Il modello di Ising bidimensionale

Soluzione esatta e simulazione Monte Carlo

Relatore: Prof. Marco Billò
Candidato: Alessandro Tofani

Università di Torino
Dipartimento di Fisica

Tesi di Laurea, 18 Luglio 2019

Introduzione sul Modello

Due approcci al modello

1. Soluzione combinatoria, calcolando la funzione di partizione del sistema;
2. Simulazione Monte Carlo, implementando l'algoritmo Metropolis.

Punti chiave

1. Spin: $S_i = \pm 1$;
2. Elementi interagenti: $H = -J \sum_{<ij>} S_i S_j - h \sum_i S_i$;
3. Transizione di fase;

Transizione di fase

Transizione tra due fasi

1. Stato ordinato: i dipoli magnetici sono orientati nella stessa direzione;
2. Stato disordinato: si formano domini magnetici tali per cui la magnetizzazione totale risulta nulla.

La temperatura a cui avviene la transizione di fase è T_c, temperatura critica del sistema.

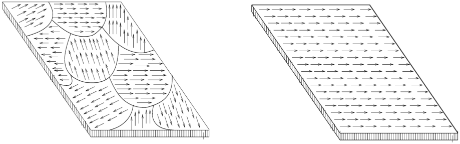


Figura: Immagine a sinistra: domini magnetici a temperature superiori alla temperatura critica. Immagine a destra: allineamento degli spin per temperature inferiori alla temperatura critica.

Funzione di correlazione a 2 punti degli spin

$$G_c^{(2)}(r) = <(\mathbf{S}_i - \mathbf{M})(\mathbf{S}_j - \mathbf{M})> = <\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j> - |\mathbf{M}|^2 \quad .$$

- Andamento asintotico del correlatore è $G_c^{(2)}(r) \simeq e^{-\frac{r}{\epsilon}}$ per temperature diverse dalla temperatura critica;
- Alla temperatura critica si ha un andamento a potenza: $G_c^{(2)}(r) \simeq \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$.

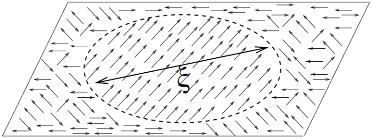


Figura: La dimensione dei domini magnetici è data dalla lunghezza di correlazione

Esponenti critici

Andamenti a potenza delle osservabili

- $M = M_0(-t)^{\beta}$ con $h \to 0$;
- $M(h, T_c) = M_0 h^{\frac{1}{\delta}}$;
- $\chi(0, T) = \begin{cases} \chi_+ t^{-\gamma}, se T > T_c; \\ \chi_-(-t)^{-\gamma}, se T < T_c; \end{cases}$
- $C(T) = \frac{\partial U}{\partial T} = \begin{cases} C_+ t^{-\alpha}, se T > T_c; \\ C_-(-t)^{-\alpha}, se T < T_c \end{cases}$.

Metodo Monte Carlo

- Valor medio dell'energia nell'ensemble canonico:

$$< E >= \sum_i E_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$$

- $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$ funzione di partizione, i etichetta i microstati del sistema.
- Si somma sui livelli energetici, con degenerazione $\Omega(E)$:

$$< E >= \sum_E E\Omega(E) \frac{e^{-\beta E}}{Z} = \sum_E E \frac{e^{-\beta E + \log \Omega(E)}}{Z} \quad .$$

Metodo Monte Carlo

$$< E >= \sum_E E \frac{e^{-\beta E + \log \Omega(E)}}{Z} \quad .$$

Competizione tra:

1. Minimizzazione dell'energia: il fattore $-\beta E$ tende a far andare il sistema verso stati ad energia minima;
2. Massimizzazione dell'entropia: il fattore $\log \Omega(E)$ tende a far andare il sistema verso stati più popolati, ovvero la cui degenerazione è più alta.

Metodo Monte Carlo

Algoritmo Metropolis

1. Si sceglie la configurazione iniziale i e si passa alla configurazione j con probabilità p_{ij}^{0};
2. Si calcolano le energie E_i ed E_j;
3. Se $E_i \geq E_j$ cioè l'energia del sistema diminuisce, allora $e^{-\beta(E_j - E_i)} > 1$ e $a_{ij} = 1$, cioè la transizione viene sempre accettata;
4. Se $E_i < E_j$ cioè l'energia del sistema aumenta, la transizione non viene scartata, ma viene accettata con probabilità $e^{-\beta(E_j - E_i)} = a_{ij}$.
5. Si ripete dallo step 2;

La probabilità di accettare la transizione, nello step 4, è confrontata con una probabilità fornita da un generatore di numeri casuali, e se $a_{ij} > \mathit{random}$ si accetta la transizione.

Modello bidimensionale: soluzione combinatoria

- $v = \tanh \beta J$;
- $Z_N = 2^N \left(1 - v^2\right)^{-N} \Phi(v)$;
- $\Phi(v) = \sum_r g_r v^r$, e g_r numero di grafi chiusi, fatti da r link.

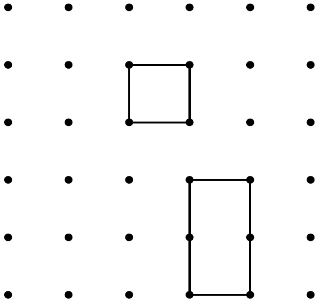


Figura: Esempio di termine di ordine v^{10}

Modello bidimensionale: soluzione combinatoria

Step della soluzione

1. Si riduce la somma sui poligoni a una somma su cammini chiusi senza intersezioni;
2. Si trasforma la somma su cammini chiusi senza intersezione in una somma su tutti i possibili cammini chiusi;
3. Si riduce la somma ad un problema di cammini aleatori su un reticolo.

Soluzione combinatoria: step 1 e 2

- La somma su tutti i poligoni può essere organizzata in una somma sulle parti connesse dei grafi. Ogni grafo è pesato con un fattore $(-1)^n$ con n è il numero totale di autointersezioni di un ciclo.
- f_r è la somma su tutte le maglie solitarie composte da r link.
- La somma su tutte le coppie di maglie con un numero totale r di link, sarà data da: $\frac{1}{2!}\sum_{r_1+r_2=r} f_{r_1} f_{r_2}$.
- Φ comprende gli insiemi di maglie con una lunghezza qualsiasi:

$$\sum_{r_1, r_2, \cdots=1}^{\infty} v^{r_1+r_2+\cdots+r_s} f_{r_1} \ldots f_{r_s} = \left(\sum_{r=1}^{\infty} v^r f_r\right)^s;$$
$$\Phi(v) = e^{\left[-\sum_{r=1}^{\infty} v^r f_r\right]} \quad .$$

Soluzione combinatoria: step 3

- Direzioni di spostamento $\mu = 1, 2, 3, 4$;

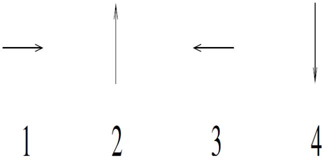


Figura: Direzioni di spostamento su reticolo quadrato

- $W_r(i, j, \mu)$ è la somma su tutte le transizioni di lunghezza r che partono lungo μ_0 da un nodo (i_0, j_0) e arrivano a (i, j) lungo μ.
- $W_r\left(i_0, j_0, \mu_0\right)$ è la somma su tutte la maglie che partono da (i_0, j_0) lungo μ_0 e che vi ritornano.

$$f_r = \frac{1}{2r} \sum_{i_0, j_0, \mu} W_r\left(i_0, j_0, \mu\right);$$

Soluzione combinatoria: step 3

Equazione ricorsiva per W_r

$$W_{r+1}(i,j,\mu) = \sum_{i',j',\mu'} \Lambda\left(ij\mu|i'j'\mu'\right) W_r\left(i',j',\mu'\right);$$

- É l'equazione di un processo di Markov di un moto aleatorio su di un reticolo, con probabilità di transizione tra i siti primi vicini pari al corrispondente elemento di matrice di Λ.
- La probabilità di transizione di un cammino di lunghezza totale r è Λ^r.
- Le componenti diagonali di tale matrice sono le probabilità di tornare al punto iniziale dopo aver fatto un cammino chiuso di lunghezza r, cioè sono $W_r\left(i_0, j_0, \mu_0\right)$.

Soluzione combinatoria: step 3

- Diagonalizzazione rispetto alle coordinate k e l del reticolo usando la trasformata di Fourier: $W_r(p,q,\mu) = \sum_{k,l=0}^{L} e^{-\frac{2\pi i}{L}(pk+ql)} W_r(k,l,\mu)$.

$\Lambda =$

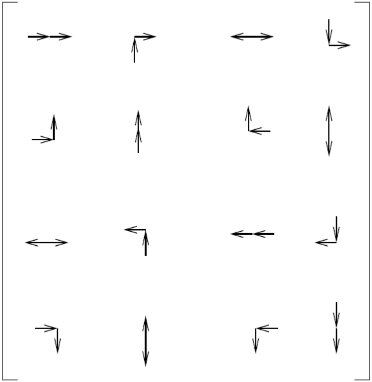


Figura: Elementi della matrice Λ

Soluzione combinatoria: step 3

- Calcolando gli autovalori di Λ:

Funzione di partizione

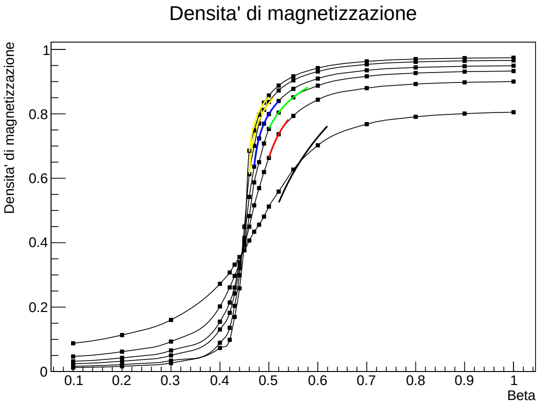
$$Z_N = 2^N \left(1 - v^2\right)^{-N} \prod_{p,q}^{L} \left[\left(1 + v^2\right) - 2v\left(1 - v^2\right)\left(\cos\frac{2\pi p}{L} + \cos\frac{2\pi q}{L}\right)\right]^{1/2}$$

- L'energia libera del sistema è $\frac{F(T)}{kT} = \log Z_N$, e nel limite termodinamico, F ha un punto singolare per v_c:

Temperatura critica T_c

$$\tanh\frac{J}{kT_c} = v_c, \quad kT_c = 2.26922\ldots J$$

- $L = \{10, 20, 30, 40, 60, 80\}$ lato del reticolo.



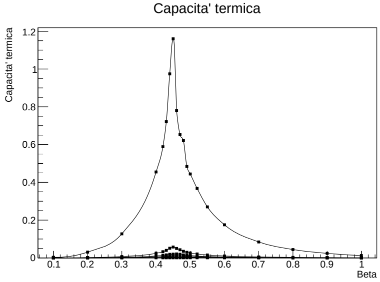
- Aumentando il lato la densità di magnetizzazione tende ad 1.

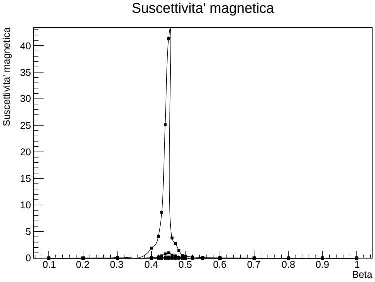
Simulazione Monte Carlo: Densità di magnetizzazione

Teorema di fluttuazione dissipazione

$$\chi(\beta) = \beta\left(\left\langle M^2\right\rangle - \langle M\rangle^2\right);$$

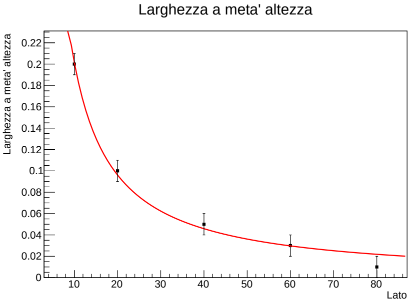
$$C(\beta) = \frac{\partial U(\beta)}{\partial\beta} = \beta^2\left(\langle E\rangle_\beta^2 - \left\langle E^2\right\rangle_\beta\right) \quad .$$





Finite-size scaling: esponente critico ν

- Misurando le varie larghezze a metà altezza della suscettività magnetica, si ricava il valore dell'esponente critico ν:

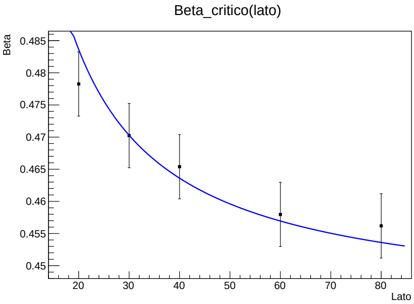


Risultati del fit, $FWHM(L) = \frac{a}{L^{\nu}}$

$a = (2.4 \pm 0.6)$; $\nu = (1.1 \pm 0.1)$; $\nu_{teorico} = 1$
$p - value = 62\%$; $\chi^2 = 1.75$ con 3 gradi di libertà.

Finite-size scaling: β_c del sistema

- β_c in funzione del lato: $\beta_c(L) = \beta_c + bL^{-\frac{1}{\nu}}$



Risultati del fit

$b = (0.8 \pm 0.1)\frac{1}{J}$
$\beta_c = (0.44 \pm 0.01)\frac{1}{J}$; $\beta_{c,teorica} = 0.44\frac{1}{J}$
$p - value = 66\%$; $\chi^2 = 1.58$ con 3 gradi di libertà.

Finite-size scaling: Esponente critico β

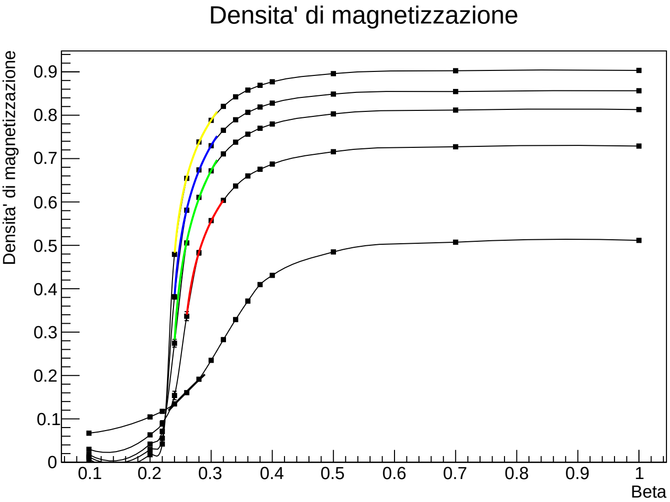
- β_{exp} dalla densità di magnetizzazione in funzione di β, con $L = 40$.

Risultati del fit

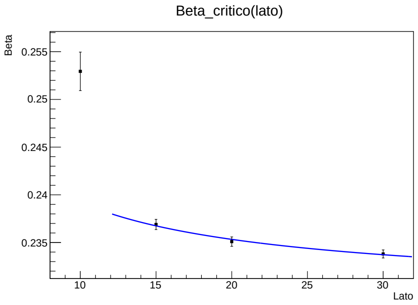
$\beta_{exp} = (0.117 \pm 0.001)$; $\beta_{exp,teorico} = 0.125$
$\chi^2 = 113$ con 3 gradi di libertà.

Simulazione del modello in 3 dimensioni

- Lato $L = \{5, 10, 15, 20, 30\}$ del reticolo cubico.



Finite-size scaling: β_c del sistema in 3 dimensioni



Risultati del fit, $\beta_c(L) = \beta_c + bL^{-\frac{1}{\nu}}$, con $\nu = 0.63$

$b = (0.05 \pm 0.01)\frac{1}{J}$
$\beta_c = (0.228 \pm 0.001)\frac{1}{J}$ con $\beta_{c,teorica} = 0.221\frac{1}{J}$
$p - value = 56\%$; $\chi^2 = 0.34$ con 1 grado di libertà.

Simulazione in NetLogo

Bibliografia

István Montvay and Gernot Münster.
Quantum fields on a lattice.
Cambridge University Press, 1997.

Giuseppe Mussardo et al.
Il modello di Ising: introduzione alla teoria dei campi e delle transizioni di fase.
Bollati Boringhieri, 2007.

Giorgio Parisi.
A short introduction to numerical simulations of lattice gauge theories.
Field Theory, Disorder And Simulations, 49:407, 1992.

John Cardy.
Scaling and renormalization in statistical physics, volume 5.
Cambridge university press, 1996.