Ehrenfest, se l'energia libera è differenziabile $(k-1)$ volte, ma non k volte, allora la singolarità è chiamata *transizione di ordine k* . È oramai prassi chiamare qualunque transizione di ordine superiore al primo *transizione del second'ordine*.

Il modello di Ising presenta una transizione di fase del secondo ordine il cui comportamento è descritto da degli esponenti critici. Riportiamo il comportamento delle grandezze termodinamiche rilevanti in funzione di tali esponenti:

$$\begin{cases} M \sim |T - T_C|^\beta & \text{Magnetizzazione} \\ \chi_M \sim |T - T_C|^{-\gamma} & \text{Suscettività magnetica} \\ C_V \sim |T - T_C|^{-\alpha} & \text{Calore specifico} \\ \xi \sim |T - T_C|^{-\nu} & \text{Lunghezza di correlazione} \end{cases} \quad (1.62)$$

Per il modello di Ising in due dimensioni gli esponenti critici sono noti e hanno i valori: $\alpha = 0$, $\beta = 0.125$, $\gamma = 1.75$, $\nu = 1$. Per $\alpha = 0$ il calore specifico ha una divergenza di tipo logaritmico.

È importante dire che le transizioni di fase sono possibili solo se il volume del sistema è

infinito. Infatti, a volume finito, se lo spazio delle configurazioni è compatto, la funzione di partizione Z è una funzione intera: $|Z(\beta)| = |\int dq \exp(-\beta H(q))| \leq V_q \exp(|\beta| |H|)$ anche per β complessi, in cui $V_q \equiv \int dq$ è il volume dello spazio delle configurazioni e $|H| = \max[|H(q)|]$. Nel caso limite lo spazio delle configurazioni è un set finito di punti e Z è una combinazione lineare di esponenziali. Se lo spazio delle configurazioni non è compatto ma $Z(\beta) = \int dq \exp(-\beta H(q))$ è finito (cioè l'integrale converge) per qualunque β reale positivo, allora lo stesso integrale esisterà per ogni β complesso tale che $\text{Re}\beta > 0$ ($|Z(a+ib)| \leq Z(a)$); è ovvio che l'integrale che definisce β divergerà per $\beta \leq 0$ quando lo spazio delle configurazioni è infinito (se H è positivo).

È stato dimostrato che la funzione di partizione Z di una Hamiltoniana "ragionevole" (ovvero tale per cui $Z(\beta)$ è definita per $\beta > 0$) è una funzione analitica nella metà positiva del piano β complesso. Chiediamoci ora cosa succeda all'energia libera $-\frac{1}{V\beta} \ln Z(\beta)$. Se Z è analitica, allora il suo logaritmo può avere delle singolarità solo nei punti in cui $Z = 0$. Per valori reali dei parametri (quali temperatura T e campo magnetico h) la funzione di partizione è somma di termini positivi quindi non può avere zeri; di conseguenza l'energia libera è analitica per valori di β positivi vicini all'asse reale per un sistema a volume finito. Al contrario, nel limite di volume infinito, è possibile osservare una funzione non analitica per l'energia libera se gli zeri complessi della funzione di partizione pizzicano l'asse reale. Un esempio può essere quello di un sistema di volume V che abbia solo due stati, alla stessa energia in assenza di campo magnetico esterno, che abbiano magnetizzazione totale $\pm V$ rispettivamente. Possiamo facilmente ottenere per l'energia libera in funzione del campo magnetico h

$$\begin{aligned} Z(h) &= 2\cosh(\beta h V), \quad f(h) = -\frac{1}{\beta V} \ln[2\cosh(\beta h V)], \\ m(h) &= \tanh(\beta h V), \quad Z\left(\frac{(2n+1)\pi i}{2\beta V}\right) = 0. \end{aligned} \tag{1.63}$$

Quando $V \rightarrow \infty$, gli zeri della funzione di partizione Z pizzicano l'asse reale h ad $h = 0$, e il valore d'aspettazione della magnetizzazione diventa $m = \text{sgn}(h)$. Nei sistemi reali a volume finito l'energia interna varia di k_B quando la temperatura ha un cambiamento dell'ordine di 10^{-23} K, e *for all practical purposes* siamo in presenza di una discontinuità. Per avere discontinuità matematicamente formali dobbiamo andare al limite di volume infinito, motivo per cui tutte le transizioni che è possibile studiare con un approccio simulativo in cui V è necessariamente finito sono in realtà "pseudo" transizioni di fase.

1.6 Modello di Potts

Il modello di Potts è una generalizzazione del modello di Ising in cui immaginiamo che in ogni sito del reticolo sia sempre presente una particella, ma in questo caso dotata di più di due stati possibili. Un modello a 4 componenti fu presentato da Ashkin e Teller nel 1943, ma il modello generalizzato a q componenti deve il suo nome a Renfrey Potts che trattò il problema nella sua tesi di dottorato del 1951. L'interesse che gravita intorno al modello di Potts da decenni è dovuto all'enorme numero di applicazioni che esso ha nei fenomeni

di interazione collettiva su reticolo; si è inoltre notato che lo studio del comportamento critico dei materiali ferromagnetici è più ricco e generale rispetto a quello fatto utilizzando semplicemente il modello di Ising. Nei successivi sforzi di esplorare le sue proprietà, il modello di Potts è diventato un importante banco di prova per i vari approcci e metodi risolutivi nello studio delle teorie di punto critico.

1.6.1 Descrizione modello

Come abbiamo avuto modo di vedere, il modello di Ising consiste in un reticolo interagente di spin che possono essere paralleli o antiparalleli. Un'appropriata generalizzazione è quella di poter assegnare ad ogni spin una delle Q direzioni equispaziate specificate dagli angoli

$$\Theta_n = \frac{2\pi n}{Q} \quad n = 0, 1, \dots, Q-1. \quad (1.64)$$

Nella sua forma più generica l'interazione tra primi vicini dipende solo dall'angolo relativo tra i due spin e la sua hamiltoniana risulta essere

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J(\Theta_{ij}) \quad (1.65)$$

in cui $J(\Theta)$ è una funzione 2π -periodica e $\Theta_{ij} = \Theta_{n_i} - \Theta_{n_j}$ è l'angolo tra i due spin nei siti vicini i e j .

Il modello suggerito da Domb, che prende il nome di *modello planare*, suggerisce per l'espressione della $J(\Theta)$ di scegliere

$$J(\Theta) = -\epsilon_1 \cos(\Theta) \quad (1.66)$$

mentre il modello seguito da Potts (anche detto *standard Potts model*) usa come espressione della $J(\Theta)$:

$$J(\Theta_{ij}) = \epsilon_2 \delta_{Kr}(n_i, n_j) \quad (1.67)$$

dove

$$\delta_{Kr}(\alpha, \beta) = \frac{1}{Q} [1 + (Q-1) \mathbf{e}^\alpha \cdot \mathbf{e}^\beta] \quad (1.68)$$

in cui \mathbf{e}^α , $\alpha = 0, 1, \dots, q-1$ sono vettori in unità Q che puntano nelle Q direzioni simmetriche di un ipertetraedro in $q-1$ dimensioni. In questo modello otteniamo un comportamento ferromagnetico per $\epsilon_2 > 0$ e antiferromagnetico per $\epsilon_2 < 0$.

Con questo metodo Potts fu in grado di determinare all'interno del suo modello il comportamento critico in un reticolo quadrato per $Q = 2, 3, 4$. I due metodi coincidono nel caso $Q = 2$ (Ising) e per $Q = 3$ quando $\epsilon_2 = 2\epsilon_1$ e $\epsilon_2 = 3\epsilon_1/2$ rispettivamente, mentre non sembra esserci alcun tipo di relazione tra il modello planare e il modello standard per $Q > 4$.

Oltre all'interazione fra siti primi vicini possiamo introdurre nell'Hamiltoniana del modello un'interazione multisito così come un termine dovuto alla presenza di un campo

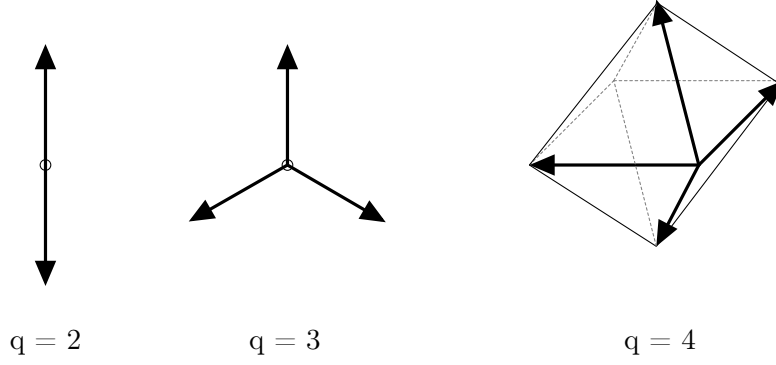


Figura 1.4: Vettori nelle Q direzioni simmetriche di un ipertetraedro in $Q - 1$ dimensioni.

esterno. Per un reticolo G di N siti, l'Hamiltoniana \mathcal{H} avrà dunque l'espressione

$$-\beta\mathcal{H} = L \sum_i \delta_{Kr}(\sigma_i, 0) + K \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{Kr}(\sigma_i, \sigma_j) + K_3 \sum_{\langle i,j,k \rangle} \delta_{Kr}(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k) + \dots \quad (1.69)$$

dove $\beta = 1/kT$, $\sigma_i = 0, 1, \dots, Q - 1$ è il valore dello spin nel i -esimo sito e

$$\delta_{Kr}(\sigma_i, \dots, \sigma_k) = \begin{cases} 1 & \text{se } \sigma_1 = \dots = \sigma_k \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (1.70)$$

In cui $K = \beta\epsilon_2$, K_n con $n \geq 3$ è il coefficiente che "pesa" la forza dell'interazione di n -esimo sito ed L è il campo esterno applicato allo stato di spin 0.

La funzione di partizione risulta

$$Z_G(Q; L, K, K_n) = \sum_{\sigma_i=0}^{Q-1} e^{-\beta\mathcal{H}} \quad (1.71)$$

Le proprietà fisiche del sistema si derivano nella solita maniera andando al limite termodinamico. Le grandezze fisiche rilevanti sono l'energia libera per sito

$$f(Q; L, K, K_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_G(Q; L, K, K_n) , \quad (1.72)$$

l'energia per sito

$$E(Q; L, K, K_n) = -\frac{\partial}{\partial \beta} f(Q; L, K, K_n) \quad (1.73)$$

e la magnetizzazione per sito

$$M(Q; L, K, K_n) = -\frac{\partial}{\partial L} f(Q; L, K, K_n) . \quad (1.74)$$

Il parametro d'ordine m , che assume come valori 0 e 1 rispettivamente quando il sistema è completamente disordinato e completamente ordinato è definito come

$$m(Q; L, K, K_n) = \frac{QM - 1}{Q - 1} \quad (1.75)$$

Gli esponenti critici posso essere definiti anche in questo caso analizzando il comportamento delle quantità termodinamiche vicino alla temperatura critica T_c .

È stato inoltre dimostrato che nel caso del reticolo quadrato la transizione di fase del modello di Potts è continua per $Q < 5$ mentre per $Q \geq 5$ la transizione diventa del prim'ordine e si potrà notare la coesistenza di più fasi, fenomeno che rende inadatti i metodo Monte Carlo basati sull'algoritmo di Metropolis per simulare il sistema. Per ovviare al problema ricorreremo ad algoritmi che non risentono della bassa probabilità di transizione che si ha nel passaggio da una fase all'altra nonostante il gap in energia libera sia molto elevato, ma sfrutteremo piuttosto metodi che permettono di fare il sampling dell'entropia e grazie ad essa il calcolo della funzione di partizione.

Vale la pena citare il fatto che il modello di Potts è spesso studiato in analogia al problema del *graph coloring*: definiamo $P_G(Q)$ come il numero di modi in cui il vertice di un grafo G può essere colorato con q colori diversi in modo tale che nessuna coppia di vertici direttamente collegati siano dello stesso colore. $P_G(Q)$ è una funzione di Q nota come *funzione cromatica* per il grafo G .

Consideriamo ora un modello di Potts antiferromagnetico su G con la sola interazione fra siti primi vicini ($K < 0$). Passando al limite per la temperatura che scende a 0 ($K \rightarrow -\infty$) avremo che la funzione di partizione del sistema si riduce a

$$Z_G(Q; K = -\infty) = P_G(Q) \quad (1.76)$$

Questa semplice connessione tra la funzione di partizione per il modello di Potts e la funzione cromatica è valida per un grafo G in qualunque dimensione.

Capitolo 2

Simulazioni Monte Carlo

2.1 Introduzione al metodo Monte Carlo

Con il nome di "Metodo Monte Carlo" ci si riferisce a tutte quelle tecniche che fanno uso di generatori di numeri casuali per la risoluzione di problemi matematici che nella pratica sono troppo difficili, se non addirittura impossibili, da risolvere utilizzando i tradizionali procedimenti numerici o analitici.

L'applicazione di questo metodo non è ristretta solo ai problemi di natura statistica ma include tutti quei casi in cui si riesce a trovare un collegamento tra il problema in esame ed il comportamento di un certo sistema aleatorio: il valore di un integrale definito può ad esempio essere calcolato anche usando dei numeri casuali. Dopo gli anni '50, grazie all'avvento dei computer che permettevano la rapida esecuzione di lunghi calcoli e la generazione di numeri casuali, questo metodo è diventato uno strumento indispensabile per la ricerca scientifica. Vediamo ora su quali fondamenti matematici si basa tale metodo.

Consideriamo una variabile Y associata ad un qualsiasi fenomeno aleatorio come funzione di k variabili casuali (X_1, X_2, \dots, X_n) :

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_n) \quad (2.1)$$

La statistica dice che il fenomeno aleatorio in questione può essere studiato e caratterizzato in maniera esauriente, ricorrendo solo al calcolo dei valori medi delle grandezze in questione e alla loro dispersione (che, com'è ben noto, è esprimibile come $\text{Var}[X] = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$ e quindi funzione di valori medi) e dunque al calcolo di integrali del tipo

$$I = \langle Y \rangle = \int_D f(x_1, x_2, \dots, x_k) p(x_1, x_2, \dots, x_k) dx_1 \dots dx_k, \quad (2.2)$$

in cui $p(x_1, x_2, \dots, x_k)$ è la densità di probabilità normalizzata delle variabili (X_1, X_2, \dots, X_n) , definite in $D \in \mathbb{R}^k$:

$$\int_D p(x_1, x_2, \dots, x_k) dx_1 \dots dx_k = 1 \quad (2.3)$$

Se simuliamo N prove della variabile aleatoria T utilizzando diversi insiemi indipendenti di numeri casuali *estratti dalla densità* p , per le proprietà della media di un campione sappiamo che la quantità

$$T_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{ki}) \quad (2.4)$$

è una stima consistente e corretta di I . Se a questo punto supponiamo che la distribuzione della variabile aleatoria Y abbia una varianza σ_Y^2 finita possiamo concludere che:

$$P\left\{|T_N - I| \leq \frac{\sigma_Y}{\sqrt{N}}\epsilon\right\} \geq 1 - \frac{1}{\epsilon^2} \quad \epsilon \geq 1. \quad (2.5)$$

Vediamo quindi che i valori simulati convergono in probabilità verso la quantità da stimare I come $\sigma T/\sqrt{N}$. Risulta pertanto che l'unico modo per aumentare la precisione della stima T_N è quello di aumentare il numero N di eventi simulati.

Per generare variabili aleatorie continue di densità qualsiasi si sfrutta il seguente

Teorema (Variabili aleatorie cumulative). Se X è una variabile aleatoria avente densità $p(x)$ continua, la variabile aleatoria cumulativa C :

$$C(X) = \int_{-\infty}^X p(x)dx \quad (2.6)$$

è uniforme in $[0, 1]$. \square

L'importanza concettuale del teorema risiede nel fatto che dimostra che *la variabile cumulativa è sempre uniforme, qualunque sia la distribuzione d'origine*. Se l'integrale è noto per via analitica, allora i valori della variabile cumulativa C sono esprimibili come una funzione nota $c = F(x)$, e se questa funzione è invertibile allora la variabile

$$X = F^{-1}(C) \quad (2.7)$$

ha densità $p(x)$. Disponendo dunque di un generatore di variabili uniformi in $[0,1]$, *si possono generare variabili aventi una densità qualsiasi*. I due passi dell'algoritmo per la generazione di una variabile casuale continua X , avente densità $p(x)$ e definita in $[a, b]$ sono:

- generare un numero $0 \leq \xi \leq 1$
- risolvere rispetto a x l'equazione:

$$\int_a^x p(t)dt = \xi. \quad (2.8)$$

2.2 Applicazione metodo e Importance Sampling

Supponiamo ora di voler studiare un sistema fisico, ad esempio un reticolo di spin, e supponiamo che questo sistema si trovi in un certo macrostato. Possiamo indicare con q uno dei microstati compatibili con il nostro macrostato e con $A(q)$ un'osservabile funzione del nostro microstato. La media all'equilibrio della nostra $A(q)$ è data da

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_q A(q) e^{-\beta \mathcal{H}(q)} \quad (2.9)$$

dove Z è la funzione di partizione del sistema

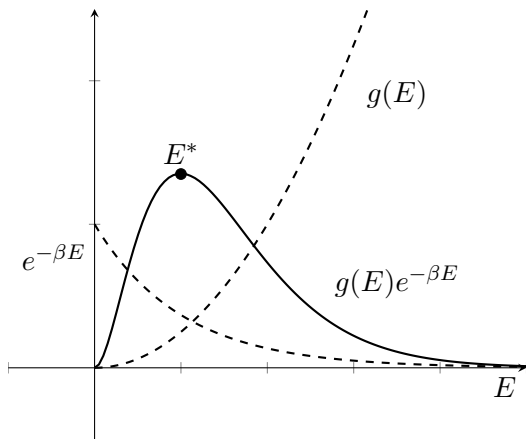
$$Z = \sum_q e^{-\beta \mathcal{H}(q)} \quad (2.10)$$

e $\mathcal{H}(q)$ l'Hamiltoniana del nostro sistema. A questo punto per studiare correttamente il nostro sistema e poter calcolare le sue grandezze rappresentative è necessaria la conoscenza della funzione di partizione Z .

Scelto di simulare il nostro sistema tramite il metodo Monte Carlo, ci preoccupiamo di estrarre dall'insieme di tutte le configurazioni possibili del sistema un campione rappresentativo, che chiameremo $\{q\}$, con una distribuzione di probabilità all'equilibrio data da

$$P_{eq}(q) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(q)}}{Z} . \quad (2.11)$$

Sostanzialmente, anziché essere costretti a scegliere casualmente tra tutte le configurazioni possibili del nostro sistema per poi pesarle una ad una con il fattore di Boltzmann, estraiamo un certo numero N di configurazioni con una probabilità assegnata data da $e^{-\beta E}$ e le pesiamo uniformemente. Dal punto di vista teorico questi due formulazioni sono equivalenti alla luce del come l'energia è distribuita tra i vari livelli di energia del sistema assumendo che quest'ultima sia una variabile continua.



Per un sistema come il nostro la probabilità $P(E)dE$ che un certo stato abbia energia nell'intervallo $[E, E + dE]$ è data da

$$P(E)dE \propto g(E)e^{-\beta E}dE \quad (2.12)$$

dunque come prodotto di due fattori: la densità degli stati che è una funzione monotona crescente di E , e il peso di Boltzmann che è una funzione monotonamente decrescente di E . L'esponenziale fa sì che $P(E) \rightarrow 0$ quando $E \rightarrow \infty$, mentre $g(E)$ fa ottenere il medesimo risultato per $E \rightarrow 0$. Entrambe le funzioni sono positive e il loro

prodotto presenterà un estremo per un certo valore di E , che chiamiamo E^* . In realtà questo estremo è un massimo, facilmente calcolabile come

$$\frac{dP(E)}{dE}|_{E=E^*} = \left[e^{-\beta E} \frac{dg(E)}{dE} - \beta g(E) e^{-\beta E} \right]_{E=E^*} = 0 \quad (2.13)$$

che possiamo chiaramente riscrivere come

$$\frac{d \ln g(E)}{dE}|_{E=E^*} = \beta \quad (2.14)$$

e ricordando che $S = k \ln g(E)$ e la relazione

$$\left(\frac{\partial S(E)}{\partial E} \right)_{E=\langle E \rangle} = \frac{1}{T} \quad \text{otteniamo} \quad E^* = \langle E \rangle \quad (2.15)$$

cioè *nel limite termodinamico* il valore più probabile dell'energia coincide con il valore medio $\langle E \rangle$ definito come

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_k E_k e^{-\beta E_k}}{\sum_k e^{-\beta E_k}} \quad (2.16)$$

Questo ci è utile per capire come si dispongono i livelli di energia per il nostro sistema: se espandiamo il logaritmo della densità di probabilità $P(E)$ intorno al valore $E^* \simeq \langle E \rangle$:

$$\begin{aligned} \ln[g(E)e^{-\beta E}] &= \left(-\beta \langle E \rangle + \frac{S}{k_B} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \left[\ln\{e^{-\beta E} g(E)\} \right]_{E=\langle E \rangle} (E - \langle E \rangle)^2 + \dots \\ &= -\beta(\langle E \rangle - TS) - \frac{(E - \langle E \rangle)^2}{2k_B T^2 C_V} + \dots \end{aligned} \quad (2.17)$$

dove nel primo passaggio abbiamo usato il fatto che la derivata si annulli in virtù della condizione di equilibrio, mentre nel secondo abbiamo usato i passaggi

$$\left(\frac{\partial^2 S(E)}{\partial E^2} \right)_{E^*=\langle E \rangle} = \left(\frac{\partial}{\partial E} \frac{1}{T} \right)_{E^*=\langle E \rangle} = - \left(\frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial E} \right)_{E^*=\langle E \rangle} = - \frac{1}{T^2 C_V} \quad (2.18)$$

Alla fine otteniamo che *nel limite termodinamico* la densità di probabilità $P(E)$ è ottimamente approssimata dalla gaussiana

$$P(E) \propto e^{-\beta(\langle E \rangle - TS)} \exp \left\{ - \frac{(E - \langle E \rangle)^2}{2k_B T^2 C_V} \right\} \quad (2.19)$$

che mostra che i valori dell'energia che più contano sono quelli intorno al valore medio, e che all'aumentare di N la gaussiana diventa sempre stretta e alta. Il risultato è intuitivo pensando al numero di microstati di un reticolo di spin che descrivono un particolare

macrostato: quante configurazioni esistono in un reticolo di N particelle in cui tutte le particelle hanno spin verso l'alto o verso il basso? Solo 1 sulle 2^N possibili, mentre all'opposto avremo un numero elevatissimo di configurazioni che descrivono il macrostato in cui metà degli spin puntano in una direzione e metà nell'altra. Alla luce di tutto ciò, è giustificata la scelta di estrarre un certo numero di configurazioni casualmente intorno al valore medio dell'energia per poi pesarle uniformemente.

Operando in tal maniera la media della nostra grandezza fisica $A(q)$ si riduce a

$$\langle A \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(q_i) . \quad (2.20)$$

Questo metodo prende il nome di *importance sampling* ed è vantaggioso dal punto di vista computazionale rispetto al campionamento normale in quanto rende più efficiente la selezione dei microstati e comporta un minor spesa di risorse.

Vediamo ora operativamente quali sono i passi da seguire per applicare questo metodo ad un sistema come un reticolo di spin: cominciamo considerando un sistema a $t = 0$ nel suo stato iniziale q_0 con una probabilità $P(q_0, t)$ assegnata. A questo punto facciamo evolvere il sistema operando una piccola modifica (come nel caso di un singolo spin-flip su una particella scelta casualmente nel caso di un reticolo di spin). Se indichiamo con T la trasformazione che porta il sistema nel nuovo stato q_1 avremo che $T(q_0) = q_1$, e reiterando il processo applicando la medesima trasformazione ad ogni nuovo stato ottenuto applicando la trasformazione allo stato immediatamente precedente otterremo una catena di microstati $q_0, q_1, q_2, \dots, q_n$, detta *catena di Markov*.

La probabilità di transizione $W_T(q \rightarrow q')$ è la probabilità che il microstato q evolva in q' applicando la trasformazione T . Per essa consideriamo le seguenti proprietà:

$$W_T(q \rightarrow q') \geq 0 \quad \int dq' W_T(q \rightarrow q') = 1 \quad (2.21)$$

che esprimono l'equiprobabilità a priori di poter raggiungere un qualsiasi stato q' a partire dal medesimo stato q . Se inoltre la nostra probabilità di transizione $W_T(q \rightarrow q')$ obbedisce alla condizione di bilancio detagliato

$$\sum_{q'} P_{eq}(q') W_T(q' \rightarrow q) = \sum_q P_{eq}(q) W_T(q \rightarrow q') \quad (2.22)$$

oltre ad ottenere la reversibilità del processo di evoluzione, avremo che la nostra trasformazione T sarà ergodica, ovvero sarà possibile raggiungere ogni microstato dell'ensemble di equilibrio applicandola a qualsiasi microstato iniziale *in un numero finito di passi*. In tale caso otteniamo l'importante risultato

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(q, t) = P_{eq}(q) \quad (2.23)$$

ovvero per $t \rightarrow \infty$ la distribuzione di probabilità del sistema tenderà alla distribuzione all'equilibrio.

Nella pratica la condizione che ci permette di approssimare la distribuzione di probabilità del nostro sistema con la distribuzione all'equilibrio è implementata a partire dalla condizione di bilancio dettagliato:

$$\frac{W_T(q \rightarrow q')}{W_T(q' \rightarrow q)} = \frac{P_{eq}(q')}{P_{eq}(q)} = e^{\beta(E(q) - E(q'))} \quad (2.24)$$

Ciò che si nota è che per la valutazione di $P_{eq}(q')/P_{eq}(q)$ non è più necessario sommare su tutte le configurazioni del sistema per dover ottenere la funzione di partizione: è sufficiente notare che il rapporto $P_{eq}(q')/P_{eq}(q)$ dipende solo da $\Delta E = E(q') - E(q)$ e che le probabilità di transizione sono legate da

$$W_T(q \rightarrow q') = e^{-\beta \Delta E} W_T(q' \rightarrow q) . \quad (2.25)$$

Tutto ciò garantisce che la sequenza di microstati generati dal processo di importance sampling è equivalente ad un set che si otterrebbe estraendo casualmente tra i microstati dell'ensemble all'equilibrio.

Dalla scelta di $W_T(q \rightarrow q')$ si distinguono i diversi algoritmi; non ci concentreremo in particolare su 3 di essi: l'*algoritmo di Metropolis*, l'*entropic sampling* e l'*algoritmo di Wang-Landau*.

2.3 Algoritmo di Metropolis

L'algoritmo di Metropolis prevede come scelta di $W_T(q \rightarrow q')$ una probabilità di transizione che "guidi" l'evoluzione del sistema verso stati sempre più probabili. In questo modo si arriva ad una situazione stazionaria che ben approssima la nostra richiesta che $\lim_{t \rightarrow \infty} P(q, t) = P_{eq}(q)$.

La scelta di sarà dunque:

$$\begin{cases} W_T(q \rightarrow q') = 1 & \text{se } \Delta E \leq 0, \\ W_T(q \rightarrow q') = e^{-\beta \Delta E} & \text{se } \Delta E > 0. \end{cases} \quad (2.26)$$

L'algoritmo è definito dai seguenti passi:

1. Si inizializza il nostro sistema scegliendo uno microstato di partenza dal set di tutti i microstati possibili. Ciò si ottiene ad esempio nel caso di un reticolo di spin inizializzando ogni sito con un valore random dello spin scelto fra i due possibili stati. Sarebbe preferibile scegliere un microstato non troppo dissimile da uno di quelli appartenenti all'ensemble dei microstati di equilibrio in quanto ridurrebbe il numero di passi necessari affinché il sistema raggiunga l'equilibrio,
2. Si agisce localmente sul valore di un singolo spin scelto casualmente flipandolo e ottenendo così un diverso microstato,
3. Si valuta la differenza di energia $\Delta E = E_{q'} - E_q$ associata al passaggio dal microstato q al microstato q' ,

4. Se $\begin{cases} \Delta E \leq 0 & \text{si accetta il microstato e si passa al punto 6} \\ \Delta E > 0 & \text{si pone } k = e^{-\beta \Delta E} \end{cases}$
5. Attraverso un generatore di numeri random si genera un valore w da una distribuzione uniforme sull'intervallo $[0, 1)$. Se $w \leq k$ il nuovo microstato viene accettato, altrimenti viene mantenuto il microstato precedente,

I punti dall'1 al 5 costituiscono quello che viene chiamato un *passo Monte Carlo* e vengono eseguiti una volta per ogni spin del reticolo (L^2 volte nel caso di un reticolo $L \times L$) scegliendo casualmente tra essi in modo da garantire la condizione di bilancio dettagliato.

6. Si ripetono N passi Monte Carlo per termalizzare il sistema (portarlo all'equilibrio). Infine si ripetono N' scansioni tenendo nota di tutti i valori delle variabili locali per elaborarli e ottenere così i valori di tutte le grandezze termodinamiche globali di cui si voglia conoscere la misura e si procede con il calcolo dei loro valori medi e delle loro dispersioni.

2.4 Entropic Sampling

La maggior parte degli algoritmi di sampling che utilizzano il Metodo Montecarlo si basano sull'idea dell'importance sampling introdotto da Metropolis e sulla scelta di una particolare probabilità di transizione $W_T(q \rightarrow q')$ che determina il modo in cui vengono scelte le configurazioni che approssimano il sistema all'equilibrio. L'importance sampling è un buon algoritmo di sampling quando si tratta di calcolare le medie delle osservabili del sistema ma risulta inefficace nella descrizione di sistemi che all'equilibrio presentino la coesistenza di più fasi, perché la probabilità di "saltare" da un microstato di una fase all'altra è molto bassa e per ottenere buoni dati bisognerebbe fare molte simulazioni. L'*Entropic sampling* è un algoritmo Monte Carlo che permette di ottenere qualsiasi distribuzione delle grandezze desiderate con una singola simulazione e di cui l'importance sampling rappresenta un caso particolare.

L'idea principale che sta alla base di questo algoritmo è quella di campionare l'entropia di un sistema a temperatura infinita (ovvero nel limite in cui $\beta \rightarrow 0$). Per affrontare il problema, decidiamo di lavorare nello spazio delle energie, ma la scelta è indifferente perché potremmo lavorare in qualunque rappresentazione senza esserne vincolati. In questa rappresentazione scriviamo la nostra funzione di partizione Z come

$$Z(\beta) = \sum_q e^{-\beta E(q)} = \sum_E g(E) e^{-\beta E} = \sum_E e^{[S(E) - \beta E]} \quad (2.27)$$

dove $g(E)$ e $S(E)$ sono la densità degli stati e l'entropia per una E fissata rispettivamente e le due grandezze solo legate da

$$S = k_B \ln g(E) \quad (2.28)$$

Nel caso dell'importance sampling, abbiamo che per ottenere una distribuzione di Boltzmann del tipo $P(q) \propto e^{-\beta E(q)}$ o $P(E) \propto e^{S(E) - \beta E}$ è sufficiente imporre, oltre all'ergodi-

cità, la condizione di bilancio dettagliato

$$\frac{W_T(q \rightarrow q')}{W_T(q' \rightarrow q)} = e^{-\beta[E(q')-E(q)]} \quad (2.29)$$

mentre nell'Entropic Sampling avendo $\beta \rightarrow \infty$ otteniamo per la funzione di partizione

$$Z(\beta = 0) = \sum_q 1 = \sum_E e^{S(E)} \quad (2.30)$$

e, per ottenere una distribuzione arbitraria del tipo

$$P(E) \propto e^{A(E)} = e^{S(E)-J(E)} \quad (2.31)$$

è sufficiente imporre, oltre all'ergodicità, una condizione *simile* a quella di bilancio dettagliato

$$\frac{W_T(q \rightarrow q')}{W_T(q' \rightarrow q)} = e^{-[J(E(q'))-J(E(q))]} \quad (2.32)$$

Le ultime due equazioni sono le equazioni principali su cui è basato l'algoritmo di Entropic Sampling. È banale osservare che l'algoritmo di importance sampling è un caso particolare di questo nuovo algoritmo nel caso in cui $J(E) = \beta E$.

A questo punto per ottenere la funzione di partizione del sistema è sufficiente ottenere un'espressione per l'entropia $S(E)$, quindi il nostro obiettivo sarà quello di ottenere $S(E)$ per un'assegnata $J(E)$ e successivamente fare una simulazione MC per ottenere la nostra $P(E)$.

Se ponessimo ad esempio $J(E) = S(E)$ con l'esatta $S(E)$ del sistema, otterremmo, entro gli errori statistici, una distribuzione uniforme nello spazio delle energie. Con una stima anche piuttosto rozza di $S(E)$ è possibile campionare tutto lo spazio delle energie in una singola simulazione MC per poi affinare la stima di $S(E)$ e ripetere il processo fino al raggiungimento del range di energia desiderato.

I passi di quest'algoritmo di affinamento di $S(E)$ sono:

1. Si parte con una configurazione random per il nostro sistema e si inizializza $J(E) = S(E) = 0 \quad \forall E$,
2. Si ottiene l'istogramma delle energie $H(E)$ effettuando una breve scansione MC e lo si accetta in accordo con la condizione (2.32)
3. La nuova stima di $S(E)$ sarà data da

$$S(E) = \begin{cases} J(E), & \text{se } H(E) = 0 \\ J(E) + \ln H(E), & \text{altrove} \end{cases} \quad (2.33)$$

Questi 3 passi definiscono un'iterazione dell'algoritmo. Con questa nuova stima di $J(E) = S(E)$ si ripete l'iterazione fino al raggiungimento del range di energie desiderato. È una buona idea quella di aumentare il numero delle scansioni MC all'aumentare del range di

energie da coprire, inoltre visto che l'entropia scala con il volume, la $S(E)$ stimata per un sistema di dimensione data rappresenta un'ottima stima per l'entropia $S(E)$ di un sistema di dimensioni maggiori.

Questo algoritmo presenta dei vantaggi dal punto di vista dell'applicabilità, in quanto è applicabile ad ogni sistema a cui possa essere applicato il metodo Monte Carlo, e tramite esso si possono calcolare i valori di variabili del sistema come entropia e funzione di partizione anche in casi in cui la probabilità di tunneling da una fase all'altra è molto piccola. Tuttavia, l'entropic sampling non è un algoritmo molto efficiente dal punto di vista computazionale.

2.5 Algoritmo Wang-Landau

Descriviamo ora invece un algoritmo Monte Carlo che si discosta ancor di più dall'idea di base dell'algoritmo di Metropolis (in cui viene campionata la distribuzione di probabilità degli stati a temperatura fissata) che prende il nome di algoritmo di Wang-Landau. L'idea che sta alla base di questo algoritmo è (come nel caso dell'importance sampling) quella di porsi nello spazio delle energie per estrarre la densità degli stati in funzione dell'energia $g(E)$ (ovvero il numero di stati possibili per il nostro sistema ad energia E fissata) e riuscire ad ottenere un'espressione per la funzione di partizione che permetta di calcolare immediatamente le quantità termodinamiche associate al sistema come energia libera ed entropia.

Anche in questo caso sfruttiamo il fatto che $g(E)$ non dipende dalla temperatura e riscriviamo la funzione di partizione come

$$Z = \sum_{\{q\}} e^{-\frac{E}{k_B T}} = \sum_E g(E) e^{-\frac{E}{k_B T}} \quad (2.34)$$

dove con $\{q\}$ si intende ovviamente l'insieme delle configurazioni possibili del sistema. Una volta ottenuta $g(E)$ dalla nostra simulazione possiamo considerare il modello "risolto", visto che è possibile calcolare tutte le quantità che ci interessano.

Tutti i metodi precedentemente utilizzati nell'affrontare il calcolo diretto di $g(E)$ che si basano sull'istogrammazione dei valori dell'energia presentano il problema dello scaling con il volume, che rende proibitive le simulazioni per grossi sistemi visto che richiederebbero un tempo macchina enorme per esser risolti.

Questo algoritmo a differenza dei precedenti stima direttamente e accuratamente $g(E)$ tramite un random walk che produce un istogramma piatto nello spazio delle energie $H(E)$. La stima di $g(E)$ migliora ad ogni passo del random walk, e lo fa utilizzando un parametro moltiplicativo, opportunamente modificato ad ogni iterazione, che permette una veloce convergenza al valore reale.

2.5.1 Descrizione Algoritmo

Se eseguiamo un semplice random walk nello spazio delle energie del nostro sistema di spin flippano una particella alla volta e accettando la modifica per ogni valore dell'ener-

già così ottenuto, avremmo che l'istogramma $H(E)$ convergerebbe alla densità $g(E)$ vera nel limite di un random walk tanto lungo da generare tutte le possibili configurazioni di spin del sistema. Nella realtà un random walk di tale lunghezza è impensabile: basti pensare che per un reticolo di spin 10×10 sono possibili $2^{100} \approx 1.3 \times 10^{30}$ configurazioni per rendersi conto che dal punto di vista delle risorse di calcolo un approccio del genere è impraticabile.

L'algoritmo di Wang-Landau invece effettua un random walk nello spazio delle energie cambiando volta per volta lo stato dello spin presente nel sito in cui passa, ma accettando il corrispondente valore dell'energia E con una probabilità pari al reciproco di $g(E)$. Durante il processo, si tiene traccia dell'energia per generarne l'istogramma $H(E)$ che è l'indicatore che tiene traccia di quante volte viene visitato un livello E (ogni qualvolta si visita un sito con energia E il corrispondente valore in $H(E)$ è incrementato di uno).

La scelta dello spazio delle energie come spazio di lavoro è giustificata dal fatto che il numero totale di livelli di energia possibili cresce linearmente con le dimensioni del sistema, mentre il numero totale delle configurazioni cresce esponenzialmente. Pare dunque scontata questa scelta a livello computazionale per ridurre nettamente i tempi di calcolo del nostro programma di simulazione.

Ad ogni passaggio del random walk attraverso un sito con una determinata E l'algoritmo prevede una modifica della stima della densità degli stati, modifica che si traduce nella moltiplicazione per un fattore $f > 1$ e utilizza la nuova densità degli stati per effettuare un altro random walk nello spazio delle energie con le medesime modalità di prima. Con questa scelta per la probabilità di accettare una modifica dello stato dello spin locale, si arriva, con un certo numero di sweep, ad avere un istogramma $H(E)$ piatto. Il fattore moltiplicativo f è rigidamente controllato e alla fine della nostra simulazione deve essere praticamente pari a 1, come nel caso ideale di un random walk con la densità $g(E)$ vera.

In generale se E_1 e E_2 sono i valori dell'energia prima e dopo lo spin flip, la probabilità di transizione sarà data da

$$p(E_2 \rightarrow E_1) = \min\left(\frac{g(E_1)}{E_2}, 1\right). \quad (2.35)$$

L'equazione (2.35) implica che se $g(E_2) \leq g(E_1)$ lo stato con energia E_2 viene accettato; alternativamente (ovvero se $g(E_2) > g(E_1)$) è accettato con probabilità $g(E_1)/g(E_2)$ [il che vuol dire che lo stato con energia E_2 è accettato se un numero random $r \in [0, 1]$ è minore o uguale a $g(E_1)/g(E_2)$].

A questo punto se lo stato con energia $E - 2$ è accettato poniamo $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$ e incrementiamo il corrispondente valore nell'istogramma $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$. In caso il random walk rigetti lo stato, l'energia rimane (E_1), la densità viene comunque moltiplicata per lo stesso fattore in modo che $g(E_1) \rightarrow f \times g(E_1)$ e l'istogramma delle energie viene aggiornato secondo $H(E_1) \rightarrow H(E_1) + 1$.

Nella pratica è molto facile che $g(E_1)$ raggiunga valori molto alti, di conseguenza si preferisce lavorare passando ai logaritmi in modo tale che $\ln[g(E_1)]$ rientri all'interno una variabile *double*. Conseguentemente, ogni update della densità degli stati è implementato

come $\ln[g(E)] \rightarrow \ln[g(E)] + \ln(f)$ e la probabilità di transizione da E_1 a E_2 viene valutata secondo $\exp\{\ln[g(E_1)] - \ln[g(E_2)]\}$.

Una buona scelta per il valore iniziale del parametro f è $f_0 = e \simeq 2,7182$, valore che permette di raggiungere velocemente tutti i possibili livelli di energia anche per sistemi di grandi dimensioni. Se scegliessimo valori di f_0 troppo piccoli l'algoritmo impiegherebbe troppo tempo per campionare tutte le possibili energie, mentre se scegliessimo un valore di f_0 troppo grande andremmo incontro a errori statistici considerevoli. L'algoritmo procede in questa maniera fino a che non si ottiene un istogramma $H(E)$ "piatto" perché in questo modo si ha che tutti i valori dell'energia possibili sono stati "visitati" un egual numero di volte e la densità degli stati converge al valore vero con un'accuratezza proporzionale a $\ln(f)$.

Una volta terminato questo processo, si provvede a ridurre f secondo $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$, si riazzerà l'istogramma delle energie a $H(E) = 0$ per ogni E e si ricomincia con il random walk utilizzando il valore di f aggiornato. Ogni volta che viene eseguito il random walk che porta ad avere un istogramma delle energie "piatto" la consideriamo un'iterazione del nostro algoritmo. Si faccia attenzione al fatto che dopo ogni iterazione si resettano i valori di $H(E)$ ma non quelli della configurazione di spin né della $g(E)$. Dopo un certo numero di iterazioni, la simulazione viene fermata quando il valore di f è dell'ordine di $\ln(f_{final}) \simeq 10^{-8}$.

Il parametro f funge come parametro di controllo per gestire l'accuratezza della densità degli stati durante la simulazione e determina inoltre il numero di sweep necessari per ogni simulazione. Si badi anche al fatto che è impossibile ottenere un istogramma perfettamente "piatto" ma che in genere lo si ritiene tale quando $H(E)$ per ogni E vale un certo $x\%$ del valore medio $\langle H(E) \rangle$, dove x è genericamente scelto in base alla dimensione e alla complessità del sistema.

Chiaramente uno dei parametri di controllo del nostro algoritmo è anche l'accuratezza della stima di $g(E)$, che risulta essere proporzionale a $\ln(f)$. A tal proposito $\ln(f_{final})$ non può avere un valore troppo piccolo altrimenti $\ln[g(E)]$ risulterebbe identico a quello del passo precedente (nei termini della precisione permessaci da una variabile di tipo *double* ovviamente) e il programma potrebbe entrare in un loop infinito. Di contro, come detto prima, il suo valore non può nemmeno essere troppo elevato altrimenti andremmo incontro ad errori statistici considerevoli.

Una cosa a cui fare attenzione è il fatto che durante il random walk (specialmente durante le prime iterazioni), l'algoritmo non rispetta la condizione di *bilancio dettagliato* perfettamente in quanto $g(E)$ è modificata ad ogni passo. Tuttavia, $g(E)$ si avvicina alla vera densità molto velocemente e dopo un certo numero di iterazioni l'algoritmo rispetta la condizione

$$\frac{W(E_1 \rightarrow E_2)}{W(E_2 \rightarrow E_1)} = \frac{g(E_1)}{g(E_2)}, \quad (2.36)$$

ovvero

$$\frac{1}{g(E_1)}p(E_1 \rightarrow E_2) = \frac{1}{g(E_2)}p(E_2 \rightarrow E_1) \quad (2.37)$$

che altro non è che la condizione di bilancio dettagliato con un'accuratezza proporzionale a $\ln f$.

Al termine della simulazione ciò che si ottiene tuttavia è una densità degli stati *relativa* ma per ottenere la vera densità degli stati è sufficiente rinormalizzare opportunamente. Ad esempio, nel modello di Potts con Q stati per particella possiamo sfruttare il fatto di sapere che il numero totale di stati è $\sum_E g_n(E) = Q^N$ dove $g_n(E)$ è la densità degli stati corretta, o che il numero di stati fondamentali (per cui $E = -2N$) è Q .

A questo punto, a seconda della scelta, sarà sufficiente porre $\ln[g_n(E)] = \ln[g(E)] - \ln[\sum_E g_n(E)] + N\ln(Q)$ oppure $\ln[g_n(E)] = \ln[g(E)] - \ln[g(E = -2N)] + \ln(Q)$.

L'ultima normalizzazione garantisce rispetto alla prima l'accuratezza della densità degli stati a bassi livelli di energia, che è importante nel calcolo delle quantità termodinamiche vicino a $T = 0$.

Per avere in mente uno schema più operativo, riassumiamo dicendo che i passi dell'algoritmo sono:

1. Si popola il nostro reticolo con una disposizione casuale di spin e si pone $g(E) = 1$ per tutte le energie,
2. Inizia il random walk nello spazio delle energie e passo per passo viene modificato lo spin del sito (in un altro dei $Q - 1$ stati possibili nel caso del modello Potts, ricordando che ogni livello ha probabilità $1/g(E)$ di essere visitato e che la probabilità di transizione da un'energia all'altra è data dalla (2.35)
3. Ogni volta che un sito è visitato si modifica la densità degli stati corrispondente moltiplicando la $g(E)$ per un fattore $f > 1$ sia che la modifica sia accettata sia che sia rifiutata,
4. Durante il campionamento viene calcolato l'istogramma $H(E)$ delle energie (ovvero, l'istogramma di quante volte un livello di energia E viene visitato) e il valore corrispondente all'energia campionata viene incrementato di 1 per ogni visita. Una volta che il nostro algoritmo ha visitato tutti i livelli di energia un numero uguale di volte si arriva ad avere un istogramma "piatto" si passa allo step successivo,
5. A questo punto f viene ridotto secondo $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$, l'istogramma viene azzerato e si reiterano i passi dal 2 al 5 utilizzando il valore aggiornato di f ,
6. Il processo termina quando f risulta minore di un valore limite da noi definito.

Essendo uno dei vantaggi dell'algoritmo di Wang-Landau quello di campionare una grandezza che non dipende dalla temperatura, possiamo tranquillamente ottenere dalla nostra simulazione grandezze come l'energia interna $U(T)$ che può essere calcolata come:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-\frac{E}{k_b T}}}{\sum_E g(E) e^{-\frac{E}{k_b T}}} = \langle E \rangle \quad (2.38)$$

e il calore specifico $C(T)$

$$C(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (2.39)$$

A differenza delle simulazioni MC tradizionali, abbiamo anche accesso a quantità come l'energia libera di Helmotz e l'entropia:

$$F(T) = -k_B T \ln(Z) = -k_B T \ln\left(\sum_E g(E) e^{-\frac{E}{k_B T}}\right) \quad S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T} \quad (2.40)$$

Gli errori statistici nelle quantità termodinamiche possono essere calcolati ripetendo le simulazioni svariate volte, ogni volta utilizzando una diversa sequenza di numeri random e quindi calcolando valori medi e fluttuazioni.

2.6 Analisi degli errori

Abbiamo visto che l'importance sampling è un metodo efficace per campionare lo spazio delle fasi. Se supponiamo che le configurazioni estratte siano statisticamente indipendenti tra loro, allora ci aspetteremo che l'errore associato alle variabili calcolate nella simulazione sia $\delta \propto 1/\sqrt{N_{MC}}$ dove N_{MC} è il numero di passi Monte Carlo. Ciò è conseguenza del *teorema del limite centrale*. Tuttavia, il metodo di importance sampling e l'algoritmo di Wang-Landau rendono le configurazioni estratte correlate tra loro e in particolare attorno al punto critico la correlazione coinvolge l'intero sistema. È quindi necessario stimare nuovamente l'errore tenendo conto della non indipendenza delle configurazioni estratte con alcuni dei metodi che descriveremo di seguito.

2.6.1 Autocorrelazione

Indichiamo con X_i la misura di qualche quantità X dalla configurazione $i = 1, 2, \dots, N$ con N numero di passi MC. Nel caso di indipendenza statistica e solo in questo caso associato alle misure l'errore è

$$\delta X = \sqrt{\frac{\sum_i (X_i - \langle X \rangle)^2}{N(N-1)}} \quad (2.41)$$

In caso di misure statisticamente dipendenti definiamo la *funzione di autocorrelazione* della quantità X :

$$C(t) = \frac{\frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} X_i X_{i+t} - \langle X \rangle^2}{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2} \quad (2.42)$$

dove t è la distanza tra due configurazioni estratte. Il denominatore serve per normalizzare ottenendo $C(0) = 1$. Una quantità importante è il tempo di autocorrelazione integrata τ_{int}

$$\tau_{int} = \frac{1}{2} - \sum_{i=1}^{\infty} C(t) \quad (2.43)$$

Questa grandezza ci permette infatti di calcolare l'errore nel caso di grandezze correlate attraverso

$$\delta X = \sqrt{2\tau_{int}} \delta X \sim \sqrt{\tau_{int}/N} \quad (2.44)$$

dove δX è calcolato come in (2.41).

2.6.2 Binning

Un metodo per rendere le configurazioni indipendenti tra loro è il processo di *binning*. Prendiamo il sistema $\{X_i\}$ precedentemente considerato e supponiamo di voler calcolare la deviazione standard associata a $\langle X \rangle$. Dato che le X_i sono correlate non possiamo ricorrere alla (2.41). Si può utilizzare allora il processo di binning: dividiamo il set delle N configurazioni in $N/2$ gruppi, ognuno contenente due termini, presi in ordine $\{X_1, X_2\}, \{X_3, X_4\}, \dots$ senza ripetizioni. A questo punto si calcola la media di ogni coppia e la deviazione standard: si ottiene così un secondo set di $N/2$ configurazioni $\{X'_1, X'_2, \dots, X'_{N/2}\}$ e un valore di δX sottostimato. Si itera questo processo fino a che il valore δX si stabilizza. Il livello di binning in cui si raggiunge il valore stabile della δX dipende da quanti passi MC sono stati eseguiti per estrarre il set $\{X_i\}$ e non è quindi predeterminato.

2.6.3 Jackknife

Il metodo Jackknife è un metodo ingegnoso per calcolare la deviazione standard di grandezze derivate. Immaginiamo di aver eseguito N simulazioni MC e di aver ottenuto un set di valori $\{X_i\}$, $i = 1, 2, \dots, N$, per l'osservabile X . L'idea fondamentale che sta alla base di questo metodo sta nel ricalcolare più volte la grandezza statistica stimata lasciando fuori dal campione una osservazione alla volta: per ogni $n = 1, \dots, N$, eliminiamo l' n -esimo valore X_n e calcoliamo la media \bar{X}_n utilizzando gli $N - 1$ valori.

L'errore associato a X è ottenuto calcolando la deviazione standard di \bar{X}_n da $\langle X \rangle$

$$\delta X = \sqrt{\frac{N-1}{N} \sum_{n=1}^N (\bar{X}_n - \langle X \rangle)^2} \quad (2.45)$$

Osserviamo che sostituendo

$$\bar{X}_n = \frac{1}{N-1} \sum_{n' \neq n} X_{n'} \quad (2.46)$$

si ottiene la formula della deviazione standard campionaria.

2.6.4 Reweighting

Il metodo del Reweighting è un metodo che permette di espandere i risultati dalla simulazione originale, eseguita ad un certo β , a un altro β' sufficientemente vicino al primo, senza eseguire nessuna simulazione aggiuntiva. La forma più semplice è basata sul fatto che la probabilità canonica di una configurazione q ad un certo β , $p_\beta(q)$, può essere facilmente collegata a un'altra distribuzione con un diverso β' come

$$p_{\beta'}(q) \propto \exp(-\beta' E_q) = C \exp[-(\beta' - \beta) E_q] p_\beta(q) \quad (2.47)$$

dove C è una costante di proporzionalità, dipendente da β e β' e che rimarrà indeterminata. Il valore di aspettazione di $O(q)$ alla temperatura β' può essere scritto come

$$\langle O \rangle_{\beta'} = \frac{1}{Z_{\beta'}} \sum_q O(q) p_{\beta'}(q) \quad (2.48)$$

$$= \frac{C}{Z_{\beta'}} \sum_q O(q) \exp[-(\beta' - \beta)E_q] p_{\beta}(q) \quad (2.49)$$

$$= \frac{Z_{\beta}}{Z_{\beta'}} C \langle O \exp[-(\beta' - \beta)E] \rangle_{\beta} \quad (2.50)$$

Per ottenere il rapporto tra le funzioni di partizione possiamo porre $O = 1$, il che implica

$$\frac{Z_{\beta}}{Z_{\beta'}} = C \langle \exp[-(\beta' - \beta)E] \rangle_{\beta} \quad (2.51)$$

Il risultato finale è quindi

$$\langle O \rangle_{\beta'} = \frac{\langle O \exp[-(\beta' - \beta)E] \rangle_{\beta}}{\langle \exp[-(\beta' - \beta)E] \rangle_{\beta}} \quad (2.52)$$

Ciò significa che il valore di aspettazione di qualunque osservabile a qualsiasi temperatura β' può essere ottenuto in funzione del valore di aspettazione valutato a β . Con un'unica simulazione teoricamente potremmo ottenere risultati a qualsiasi valore della temperatura. In realtà la situazione non è così semplice: se eseguiamo una simulazione a un certo β , possiamo eseguire il reweighting considerando un valore β' che non provochi grandi fluttuazioni statistiche dell'energia, cioè che

$$|\delta E| = |\langle E \rangle_{\beta'} - \langle E \rangle_{\beta}| \lesssim \langle (E - \langle E \rangle_{\beta})^2 \rangle_{\beta}^{1/2} = [VC_V(\beta)]^{1/2} \quad (2.53)$$

Espandendo in serie di Taylor otteniamo

$$\langle E \rangle_{\beta'} \simeq \langle E \rangle_{\beta} - (\beta' - \beta)VC_V \quad (2.54)$$

da cui si ricava che

$$|\delta\beta| = |\beta - \beta'| \lesssim [VC_V]^{1/2} \quad (2.55)$$

Si può concludere che il range di validità del reweighting nella simulazione di un sistema fisico è controllato dalle fluttuazioni statistiche dell'energia e quindi dalle dimensioni del sistema scelto (in quanto l'energia è una grandezza estensiva). Anche aumentando il numero di simulazioni non è quindi possibile aumentare il range del reweighting.

Capitolo 3

Applicazioni

Lo studio della termodinamica di un sistema fisico passa obbligatoriamente per la conoscenza della funzione di partizione, funzione che ci permette di ricavare tutte le osservabili termodinamiche di cui necessitiamo per avere un quadro completo del sistema in esame. Essendo spesso interesse di studio le transizioni di fase, fenomeni che avvengono per valori di β diversi dai valori limite quali $\beta \rightarrow 0$ o $\beta \rightarrow \infty$ il calcolo della funzione di partizione e delle grandezze a essa associate risulta proibitivo. In questo caso la simulazione numerica viene in nostro aiuto permettendoci di studiare i fenomeni di nostro interesse anche e soprattutto quando non si conosca la loro soluzione esatta.

In questo capitolo mostremo l'applicazione dei metodi di simulazione precedentemente esposti per studiare la termodinamica del modello di Ising e del modello di Potts in due dimensioni, il cui interesse fisico è già stato discusso in precedenza.

3.1 Simulazione del modello di Ising

Abbiamo visto che nel modello di Ising bidimensionale il sistema considerato è un reticolo quadrato $L \times L$ periodico in cui ad ogni sito è associata una variabile di spin σ_i che può assumere valore $+1$ o -1 a seconda che lo spin sia rivolto verso l'alto o verso il basso rispetto (ad esempio) all'asse z . Un dato set di $\{\sigma_i\}$ specifica una configurazione del sistema, la cui energia (nel caso da noi analizzato, cioè quello in cui il campo esterno $h = 0$) è definita da:

$$E_{\{\sigma_i\}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (3.1)$$

in cui $\langle i, j \rangle$ indica la somma siti sui primi vicini e J rappresenta un parametro di interazione che favorisce l'allineamento degli spin se posto maggiore di zero. Per la simulazione abbiamo implementato gli algoritmi Metropolis in Fortran90 e Wang-Landau in C, mentre i dati sono stati analizzati implementando i metodi di analisi precedentemente descritti in Python. L'algoritmo di Metropolis si rivela efficace per il calcolo di quelle grandezze termodinamiche che dipendono localmente dalle variabili di spin, come ad esempio

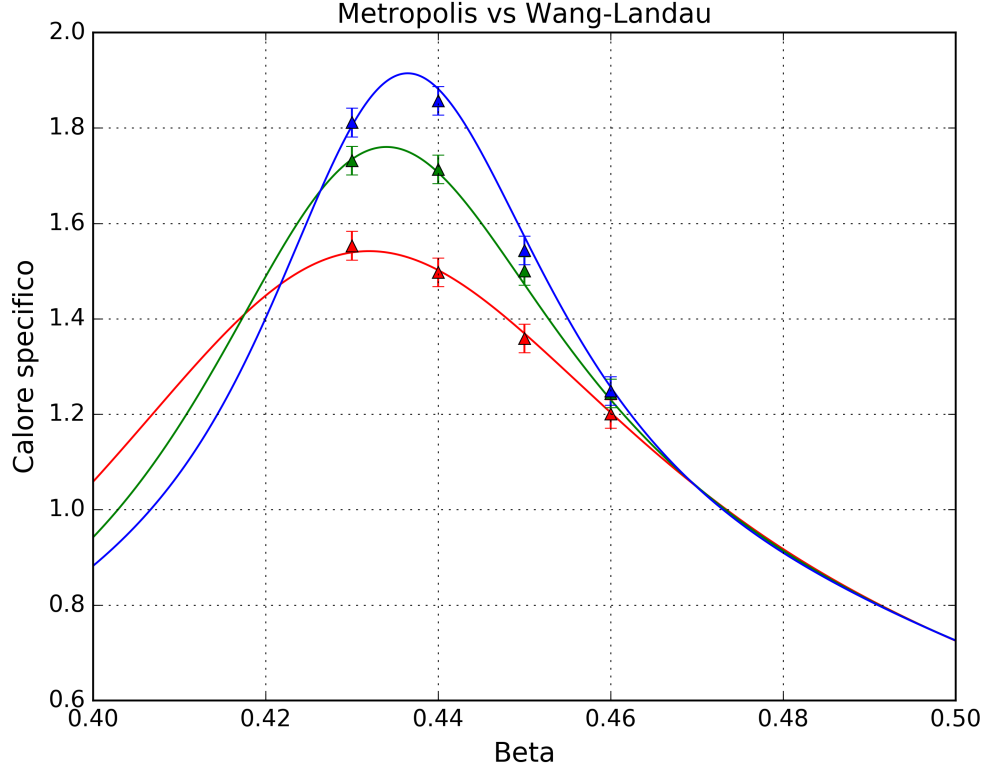


Figura 3.1: Confronto tra l'espressione del calore specifico in funzione di β calcolato con l'algoritmo di Wang Landau e i valori calcolati con l'algoritmo di Metropolis a $\beta = [0.43, 0.44, 0.45, 0.46]$ per diversi valori di L : rosso $L = 16$, verde $L = 24$, blu $L = 32$.

l'energia (3.1) e la magnetizzazione

$$M = \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle \quad (3.2)$$

mentre risulta del tutto inefficace nel calcolo di grandezze non locali quali l'entropia e la densità degli stati. Secondo questo algoritmo è possibile il calcolo della funzione di partizione ma risulta inapplicabile a livello computazionale. L'algoritmo di Wang-Landau è pensato per risolvere questo problema. Tramite esso riusciamo ad ottenere un'espressione per la nostra densità degli stati $g(E)$ che non dipenda dalla temperatura, a campionarla e calcolare la funzione di partizione del nostro sistema tramite essa sfruttando la relazione

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\frac{E}{k_B T}} \quad (3.3)$$

A partire dalla funzione di partizione è stato possibile il calcolo di un'espressione per il calore specifico in funzione di β : sapendo che il valore medio dell'energia $\langle E \rangle$ e del

quadrato dell'energia $\langle E^2 \rangle$ hanno espressioni

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \quad \text{e} \quad \langle E^2 \rangle = \frac{\sum_E E^2 g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \quad (3.4)$$

si calcola facilmente come

$$C(\beta) = \frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} = \beta^2 (\langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle) \quad (3.5)$$

In figura (3.1) è possibile vedere l'accordo tra i dati ricavati con l'algoritmo di Metropolis a β fissato e l'espressione del calore specifico ottenuta utilizzando i dati fornitici dall'algoritmo di Wang-Landau. Gli errori sui valori ottenuti dall'algoritmo di Metropolis sono stati calcolati utilizzando il procedimento di binning. Tale scelta è motivata dal fatto che attorno alla temperatura critica la lunghezza di correlazione $\xi \sim |T - T_C|^{-1}$ diverge e visto che il tempo di autocorrelazione si ricava dalla relazione $\tau \sim \xi^z$ in cui z è un parametro che dipende dal tipo di algoritmo scelto, anche quest'ultimo diverge. Si capisce dunque che l'errore ricavato a partire dalla deviazione standard risulta sottostimato in quanto la correlazione coinvolge tutti i punti del reticolo. A tal proposito si vede dalla figura (3.2) che l'errore stimato con il procedimento di binning è circa 3 volte più grande di quello stimato normalmente, quindi la correlazione non può essere assolutamente trascurata.

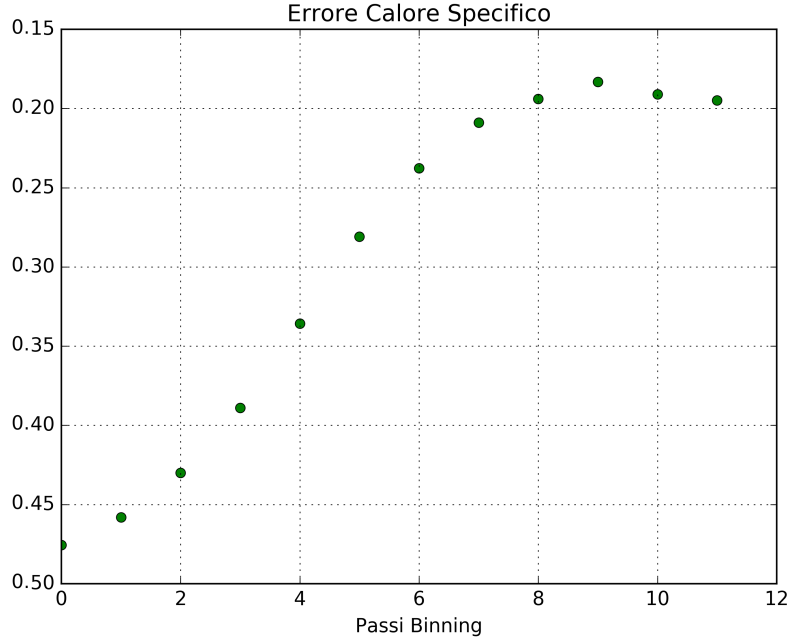


Figura 3.2: Andamento dell'errore sul calore specifico in funzione del numero di passi dell'algoritmo di binning.

3.2 Simulazione del modello di Potts

Esattamente come nel modello di Ising, nel modello di Potts il sistema considerato è sempre un reticolo quadrato $L \times L$ periodico in cui ad ogni sito associamo una variabile di spin, solo che in questo caso la nostra variabile σ_i può assumere più valori a cui immaginiamo di far corrispondere un certo numero di direzioni rispetto all'asse z definite tramite l'angolo Θ_n come

$$\Theta_n = \frac{2\pi n}{Q} \quad n = 0, 1, \dots, Q-1. \quad (3.6)$$

Considerando anche in questo caso la presenza di un'unica interazione, ovvero quella tra siti primi vicini, l'Hamiltoniana per il sistema da noi considerato può essere scritta come

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(q_i, q_j) \quad (3.7)$$

in cui $q_i = 1, 2, \dots, Q$ denota il valore dello spin e $\delta(q_i, q_j)$ è la delta di Kronecher. Il caso da noi studiato è stato quello per cui $Q = 10$. Come abbiamo già avuto modo

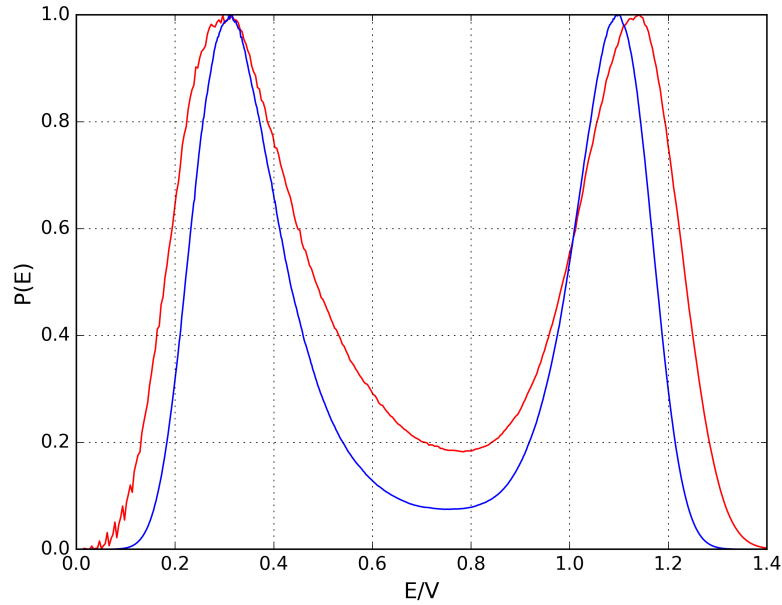


Figura 3.3: Andamento della $P(E)$ riscalata ad 1 per $\beta = \beta_c$ in cui nota la coesistenza della fase ordinata e di quella disordinata. In figura il plot rosso è quello corrispondente a $L = 16$ mentre quello blu a $L = 24$.

di dire precedentemente, per il modello di Potts è stato dimostrato che nel caso in cui $Q \leq 4$ abbiamo che a β critico le transizioni di fase sono continue mentre per $Q \geq$

5 le transizioni di fase diventano del prim'ordine e sono quindi caratterizzate da una discontinuità nell'energia interna, fatto che implica la presenza di un calore latente. È stato quindi oggetto di nostro interesse lo studio della probabilità $P(E, T)$ di avere stati ad energia E ad una determinata temperatura T , in modo da poter constatare come nella transizione di fase del prim'ordine da noi studiata vi sia la coesistenza di due fasi. Alla luce dei risultati ottenuti (si veda ad esempio la figura 3.3) si può facilmente capire il motivo della scelta di un algoritmo di entropic sampling quale quello di Wang-Landau rispetto ad un algoritmo di Metropolis: dipendendo quest'ultimo dal peso di Boltzmann $e^{-\beta E}$ è facile capire che la probabilità di riuscire a visitare tutti i siti sia in una fase che nell'altra e quindi ottenere un buon set di dati è molto bassa in quanto l'altezza della curva tra una fase e l'altra è tale da rendere il "tunneling" tra di esse un evento molto improbabile.

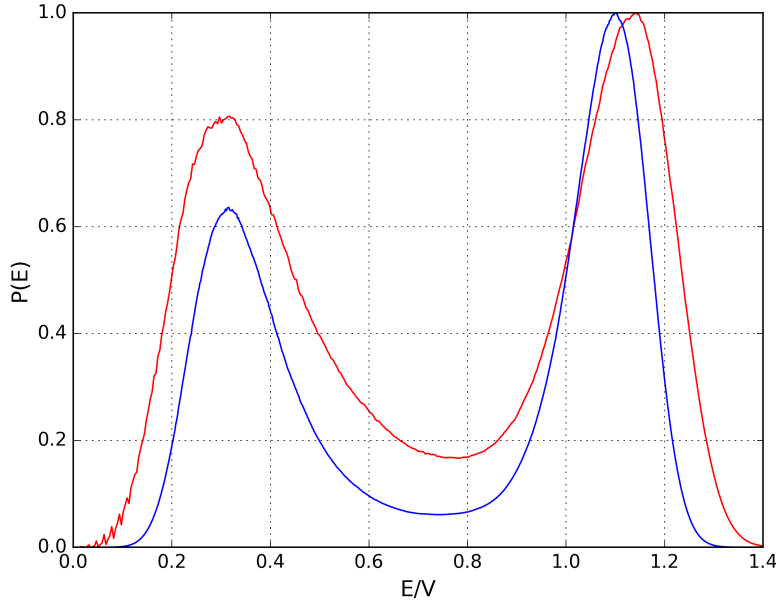


Figura 3.4: Andamento della $P(E)$ riscalata ad 1 per $\beta < \beta_c$. Si nota una maggiore probabilità di presenza nella fase disordinata rispetto al caso in cui $\beta = \beta_c$. In figura il plot rosso è quello corrispondente a $L = 16$ mentre quello blu a $L = 24$.

Tutti i dati da noi ottenuti e i relativi plot non sono esenti dagli effetti di volume finito già citati precedentemente, come ad esempio la presenza di stati in una regione intermedia a quella tra le due fasi, effetto che si nota svanire all'aumentare del volume L^2 del sistema. Inoltre i valori di β per i quali la densità di probabilità $P(E)$ presenta due picchi di egual altezza nelle due fasi corrispondevano al valore teorico per il modello di Potts dato da $\beta_C = \ln[1 + \sqrt{Q}]$ ma ne differivano leggermente (ovviamente il valore di β_C nel caso di $L = 24$ è più vicino a quello teorico rispetto al caso $L = 16$). Nel limite di volume infinito quello che accade a β critico è che avviene una transizione di fase vera e propria e non

più una pseudo-transizione di volume finito e i due picchi della nostra $P(E)$ andranno sempre più stringendosi fino a diventare due delta di Dirac per i valori dell'energia nelle due fasi.

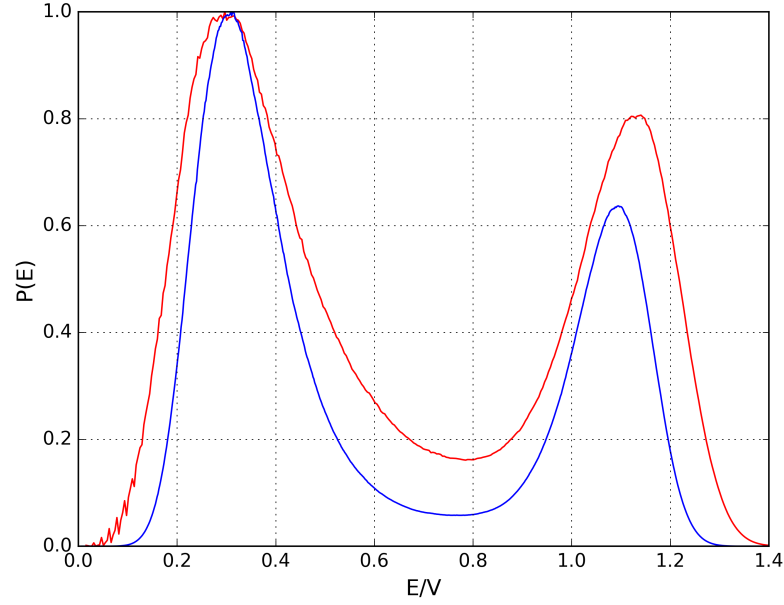


Figura 3.5: Andamento della $P(E)$ riscalata ad 1 per $\beta > \beta_c$. Si nota una maggiore probabilità di presenza nella fase ordinata rispetto al caso in cui $\beta = \beta_c$. In figura il plot rosso è quello corrispondente a $L = 16$ mentre quello blu a $L = 24$.

Bibliografia

- [1] R.K. Pathria, P.D. Beale, *Statistical Mechanics*. Academic Press, 3rd edition, 2011
- [2] A. Rotondi, P. Pedroni, A. Pievatolo, *Probabilità, Statistica e Simulazione*, Springer, 2a edizione, 2005
- [3] Giorgio Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison Wesley, 1988
- [4] J. Lee, *New Monte Carlo Algorithm: Entropic Sampling*, Phys. Rev. Lett., 71(2): 211-214, Jul 1993
- [5] D.P. Landau, S. Tsai, M.Exler, *A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling*, Am. J. Phys. 72(10): 1294-1301, Oct 2004
- [6] F.Y. Wu, *The Potts model*, Rev of Mod. Phys., 54(1): 235-237, Jan 1982
- [7] S. Brush, *The History of the Lenz-Ising Model*, Rev of Mod. Phys., 39(4): 883-893, Oct 1967

Appendice: codice sorgente

Riportiamo il codice sorgente utilizzato per analizzare i dati provenienti dalle nostre simulazioni e realizzarne i grafici. Il linguaggio utilizzato è Python 2.7.10.

Plot.py

```
1  #!/usr/bin/python
2  # -*- coding: utf-8 -*-
3
4  import math
5  import numpy as np
6  from os import system
7  import matplotlib.pyplot as plt
8  from argparse import ArgumentParser
9
10 #-----
11 # Funzioni Metropolis
12 #-----
13
14 def errore(tab):
15     return np.sqrt(float(np.var(tab))/float(len(tab)-1))
16
17 def grandderivata(tab):
18     cs = []
19     m = np.mean(tab)
20     for i in tab:
21         cs.append(i**2 - m**2)
22     return np.array(cs)
23
24 #-----
25 # Funzioni Wang - Landau
26 #-----
27
28 def esponent(ene,ent,b):
29     """ Dandogli array delle energie delle entropie e il valore di beta
30     restituisce l'array di  $[S(E) - \beta E]$  """
31     J = []
32     for i in range(len(ent)):
33         J.append(ent[i] - b * ene[i])
34     return np.array(J)
35
36 def pesata(ene, esp):
37     """ Dandogli l'array delle energie e quella degli esponenti pesa
38     ogni valore di E con  $e^{[S(E) - \beta E]}$  """
39     temp = []
40     m = np.amax(esp)
41     for i,item in enumerate(ene):
42         temp.append(item * np.exp(esp[i] - m))
43     return np.array(temp)
44
45 def partizione(esp):
46     """ Funzione di partizione ridotta, prende la matrice degli esponenti
47     toglie il massimo, esponenzia e somma """
48     return np.sum(np.exp(esp-np.amax(esp)))
49
50 def meanE(ene,esp):
51     return np.sum(pesata(ene, esp))/partizione(esp)
52
53 def meanE2(ene,esp):
54     return np.sum(pesata([i**2 for i in ene], esp))/partizione(esp)
```

```

55
56 def varianza(ene, esp):
57     return meanE2(ene,esp) - meanE(ene,esp)**2
58
59 def cspecifico(ene, ent, b, L):
60     return b**2 * varianza(ene, esponent(ene, ent, b))/L**2
61
62 #-----
63 # Funzioni Binning
64 #-----
65
66 def dimezzamento(tab):
67     """ Prende una array di N elementi e ne restituisce
68         una di N/2 elementi mediati a coppie """
69     updated = []
70     for i in range(len(tab)/2):
71         updated.append((tab[2*i]+tab[2*i+1])/2)
72     return np.array(updated)
73
74 def binningder(tab, N, b, L):
75     err = []
76     m2 = np.mean(tab)**2
77     dimezzata = tab
78     for j in range(N):
79         temp = []
80         for i in dimezzata:
81             temp.append(b**2 * L**2 * (i**2-m2))
82         cv = np.array(temp)
83         err.append(np.var(cv)/len(cv)-1)
84         dimezzata = dimezzamento(dimezzata)
85     return np.array(err)
86
87 #-----
88 # Main
89 #-----
90
91 system('clear')
92 print "TonioGela's Awesome Software version 0.1"
93 print "-----"
94
95 plt.figure()
96 plt.title('Metropolis vs Wang-Landau', fontsize=14)
97 plt.xlabel('Beta', fontsize=14)
98 plt.ylabel('Calore specifico', fontsize=14)
99 plt.grid(True)
100
101 #-----
102 # Parte Wang-Landau
103 #-----
104
105 colore = ['r','g','b']
106
107 i = 0
108
109 for L in [16,24,32]:
110
111     energiew = []
112     entropiew = []
113
114     with open('{}-ising-01.dat'.format(L),'r') as f:
115         for line in f:
116             energiew.append(float(line.split()[0]))
117             entropiew.append(float(line.split()[1]))
118
119     energiaw = np.array(energiew)
120     entropiaw = np.array(entropiew)
121
122     x = np.linspace(0.40,0.50,1000)
123     f = []
124     for k in x:
125         f.append(cspecifico(energiaw, entropiaw, 2*k, L))
126     y = np.array(f)
127
128     plt.plot(x, y, '{}'.format(colore[i]))
129     i = i +1
130
131 #-----
132 # Parte Metropolis
133 #-----
134
135 i = 0
136
137

```

```
138 for L in [16,24,32]:
139
140     x = []
141     y = []
142     err=[]
143
144     for beta in [43,44,45,46]:
145
146         energiem = []
147         magnetizzazioneim = []
148
149         with open('{}-b0.{}.dat'.format(L,beta),'r') as f:
150             for line in f:
151                 energiem.append(float(line.split()[0]))
152                 magnetizzazioneim.append(float(line.split()[1]))
153
154         energiam = np.array(energiem)
155
156         beta = float('0.{}'.format(beta))
157
158         cv = beta**2 * L**2 * np.var(energiem)
159         errcv = binningder(energiem, 1, beta, L)
160
161         x.append(beta)
162         y.append(cv)
163         err.append(errcv)
164
165         plt.errorbar(x, y, err, fmt='{}^'.format(colore[i]), barsabove=True)
166         i = i + 1
167
168 plt.savefig("MvsWL.png", dpi = 400)
169 plt.show()
```


Ringraziamenti

"No Excuses, play like a champion"

Rule #76

Giunti alla fine di questo percorso, di questa tesi, di questo corso di laurea, di quest'infinita epopea direi che rimangono da fare solo i ringraziamenti, che ne dite?

Le prime persone che sento di voler ringraziare sono i miei genitori. Senza di loro, il loro costante supporto, la loro presenza e l'infinita fiducia che hanno riposto in me nulla di tutto questo sarebbe mai stato possibile. A loro devo la possibilità che mi è stata data di studiare, di realizzarmi e di vivere tutte quelle esperienze che mi hanno reso chi sono oggi. Per render loro giustizia sarebbe necessaria un'intera biblioteca di ringraziamenti, ma penso capiranno ugualmente se rivolgo loro solo un semplice "Grazie. Di tutto."

Un doveroso e sentito ringraziamento va al professor Marco Guagnelli, per esser stato molto più di un professore, ma un amico, un insegnante, un mentore nonché una persona che è stata in grado di appassionare me così come mille altri studenti alla sua materia. A lui va un enorme ringraziamento per avermi insegnato molto di quello che so, per avermi aiutato in questo lavoro e per aver accettato di farlo. Felice della fortuna che ho avuto di averlo come relatore, a lui un "Grazie Marco".

*"Whatever you do in this life, it's not
legendary, unless your friends are
there to see it."*

Barney Stinson

Come da promessa, la prima persona da ringraziare tra gli amici è Cospi. Molti di voi non sapranno che il sottoscritto è stato in grado di cancellare metà del file *.tex* che ha generato il documento che avete in mano due sere prima della scadenza per la sua consegna. Cospi (all'anagrafe *Gabriele Adriano Nosari* ma non risponde se interpellato così) e i suoi snippet su Gedit mi hanno sostanzialmente salvato la vita dandomi una mano e dividendo il lavoro di riscrittura della metà mancante a partire dal *pdf* che è stato provvidenzialmente inviato al mio relatore circa 5 minuti prima dell'apocalisse.

Un ringraziamento del genere, ad ogni modo non rende giustizia a una delle persone che è sempre stata in grado, ma soprattutto ha sempre voluto, sorreggermi nei miei momenti peggiori, una persona che è sempre stata disposta ad ascoltare, consigliare, consolare e che non ha mai nascosto il piacere del confronto d'opinioni, del dialogo e dello scambio

di idee. Facendo finta che un buon 30% dei miei voti a libretto non siano merito delle sue risposte alle mie domande (spesso idiote o malposte) in preda al panico poche notti prima dell'esame o che lui sia uno dei compagni di bevute con cui più che volentieri ho avuto fortuna e il piacere di condividere il desco, dirò solamente che mi ritengo fortunato ad averlo conosciuto e che credo che mai avrò occasione di incontrare una persona che più facilmente di lui sia in grado di suscitare una risata (il più delle volte per una battuta idiota tipo la genesi di qualche parola tipo *Sputsoleenaw* o *Szgabel-Law*) o di far star bene il prossimo. Cospì, è stato un piacere.

E adesso che ho ringraziato Cospì come si fa a non ringraziare Simo? Simo è stato un amico, un fratello, una spalla e un compagno di corso. Abbiamo condiviso sport, passioni, serate, feste, mille idiozie, mille sbatti e presimalismi e nonostante i nostri caratteracci da prima donna non riusciamo a starci lontani. Da quando è partito per Regensburg il corridoio dei teorici non è mai più stato lo stesso e tanti di noi (Io e Cospì in primis) abbiamo dovuto a malincuore salutare un amico. Senza di lui i miei anni a Pavia e in quel dipartimento non sarebbero stati gli stessi, non avrei scoperto la regola #76, avrei fatto molte meno conoscenze (versioneedulcolata per la stampa) e in generale mi sarei divertito molto meno. Grazie a lui, so di aver sempre una spalla su cui contare nonché un ottimo avversario per uno sparring improvvisato e so che per lui vale lo stesso. Grazie Simon, ti voglio bene.

A questo punto mi pare impossibile non ringraziare la Manu. Da quando quella sera dopo cena nella casa di Viale Indipendenza di n anni fa abbiamo cominciato a conoscerci è sempre stato un crescendo di amicizia, confidenze e affetto. Manu è una delle persone più belle che io conosca ed sicuramente la più buona. Qualche riga nei ringraziamenti della mia tesi non sarà mai sufficiente a ringraziarla per esserci sempre stata, soprattutto nei momenti in cui ne avevo più bisogno perché avevo l'animo a pezzi e non sapevo chi ero, per aver avuto la bontà e l'infinita pazienza di lanciarmi sempre una fune di salvataggio quando toccavo il fondo di me stesso. Se oggi posso dire di essere una persona più forte che in passato il merito è del contagio di Manu e della forza gigante che riesce a trasmettere con un sorriso e un abbraccio. È e sempre sarà un'amica nonostante la distanza, gli sbatti o i lunghi periodi senza sentirci ed è una di quelle di persone che non vorrò mai perdere. Manu, a te il mio miglior "Grazie" (detto con un sorriso e una lacrima di gioia per averti conosciuto).

A questo punto comincia l'infinita lista di persone che meritano un ringraziamento per aver reso Pavia la mia casa, la culla della mia identità e il mio posto felice. Visto la mia erranza abitativa, il numero dei coinquilini nei secoli è diventato consistente, quindi direi che un'ottima idea è partire da loro.

Il primo ringraziamento a dei coinquilini va a voi tre senza dubbio. Non vi nomino solo per quella storia dell'ordine in cui siamo stati citati nelle tesi altrui, così posso creare un precedente storico e questa storia del "Olgiati mi ha citato prima di voi due nei ringraziamenti della tesi" che manco la storia del numero di Erdos finisce. Senza voi tre nulla di tutto ciò sarebbe stato possibile: io non sarei qui, non avrei passato Analisi A e mi sarei buttato sotto il Genova-Milano Centrale. Voi tre siete stati le persone che mi hanno subito fatto sentire a casa, si poteva parlare di tutto senza vergogna o remore, si citavano gli stessi, film, fumetti, libri, giochi da tavolo. Siete stati il mio posto felice per tanto tempo e a voi in primis devo il fatto di esser stato in grado di manifestare veramen-

te le mie abilità nell'ambito che abbiamo scelto come percorso di vita. Siete stati i due fratelli e una sorella migliori che potessi desiderare e l'avervi conosciuto è uno dei motivi che mi fa credere d'aver esaurito la fortuna per questa vita. A voi devo così tanto che solo a pensarci resto senza parole. Adesso siamo lontani ma non ho mai dimenticato ne dimenticherò mai un secondo del tempo passato assieme. Con la speranza nel cuore di poter passare di nuovo del tempo tutti e quattro assieme e un po' di malinconia perché quei giorni sono giunti al loro termine, il mio miglior "Grazie Ale, Martino e Michela, è stato bellissimo"

P.S. Se vi state chiedendo dov'è il "libro della casa" sappiate che è in mano mia.

Adesso che ho citato i coinquilini con la C maiuscola posso ringraziare tutti gli altri uno alla volta. Grazie Chiara, senza di te la scelta di Pavia non sarebbe stata tanto scontata. Grazie Barbara per tutto il tempo passato insieme. Grazie Alice per esser stata incredibilmente te stessa. Grazie Speri per avermi portato in C.S.A. Parodi. Grazie Cabizzino per avermi insegnato ad insultare il prossimo con un <3 e per tutte le serate di consulenza informatica in chat. Grazie Misu per essere sempre come un fratello. Grazie Miguel per essere stato, un compagno, un amico e una spalla. Grazie Illustre per i nostri discorsi assurdi. Grazie Marchino per la forza che metti in quello in cui credi. Grazie Giada per tutte le serate passate insieme a guardarci mille episodi della stessa serie TV sempre distrutti e per avermi insegnato tanto.

Senza tutti voi le mie case sarebbero sempre state quattro mura vuote, siete voi le persone che porterò sempre nel cuore e che hanno reso questa città quello che è per me: casa.

Concediamoci un piccolo off topic dal mondo pavese e ringraziamo chi in questi lunghi anni ha per me rappresentato quasi più che miei genitori il concetto di "casa". Senza quei tre pirla la mia vita sicuramente non sarebbe stata la stessa, la loro nemmeno (sarebbero molto più tranquilli ma sicuramente anche annoiati) e avrei avuto un'infanzia molto più noiosa. Un infinito ringraziamento va a loro 3 per essere sempre stati al mio fianco, per essere i fratelli migliori che si possano desiderare (precedentemente ho utilizzato l'espressione *come fratelli* per descrivere un rapporto stretto, ma con loro mi sento in dovere di non ricorrere ad una similitudine), per essere sempre stati in grado di capirmi, di sopportarmi e di non sopportarmi, per non aver mai mancato l'occasione di parlarmi fuori dai denti, ma soprattutto grazie per essere le uniche tre persone al mondo che non fanno tutto questo pensandoci, ma lo fanno e basta perché per noi quattro è impossibile vivere diversamente. Grazie Maro, Spino e Tinny.

Menzione d'onore va alla cara dottoressa Alessandra Merlini, la pavese più fusa che si possa incontrare, sempre pronta a divertirsi e a coinvolgere gli altri in tutto ciò che fa. Oltre ad essere una persona che mette subito di buon umore, è sempre stata pronta a sentire la miriade di boiate/paree/idee che una mente come la nostra è in grado di generare, a farle sue e poi a spiegarle con termini elementari. Non ricordo una singola occasione in cui il confrontarci, il condividere idee non abbia portato discorsi stimolanti e interessanti, motivo per cui la ritengo la persona più *simply clever* che conosca. Grazie Ale, ti voglio un mondo di bene.

Visto che siamo arrivati alla terza pagina di ringraziamenti e ne prevedo una quarta direi che è il caso di tagliare corto e di ringraziare tutti in blocco.

Grazie a chi ha fatto parte del direttivo di Radio Aut con me in entrambi in mandati, in particolare Francesca Orsini per essere stata LA presidente, a Ciccio Caliandro per

avermi insegnato che la democrazia è sbagliata soprattutto in presenza d'idioti, grazie a Mapo, a Cri Giorgi, a Ema Marchioni, a Burzum, grazie a Vara e Giulio Marchesi per esser stati i "piccolini" insieme al nostro primo mandato, grazie a Banana per esser sempre stato incredibilmente Banana e grazie a Bernardo Caldarola per avermi sopportato nonostante gli attacchi frontali perpetui alla sua associazione (si faceva per ridere Berna). Grazie a tutti voi per aver lavorato insieme, è stata una delle esperienze più belle della mia vita

Grazie a Marcello per tutto quello che abbiamo avuto voglia di costruire insieme e tramite lui un grazie anche a tutti i membri del nuovo direttivo (spaccheremo i culi, poco ma sicuro).

Grazie a Guido Tana, per aver sopportato oltre l'immaginabile i nodi della mia psiche e per non esserne mai stato spaventato, anzi. Non dimenticherò mai quella famosa camminata post-turno diretti verso via Rismondo a parlare di universi algebricamente comprimibili.

Grazie a Stefano Brandolini per essere la persona con la quale condivido in assoluto più passioni, per le pazzesche serate a casa sua a Gallarate quando scappavo da Pavia e per essere sempre stato un vero amico.

Grazie a tutti gli amici del Sottovento, a quelli di tutti i giorni che incontri per strada, grazie a tutti i compagni di corso avuti nei secoli passati tra queste mura.

Per quanto riguarda il dipartimento un ringraziamento specifico va a chi ha rappresentato per molto tempo la mia quotidianità, ovvero Claudio, Silva, Nico, Samuel, Ale Menegolli, Angelica, la Fra e tanti altri.

Un ringraziamento particolare a Elena, Salvo, Teo, Jack e Paul per le infinite partite a scopa o briscolone e per la compagnia nell'ultimo periodo di quest'avventura.

Un super iper mega ringraziamento a Michele Pirola, per esser stato l'unica persona in grado di condividere con me la gioia della *nerdiness informatica* pura, per essere stato l'unico in grado di capire il mio entusiasmo quando programmavo su Mobile Substrate nel infinito mondo del Jailbreak. Grazie per aver condiviso tante piccole gioie quotidiane come la scoperta di qualche assurdità di domotica/robotica/telefonia/programmazione/-meccanica/idraulica e chi più ne ha più ne metta. Grazie per avermi insegnato molto e per tutto quello che abbiamo avuto modo di condividere.

E infine a Sara, per Londra.

Bene, arrivati a questo punto posso concludere dicendo che se non siete stati citati direttamente nei ringraziamenti di questo tesi è perché mi sono scordato di voi, mi fate schifo e per me non siete persone affatto importanti. Morirete con questo cruccio e l'ira degli antichi si riverserà su me per essermi scordato di voi.

Oppure farò un'appendice ai ringraziamenti, sticazzi.

Grazie a tutti!

TonioGela