



SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

Simulazione numerica Monte Carlo della dinamica del modello di Blume Capel

Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali
Corso di Laurea in Fisica

Candidato
Stefano Bae
Matricola 1844815

Relatore
Prof. Luca Leuzzi

luca leuzzi
[Signature]

Anno Accademico 2020/2021

Tesi non ancora discussa

Simulazione numerica Monte Carlo della dinamica del modello di Blume Capel
Tesi di Laurea. Sapienza – Università di Roma

© 2021 Stefano Bae. Tutti i diritti riservati

Questa tesi è stata composta con \LaTeX e la classe Sapthesis.

Email dell'autore: bae.1844815@studenti.uniroma1.com

Indice

1	Introduzione	1
2	Algoritmo Metropolis	3
2.1	Le Catene di Markov	3
2.2	L'Importance Sampling	4
2.3	L'algoritmo Metropolis	4
2.4	Implementazione sul modello BC	5
3	Osservabili e metodi di analisi	8
3.1	Osservabili	8
3.2	Medie ed errori	8
3.3	Analisi della transizione di secondo ordine	10
3.4	Analisi della transizione di primo ordine e punto tricritico	11
3.5	Effetti e riscaldamento di taglia finita	12
4	Risultati numerici	13
4.1	Termalizzazione e tempo di correlazione	13
4.2	Misure delle osservabili	14
4.3	Transizione del secondo ordine	15
4.4	Transizione del primo ordine	16
4.5	Il punto tricritico	16
5	Conclusione	18
6	Appendice	20
6.1	Metodo del bootstrap [3]	20

Capitolo 1

Introduzione

Il modello di Blume Capel è una generalizzazione del modello di Ising che presenta delle caratteristiche interessanti dal punto di vista dello studio delle transizioni magnetiche.

L'hamiltoniana che descrive il sistema su un reticolo generico in assenza di campi magnetici esterni è la seguente [3]:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \mu \sum_i \sigma_i^2 \quad (1.1)$$

dove $\sigma_i = \{-1, 0, +1\}$ sono i valori possibili degli spin, $\langle ij \rangle$ è la somma sui primi vicini, J è la costante di interazione fra gli spin e μ è il potenziale chimico.

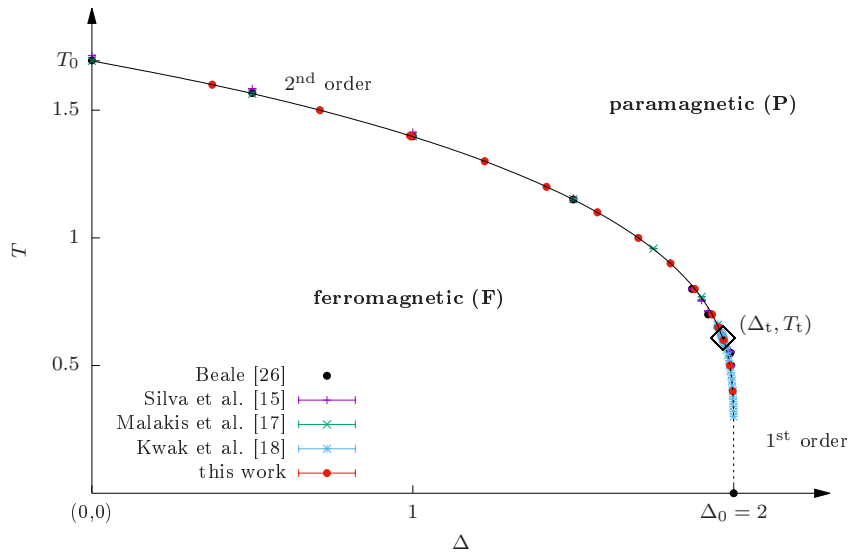


Figura 1.1. Si riporta il diagramma di fase del modello di Blume Capel nel piano (μ, T) . Si nota che $\Delta = \mu$, (Δ_t, T_t) è il punto tricritico e Δ_0 e T_0 sono il potenziale chimico e la temperatura rispettivamente a $T = 0$ e $\mu = 0$ [1].

La caratteristica principale che lo differenzia dal modello di Ising è quella di avere

un punto tricritico (μ_{3c}, T_{3c}) che separa la linea di transizione magnetica del secondo ordine (per $\mu < \mu_{3c}$) da quella del primo ordine (per $\mu > \mu_{3c}$).

Lo studio è quindi focalizzato ad analizzare queste transizioni e trovare il punto tricritico utilizzando una simulazione Monte Carlo. Per semplicità, nelle simulazioni, si pongono $J = 1$ e $k_B = 1$.

Capitolo 2

Algoritmo Metropolis

2.1 Le Catene di Markov

In generale una Catena di Markov (CdM) è un processo dinamico aleatorio con tempi e stati discreti [5]. La caratteristica principale è che dati due stati a e b appartenenti alla catena, la probabilità di transizione dallo stato a allo stato b , $P(a \rightarrow b) = P_{ab}$, dipende solamente dai due stati e non dalla catena precedente al suo trovarsi nello stato a .

In questo caso sono considerate le Catene di Markov Irriducibili (CdMI) ergodiche reversibili. Una CdM si dice *irriducibile* se non può essere scomposta in due sottocatene \mathcal{A} e \mathcal{B} (tale che dalla catena \mathcal{A} non si può passare alla catena \mathcal{B} , o viceversa); è detta *ergodica* se e solo se ogni stato della catena può essere raggiunto da un qualsiasi altro stato della catena, infine è anche *reversibile* se si può dimostrare che [5]:

$$u_b \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} P_{ab}^{(n)} \quad (2.1)$$

$$u_a P_{ab} = u_b P_{ba} \quad (2.2)$$

dove la 2.1 è detta *probabilità limite* e esprime il fatto che la probabilità di passare da uno stato a a uno b in n passi è, al tendere all'infinito dei passi, indipendente sia da n che dal punto di partenza. L'equazione 2.2, detta anche del *bilancio dettagliato*, BD, garantisce che all'equilibrio il sistema converga ad una distribuzione di probabilità stazionaria. Infatti il membro a sinistra è la probabilità di stare in a moltiplicata per la probabilità di transire allo stato b , e dunque rappresenta il rate complessivo di passare da a a b . Applicando lo stesso discorso per il membro a destra, è chiaro che, secondo il BD, il sistema passa dallo stato a allo stato b con la stessa frequenza della transizione opposta, quindi all'equilibrio deve necessariamente convergere verso uno stato, dunque una sola distribuzione di probabilità.

Se ora si considera un sistema termodinamico in un bagno termico a temperatura T con una hamiltoniana $\mathcal{H}[\sigma]$, dove σ è una generica configurazione, si possono identificare gli stati del sistema come stati di una CdMI reversibile. Dalla meccanica statistica è noto che gli stati di un tale sistema saranno, all'equilibrio, distribuiti

secondo la distribuzione di Boltzmann:

$$u_b = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma^{(b)}]}}{Z} \quad (2.3)$$

dove $\sigma^{(b)}$ è la configurazione allo stato b , $\beta = (k_B T)^{-1}$ con k_B la costante di Boltzmann, e Z è la funzione di partizione:

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma]} \quad (2.4)$$

2.2 L'Importance Sampling

L'obiettivo finale di una simulazione Monte Carlo è quello di misurare le osservabili del sistema che possono essere ad esempio l'energia, la magnetizzazione e così via. Quando il sistema arriva all'equilibrio, l'estimatore migliore dell'osservabile è dato dalla media pesata della variabile osservabile, dove i pesi sono secondo la 2.3:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\sigma} Q_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma]}}{\sum_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma]}} \quad (2.5)$$

Gli algoritmi Monte Carlo stimano l'osservabile estraendo in modo randomico un sottinsieme di stati utilizzando una certa distribuzione di probabilità p_i . Supponendo di aver scelto M di questi $\{\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \dots, \sigma^{(M)}\}$, l'estimatore dell'osservabile sarà:

$$Q_M = \frac{\sum_{a=1}^M Q_{\sigma^{(a)}} p_{\sigma^{(a)}}^{-1} e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma^{(a)}]}}{\sum_{a=1}^M p_{\sigma^{(a)}}^{-1} e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma^{(a)}]}} \quad (2.6)$$

Ora è naturale chiedersi da quale distribuzione p_i estrarre gli M stati e si nota immediatamente che utilizzando la distribuzione di Boltzmann, l'espressione si semplifica notevolmente:

$$Q_M = \frac{\sum_{a=1}^M Q_{\sigma^{(a)}}}{M} \quad (2.7)$$

In altre parole si dà maggiore importanza agli stati che sono più probabili, e di conseguenza il valor medio si riduce alla media della variabile in considerazione, campionata secondo la distribuzione di Boltzmann. Da questo deriva il nome *Importance Sampling* [3].

2.3 L'algoritmo Metropolis

A questo punto si deve chiarire come prendere gli stati in modo che questi rispettino la distribuzione di Boltzmann. Nella sezione 2.1 è stato messo in evidenza il rapporto fra CdMI reversibili e sistemi termodinamici. Affinchè l'algoritmo sia consistente con questa relazione, deve rispettare due condizioni.

La prima condizione è quella dell'ergodicità. Infatti la CdM in considerazione è un processo ergodico. Quindi l'algoritmo deve essere in grado di esplorare tutto lo spazio delle fasi anche se questo può richiedere un tempo molto lungo.

La seconda condizione è dettata dal BD e se si sostituiscono le distribuzioni limite, si ottiene:

$$\frac{P_{ab}}{P_{ba}} = e^{-\beta\{\mathcal{H}[\sigma^{(b)}] - \mathcal{H}[\sigma^{(a)}]\}} \quad (2.8)$$

Con questa equazione si costruisce l'algoritmo per estrarre gli stati secondo la distribuzione di Boltzman.

Le P_{ab} e P_{ba} possono essere scomposte in due ulteriori probabilità: una di **proposta**, l'altra di **accettazione**. La probabilità di proposta, g_{ab} (analogamente g_{ba}), è la probabilità con la quale l'algoritmo sceglie uno stato a e genera uno stato target b . Quella di accettazione, A_{ab} (analogamente A_{ba}), è la probabilità che venga accettata tale proposta.

In particolare, nell'algoritmo Metropolis, si impone la simmetria fra g_{ab} e g_{ba} e si lavora sulla probabilità di accettazione. Se la probabilità di proposta è simmetrica, l'equazione 2.8 diventa:

$$\frac{A_{ab}}{A_{ba}} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (2.9)$$

dove è stato posto $\mathcal{H}[\sigma^{(i)}] = E_i$. A questo punto si definisce la probabilità di accettazione in questo modo:

$$A_{ab} = \begin{cases} e^{-\beta(E_b - E_a)} & \text{se } E_b - E_a > 0 \\ 1 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (2.10)$$

In altre parole se lo stato di arrivo ha un'energia minore rispetto allo stato iniziale l'algoritmo accetta sicuramente la proposta, altrimenti viene accettata con una probabilità pari all'esponenziale della differenza.

L'ergodicità è anch'essa soddisfatta. Infatti come si vedrà nella sezione successiva, l'algoritmo ha una cosiddetta *single-flip-dynamics*, ovvero ad ogni passo dell'algoritmo si effettua un unico scambio di spin. Questo garantisce la condizione di ergodicità, poichè scambiando gli spin passo per passo si può transire verso qualsiasi configurazione.

Ora che è stata definita la probabilità di accettazione, l'implementazione al modello di Blume Capel è immediata.

2.4 Implementazione sul modello BC

In questa sezione, non saranno discussi in tutti i dettagli le porzioni di codice, ma solamente qualche dettaglio che può essere utile per risparmiare memoria e tempo di calcolo.

Il sistema simulato è un reticolo quadrato di dimensioni L , quindi con $N = L^2$ siti. Partendo dalla g_{ab} , essendo il reticolo isotropo, la probabilità che venga scelto un sito è pari a $\frac{1}{N}$. Si ricorda che un sito può assumere $\sigma_i = \{-1, 0, +1\}$, e quindi le proposte possibili per ogni sito sono due (ad esempio partendo da $1 \rightarrow \{0, -1\}$), con probabilità $\frac{1}{2}$ ciascuno. Questo vale per qualsiasi valore dello spin del sito scelto, pertanto la probabilità di proposta è simmetrica.

Durante la simulazione si devono campionare i valori delle osservabili, in particolare della magnetizzazione M , dell'energia E e della densità di popolazione ρ , che saranno discussi nel capitolo successivo¹. Calcolarle all'interno della simulazione utilizzando la loro definizione risulta essere un'operazione che consuma molto tempo. Infatti sia la magnetizzazione che la densità sono delle somme su N termini, e il calcolo dell'energia è un'operazione ancor più dispendiosa. Per fortuna la maggior parte dei termini rimane la stessa, pertanto si può osservare che se k è il sito selezionato:

$$\begin{aligned} E_b - E_a &= -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^{(b)} \sigma_j^{(b)} + \mu \sum_i \sigma_i^{(b)^2} + J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^{(a)} \sigma_j^{(a)} - \mu \sum_i \sigma_i^{(a)^2} = \\ &= -J(\sigma_k^{(b)} - \sigma_k^{(a)}) \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i + \mu(\sigma_k^{(b)^2} - \sigma_k^{(a)^2}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

dove si è tolto l'apice (a) poichè i primi vicini del sito k rimangono invariati. In maniera analoga si possono calcolare le differenze per la magnetizzazione e della densità che sono riportate nella tabella 2.1.

$\sigma_k^{(a)}$	$\sigma_k^{(b)}$	ΔE_{ba}	ΔM_{ba}	$\Delta \rho_{ba}$
+1	0	$+J \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i - \mu$	-1	-1
-1	0	$-J \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i - \mu$	+1	-1
0	+1	$-J \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i + \mu$	+1	1
0	-1	$+J \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i + \mu$	-1	1
+1	-1	$+2J \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i$	-2	0
-1	+1	$-2J \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i$	+2	0

Tabella 2.1. Valori tabulati delle differenze in energia, magnetizzazione e densità di occupazione a seconda della transizione proposta.

Inoltre la somma dei primi vicini $\sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i$ può assumere solo valori ben definiti, $\{-4, -3, \dots, 0, 1, \dots, 4\}$, e di questi valori, quelli utili per il calcolo delle probabilità di accettazione sono solamente quelli per cui $\Delta E_{ba} > 0$. Quindi possono essere tabulate all'inizio della simulazione tutte le possibili probabilità di accettazione e far riferimento a questa *look up table* ogni volta che il programma deve effettuare un flip, evitando di calcolare esponenziali (molto dispendiosi per il computer) in modo ripetuto.

Per concludere il capitolo, si definisce il Monte Carlo Step (MCS) della simulazione come N passi singoli dell'algoritmo 1. In questo modo ad ogni MCS tutti i siti sono aggiornati, in media, almeno una volta.

¹In questo caso le variabili considerate sono quelle estensive. Nell'analisi dei dati sono utilizzate quelle intensive.

Algorithm 1: Algoritmo Metropolis per il modello BC.

Per compattificare il codice si assume che i valori degli spin sono assunti in modo ciclico. Con P_{acc} si intende la probabilità di accettazione.

```

 $k \leftarrow \text{random}([0, N));$ 
 $spin_{old} \leftarrow \sigma_k;$ 
 $r \leftarrow \text{random}([0, 1));$ 
if  $r \geq 0.5$  then
     $spin_{new} \leftarrow \sigma_k + 1;$ 
     $\Delta E \leftarrow \text{from tab 2.1};$ 
    if  $\Delta E \leq 0$  then
         $\sigma_k \leftarrow spin_{new};$ 
    else if  $P_{acc} > \text{random}([0, 1))$  then
         $\sigma_k \leftarrow spin_{new};$ 
else
     $spin_{new} \leftarrow \sigma_k - 1;$ 
     $\Delta E \leftarrow \text{from tab 2.1};$ 
    if  $\Delta E \leq 0$  then
         $\sigma_k \leftarrow spin_{new};$ 
    else if  $P_{acc} > \text{random}([0, 1))$  then
         $\sigma_k \leftarrow spin_{new};$ 

```

Capitolo 3

Osservabili e metodi di analisi

In questo capitolo si spiegano le osservabili considerate per lo studio del modello e il tipo di analisi effettuato per caratterizzare le transizioni di fase del modello di Blume Capel.

3.1 Osservabili

Le principali osservabili considerate per caratterizzare le transizioni di fase del modello di Blume Capel sono: la magnetizzazione, m , e la densità di occupazione ρ .

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.1)$$

$$\rho = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \quad (3.2)$$

Insieme a queste si sono osservate anche l'energia (definita dall'hamiltoniana 1.1), E , e il calore specifico, c :

$$c = \frac{k_B \beta^2}{N} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) \quad (3.3)$$

3.2 Medie ed errori

Una volta che l'algoritmo ha portato all'equilibrio il sistema, si possono calcolare le medie delle osservabili:

$$\bar{Q} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_i \quad (3.4)$$

Se i campionamenti sono scorrelati fra loro l'errore da associare è semplicemente:

$$\sigma_{\bar{Q}} = \sqrt{\frac{1}{M-1} (\overline{m^2} - \bar{m}^2)} \quad (3.5)$$

In realtà le misure acquisite non sono tra loro scorrelate. Ogni misura ha una certa memoria delle misure precedenti, ovvero lo stato attuale è condizionato da quello

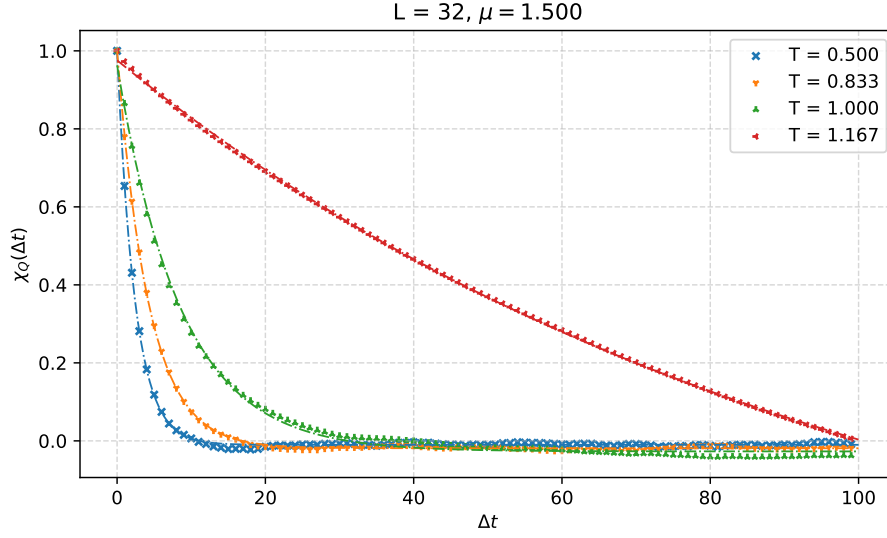


Figura 3.1. Andamento esponenziale dell'autocorrelazione normalizzata col fattore $\chi_Q(0)$ con $L = 32$ e $\mu = 1.500$. Si nota che più la temperatura è vicina alla temperatura critica (in questo caso $T_c = 1.15$ [1]), più lentamente converge a 0.

precedente, ma fino a che punto questa memoria ha effetto? Per studiare questo aspetto si utilizza la funzione di autocorrelazione della variabile Q , $\chi_Q(\Delta t)$, che rappresenta il grado di correlazione di due misure a distanza Δt :

$$\chi_Q(\Delta t) = \frac{1}{M - \Delta t} \sum_{t=1}^{M-\Delta t} Q_t Q_{t+\Delta t} - \left(\frac{\sum_{t=1}^{M-\Delta t} Q_t}{M - \Delta t} \right) \left(\frac{\sum_{t=1}^{M-\Delta t} Q_{t+\Delta t}}{M - \Delta t} \right) \quad (3.6)$$

Dalla forma dell'equazione si nota chiaramente che se Δt è sufficientemente grande, e quindi le misure hanno perso memoria, la prima somma e le due a destra diventano circa identiche e quindi l'autocorrelazione tenderà a 0. Se invece è piccolo, le misure sono fortemente correlate, e per $\Delta t = 0$ si ha che $\chi_Q(0) = \overline{Q^2} - \overline{Q}^2$.

Complessivamente l'autocorrelazione ha un'andamento esponenziale 3.1:

$$\chi_Q(\Delta t) = \chi_Q(0) e^{-\Delta t/\tau} \quad (3.7)$$

dove τ è detto tempo correlazione. Questo perchè dopo circa $\Delta t = 2\tau$, l'autocorrelazione diminuisce dell'86.5% e si possono definire le due misure quasi scorrelate. Si può inoltre dimostrare [3] che l'autocorrelazione, in questo caso per la magnetizzazione, è data da:

$$\tilde{\chi}_Q(k) = |\tilde{m}'(k)|^2 \quad (3.8)$$

dove $\tilde{m}'(k)$ è la trasformata di Fourier di $m'(t) = m(t) - \langle m \rangle$. Allora il tempo di correlazione è dato da

$$\tau = \frac{\tilde{\chi}_Q(0)}{\chi_Q(0)} \quad (3.9)$$

che corrisponde a calcolare la somma (o l'integrale) dell'equazione 3.7 normalizzata col fattore $\chi_Q(0)$.

A questo punto l'errore sulle medie si calcolano attraverso la 3.5. Mentre per le osservabili più complicate, è stato utilizzato il metodo del *bootstrap*, descritto nell'appendice 6.1

Ma come si capisce che il sistema ha termalizzato? Questo è fondamentale poichè le osservabili vanno misurate solamente nella finestra temporale (in unità MCS) in cui il sistema ha raggiunto l'equilibrio. Per fare ciò si può analizzare la distribuzione di probabilità della magnetizzazione $P(m)$. Infatti la fase ferromagnetica può essere sia $\langle m \rangle = 1$ che -1 con la stessa probabilità, quindi la $P(m)$ è simmetrica rispetto a $\langle m \rangle = 0$. Quindi utilizzando la media e la skewness S

$$S = \frac{\langle (m - \langle m \rangle)^3 \rangle}{\langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle^{\frac{3}{2}}} = \frac{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (m_i - \bar{m})^3}{\left[\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (m_i - \bar{m})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \quad (3.10)$$

si può dare un criterio per trovare il raggiungimento dell'equilibrio. Si riporta schematicamente il procedimento:

1. Si pone $t_{corr} = 2^{\log C}$ tempo di correlazione in base 2.
2. Si pone $INIT = 2^{\log INIT}$ unità di base della finestra da osservare.
3. Si costruisce un istogramma contenente un dato ogni t_{corr} per gli intervalli $\left[2^{\log C + \log INIT + i}, 2^{\log C + \log INIT + i + 1} \right)$. Con i che varia da 0 fino all'esaurimento dei dati.
4. Per ogni istogramma sono riportati $\bar{m} \pm \sigma_{\bar{m}}$ e $S \pm \sigma_S$.
5. Quanto i due valori sono compatibili con 0, l'indice corrispondente, i_{term} rappresenta la finestra in cui il sistema ha termalizzato.

3.3 Analisi della transizione di secondo ordine

Per caratterizzare le transizioni di secondo ordine è stato utilizzato il cumulant di quarto ordine, detto anche parametro di Binder [4]:

$$B_m(L, T) = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right) = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{M \sum_{i=1}^M (m_i - \bar{m})^4}{\left[\sum_{i=1}^M (m_i - \bar{m})^2 \right]^2} \right) \quad (3.11)$$

dove m indica che è riferito alla magnetizzazione (difatti a seconda del sistema in considerazione la variabile del parametro può cambiare). Il Binder ha la caratteristica di essere una funzione della temperatura compresa tra 0 e 1. Infatti considerando che per $T < T_c$ i momenti $\langle m^4 \rangle$ che $\langle m^2 \rangle^2$ tendono a 1, si ha che $B_m(L, T \rightarrow 0) = 1$. Mentre per $T > T_c$ la magnetizzazione è distribuita come una gaussiana attorno allo zero e dato che la kurtosi di una gaussiana è pari a 3, il termine $\frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} = 3$ e quindi $B_m(L, T \rightarrow \infty) = 0$. Il fatto notevole è che $B_m(L, T_c)$ è un punto fisso per L grandi. Quindi la temperatura critica, T_c , può essere estratta dall'intersezione degli andamenti per diversi valori di L .

3.4 Analisi della transizione di primo ordine e punto tricritico

Per le transizioni di primo ordine il parametro di Binder risulta meno adatto a causa della discontinuità della magnetizzazione nel punto critico. Come alternativa è stata utilizzata la distribuzione di probabilità della densità di occupazione, $P(\rho)$. La densità di occupazione, variabile coniugata al potenziale chimico, è sostanzialmente la misura degli stati non nulli, pertanto assume un valore prossimo a 1 nella fase ferromagnetica, mentre, nella fase paramagnetica, per valori del potenziale chimico sufficientemente alto, tende verso lo 0 (come si può vedere dalla figura 3.2). Durante la transizione di primo ordine vi è la coesistenza di queste due fasi, in altre parole sono equiprobabili [2].

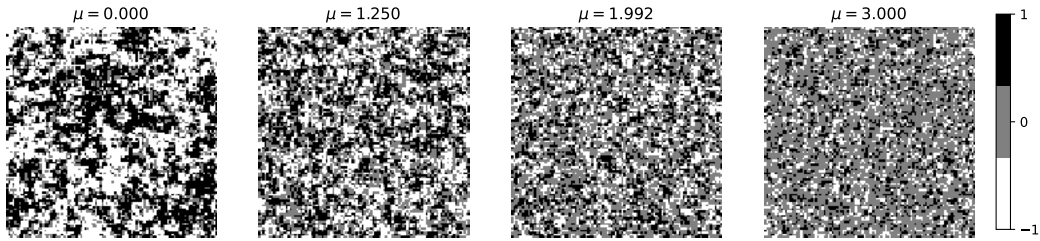


Figura 3.2. Da sinistra a destra sono riportate le configurazioni con potenziale μ crescente su un reticolo $L = 100$ in un bagno termico a $T = 2$. Si osserva che all'equilibrio, i siti neutri aumentano con il potenziale.

La strategia adottata è quella di campionare ρ all'equilibrio per ricostruire la $P_{T,\mu}(\rho)$ con un istogramma, dove con il pedice si indica il potenziale chimico e la temperatura a cui corrisponde la distribuzione. A questo punto si campionano le distribuzioni variando o T o μ e si individua la mediana ρ_0 in cui la fase ferromagnetica e la fase paramagnetica diventano equiprobabili:

$$\int_0^{\rho_0} d\rho P_{T,\mu}(\rho) = \int_{\rho_0}^1 d\rho P_{T,\mu}(\rho) \quad (3.12)$$

Se ora si considera la figura 1.1, si osserva che la linea di transizione del primo ordine è quasi verticale all'asse della temperatura, quindi è conveniente fissare la temperatura e cambiare il potenziale chimico per trovare $\mu_c(T)$.

Per quanto riguarda la caratterizzazione del punto tricritico, il procedimento è sostanzialmente identico. Nella transizione di secondo ordine, la distribuzione bimodale, che si presenta in quella di primo ordine, diventa unimodale, e sfruttando questo fatto si può analizzare la $P(\rho)$ variando questa volta sia la temperatura che il potenziale. Questo perchè ci sono gli effetti di scala finita, e pertanto si ottengono solamente dei punti pseudo tricritici che verranno analizzati con il riscaldamento di taglia finita descritto nella sezione successiva. In particolare si osserverà che all'aumentare di L la temperatura tende dall'alto al valore asintotico, mentre il potenziale lo fa dal basso.

3.5 Effetti e riscaldamento di taglia finita

Un problema fondamentale delle simulazioni è che la scala del sistema è sempre finita. Anche se si potrebbero effettuare simulazioni più pesanti con dimensioni elevate, queste richiederebbero tempi di termalizzazione molto lunghi e anche i tempi di autocorrelazione divergerebbero. Ad esempio nel modello di Ising simulato con Metropolis, il tempo di correlazione scala come $\tau \propto L^z$ con $z = 2.1665 \pm 0.0012$, come misurato da Nightingale e Blote [3]. Quindi già considerando un reticolo $L = 100$ si otterrebbe un tempo di correlazione dell'ordine di 10^4 e dovendo avere anche una buona statistica, il tempo di simulazione crescerebbe in modo incontrollato. Per questa ragione, per avere i risultati nel limite termodinamico, si utilizzano gli effetti di scala finita.

Per capirne l'origine è necessario introdurre la lunghezza di correlazione ξ , che svolge lo stesso ruolo del tempo di correlazione, solo che si applica nello spazio: due spin a distanza più piccola di ξ sono tra loro fortemente correlati, mentre per distanze maggiori sono scorrelati.

In generale, in un sistema di dimensioni finite L , per temperature che rendono $\xi(T) \ll L$, il comportamento segue il limite termodinamico, mentre per $\xi(T) \gg L$ si manifestano gli effetti della limitatezza di L . Quando invece $\xi(T) \approx L$ il comportamento diventa una via di mezzo. Quindi ci si aspetta che gli andamenti delle osservabili di diverse scale, in funzione della temperatura, si sovrappongano per valori lontani da T_c mentre nel suo intorno si aspetta una forte dipendenza da L . In particolare sono illustrati due effetti considerati in questa analisi per verificare che le temperature critiche ottenute siano consistenti [4].

Il primo effetto di taglia finita è che l'andamento termodinamico può essere ottenuto riscaldando le osservabili termodinamiche nelle vicinanze del punto critico. Si riporta l'esempio del parametro di Binder utilizzato per analizzare le transizioni di secondo ordine [4]:

$$B_m(L, T) \approx \tilde{B}_m(L^{\frac{1}{\nu}}(T - T_c)) \quad (3.13)$$

dove ν è un'esponente che rappresenta la classe di universalità del modello (in questo caso Ising e pertanto $\nu = 1$ [6]). La scelta del fattore di scala, $L^{\frac{1}{\nu}}(T - T_c)$, è dovuto al fatto che la lunghezza di correlazione diverge come $\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}$ e quindi la si compensa con la scala del reticolo L . Utilizzando questo riscaldamento si dovrebbe osservare che i diversi andamenti del Binder collassano su un'unica curva.

Il secondo effetto, utilizzato in particolare per le transizioni di primo ordine, è la dipendenza del potenziale critico dalla scala L . Si è osservato durante le simulazioni che i valori del potenziale critico si distribuiscono secondo un andamento a potenza:

$$\mu_c(L) = \mu_c^\infty + aL^{-x} \quad (3.14)$$

dove con l'apice ∞ si indica il valore che assumerebbe nel limite termodinamico, a e x sono parametri del fit.

Capitolo 4

Risultati numerici

In questo capitolo si riportano i risultati numerici delle simulazioni. Tutte le simulazioni sono state effettuate partendo da un reticolo in cui gli spin sono distribuiti in maniera equiprobabile.

4.1 Termalizzazione e tempo di correlazione

Per stimare il tempo di correlazione è stato prima di tutto individuato, in modo anche grossolano, il tempo di termalizzazione utilizzando il procedimento descritto nella sezione 3.2, ponendo $\log C = 7$ e $\log INIT = 2$. Una volta ottenute le termalizzazioni si è proceduto a calcolare l'autocorrelazione $\chi_Q(\Delta t)$ e i tempi di correlazione τ .

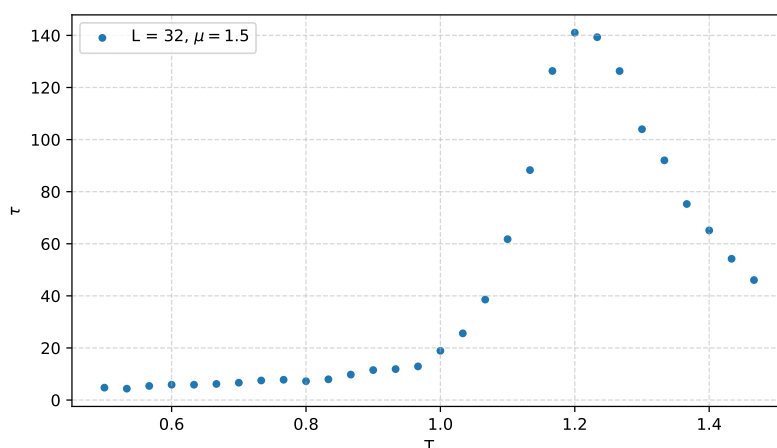


Figura 4.1. Andamento di τ in funzione della temperatura. Si osserva che il tempo di correlazione assume valori alti in prossimità di $T_c = 1.15$ [1].

Come si può osservare dalla figura 4.1, il tempo di correlazione ha un picco intorno alla temperatura critica, e il suo valore espresso come potenza in base 2 è ≈ 7 . Per tutte le misure successive è stato deciso di utilizzare il doppio di questo tempo, in questo modo le misure lontane dalla regione critica saranno sicuramente scorrelate, mentre quelle vicine lo saranno almeno all'86.5%. Quindi si è proceduto a ricostruire

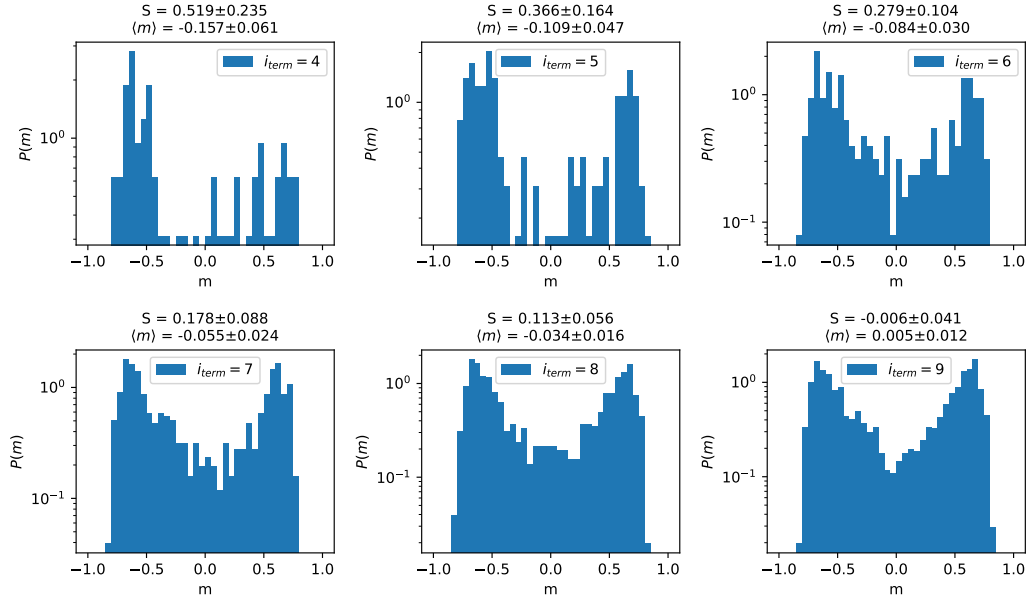


Figura 4.2. Andamento della $P(m)$ per diversi indici i_{term} con $L = 20$ e $\mu = 1.000$. Si osserva come allargando la finestra temporale le distribuzioni diventino più simmetriche. Le distribuzioni sono normalizzate, con la condizione $\sum_{i=1}^{bin_{max}} P_i \Delta_{bin} = 1$, dove Δ_{bin} rappresenta la larghezza del singolo bin.

nuovamente la $P(m)$ (figura 4.2), stavolta utilizzando $\log C = 8$ e lasciando invariato $\log INIT$. Si individua che nella maggior parte dei casi la termalizzazione avviene per $\log C + \log INIT + i_{term} = 19$, pertanto è stato utilizzato questo valore per la misura delle osservabili.

4.2 Misure delle osservabili

In questa sezione si riportano gli andamenti registrati della magnetizzazione, dell'energia e del calore specifico per diversi valori del reticolo e del potenziale.

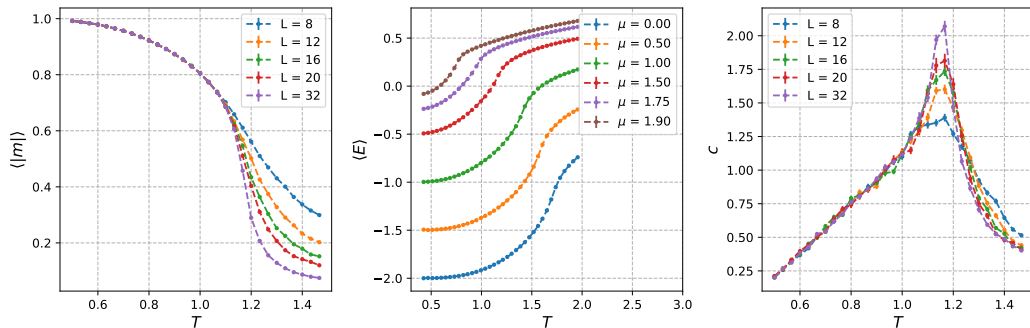


Figura 4.3. In ordine, sono riportati gli andamenti della magnetizzazione, dell'energia, e del calore specifico.

Dalle figure 4.3, è chiaro che gli andamenti sono coerenti con ciò che si aspettava.

Partendo dalla magnetizzazione (in questo caso si è riportata la media del modulo per evitare fluttuazioni da $+1$ a -1), si osserva che al di sotto della temperatura critica tende a 1 e nel suo intorno compie una transizione verso lo stato con magnetizzazione nulla, ma avendo preso la media del modulo è chiaro che la transizione è meno immediata e i valori restano sempre maggiori di 0.

Si nota dalla figura al centro che, al variare del potenziale, l'andamento dell'energia risulta sostanzialmente lo stesso, ad eccezione del fatto che aumentando il potenziale, il valore minimo che può assumere aumenta. Nel dettaglio si osserva che per potenziale nullo, il valore minimo è proprio $\langle E(T \rightarrow 0) \rangle = -2$ e mano a mano che si incrementa il potenziale, il valore minimo dell'energia è alzato della stessa quantità, in accordo con quanto espresso dall'equazione 1.1.

Infine si nota dal plot del calore specifico, l'effetto della scala finita. L'andamento fuori dalla regione critica coincide per le differenti dimensioni del reticolo, mentre intorno a T_c , il calore specifico tende a divergere in modi diversi.

4.3 Transizione del secondo ordine

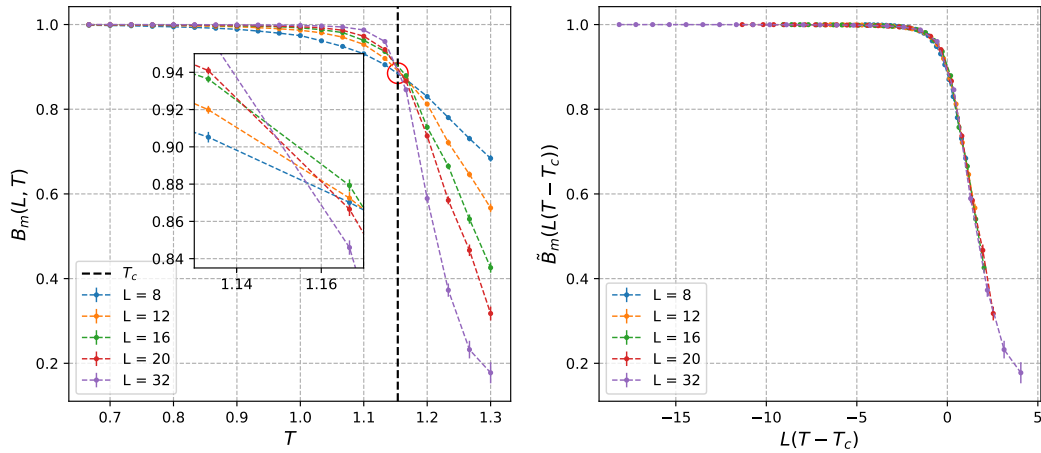


Figura 4.4. A sinistra, è riportato un ingrandimento del punto di intersezione (zona cerchiata in rosso) dei parametri di Binder. A destra il riscaldamento attraverso la variabile $L(T - T_c)$, con $T_c = 1.15$ [1]. Il tutto è per $\mu = 1.500$.

Dalle misure della magnetizzazione è stato ricavato il parametro di Binder come riportato nell'equazione 3.11. Ingrandendo il punto di intersezione si nota che le intersezioni non avvengono tutte nello stesso punto 4.4. Questo è dovuto principalmente a due ragioni. La prima è che i punti raccolti non sono abbastanza densi, e avendo effettuato un'interpolazione lineare, il punto d'intersezione non rispecchia il vero punto critico. La seconda ragione è un fatto più fisico, ovvero che gli effetti di scala finita si manifestano per dimensioni del reticolo abbastanza grandi, mentre in questo caso sono state utilizzate anche dimensioni molto piccole come $L = 8$. Purtroppo non si nota una particolare dipendenza funzionale della temperatura critica in funzione delle dimensioni del reticolo, quindi come misura è

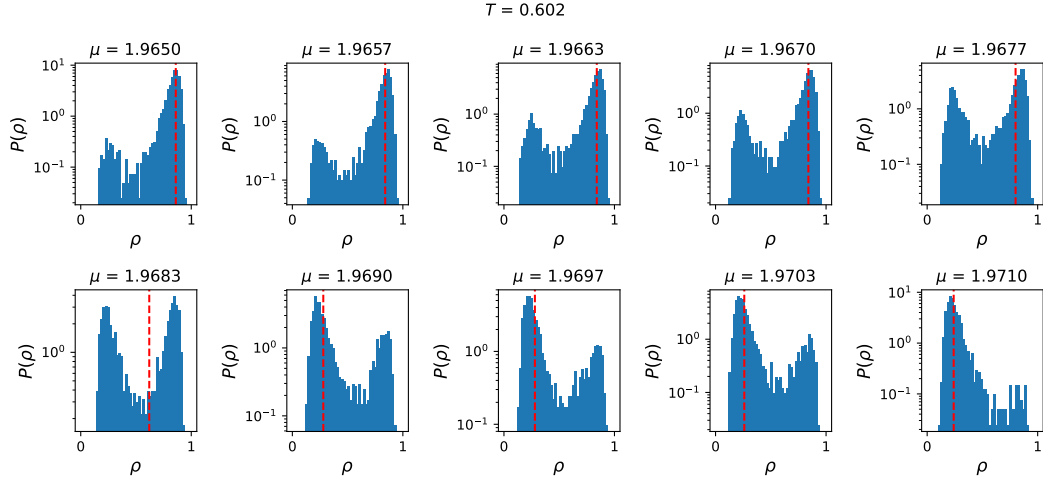


Figura 4.5. Si riporta l'andamento della $P(\rho)$ al variare del potenziale chimico per $L = 32$. La linea rossa rappresenta la mediana. In presenza di coesistenza di fase ci sono due picchi distanti e la mediana rappresenta il punto in cui i due picchi hanno la stessa area. Si può osservare che il potenziale critico deve essere compreso tra le due figure in basso a sinistra. Le distribuzioni sono normalizzate, con la condizione $\sum_{i=1}^{bin_{max}} P_i \Delta_{bin} = 1$, dove Δ_{bin} rappresenta la larghezza del singolo bin.

stata assunta la media delle temperature critiche tenendo fisso il Binder a $L = 32$ e come errore è stata presa la semidispersione.

Come verifica di tale valore è stato riscaldato il parametro di Binder per i diversi L utilizzando la relazione 3.13, e come si può osservare dalla figura a destra 4.4, gli andamenti collassano su un'unica curva.

I risultati per la linea di transizione nel piano (μ, T) sono riportati nella tabella riassuntiva 5.1.

4.4 Transizione del primo ordine

Si è visto nella sezione 3.4 che nel punto critico di una transizione di primo ordine vi è la coesistenza delle fasi paramagnetica e ferromagnetica. L'analisi delle $P(\rho)$ è stata effettuata registrando le distribuzioni diversi valori del potenziale chimico, partendo da temperature alte. Individuati i due valori di μ per cui le due fasi sono all'incirca equiprobabili, è stato effettuato un ulteriore campionamento con maggiore dettaglio nell'intervallo compreso fra i due valori (figura 4.5). Si è ripetuto il procedimento per $L = \{8, 12, 16, 20, 32\}$.

Una volta ottenuti gli pseudo potenziali critici, $\mu_c(L)$, è stato effettuato un fit 4.6 utilizzando l'equazione 3.14, ottenendo i risultati riportati in tabella 5.1.

4.5 Il punto tricritico

Come descritto nella sezione 3.4, per trovare il punto critico si è nuovamente analizzata la distribuzione della densità di occupazione. La ricerca del punto tricritico è stata effettuata in prossimità dei valori $(\mu_{3c}, T_{3c}) = (1.96604(1), 0.608)$, come riportato

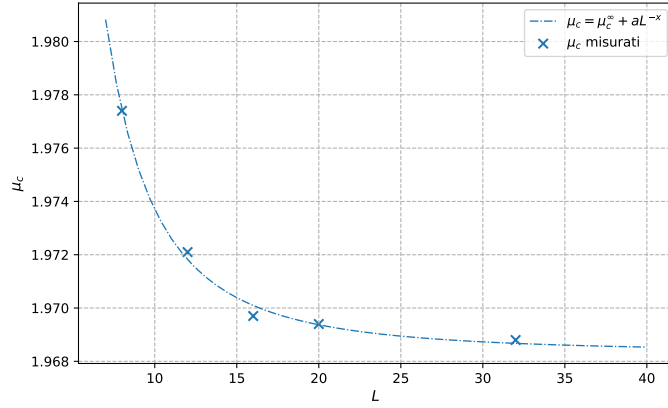


Figura 4.6. Andamento dei potenziali chimici pseudo critici in funzione della dimensione del reticolo.

dall'articolo [1]. Come aspettato, le temperature e i potenziali pseudo tricritici (μ_{3c}^*, T_{3c}^*) , si distribuiscono secondo un andamento a potenza (figura 4.7), riportando i seguenti risultati:

$$(\mu_{3c}^*, T_{3c}^*) = (2.1(8), 0.61(1))$$

Purtroppo, i parametri del fit hanno un errore relativo molto alto (la temperatura ha un'errore del 1.6%, che è già più accettabile, ma il potenziale del 38%), che si rendono compatibili i valori col riferimento, ma sono poco indicativi.

Il motivo di questa discrepanza, può essere individuato in due punti. Il primo è la mancanza di statistica. Infatti il fit richiede 3 parametri mentre i punti forniti sono solamente 4, e questo può portare all'aumento dell'errore. Il secondo è un motivo più fisico. Come descritto nella sezione 3.5, gli effetti di scala finita si manifestano verso dimensioni del reticolo sufficientemente grandi. Quindi può darsi che l'effetto asintotico osservato in questa analisi, sia in realtà differente dall'effetto asintotico che si sarebbe potuto osservare misurando (μ_{3c}^*, T_{3c}^*) per valori di L maggiori di 32.

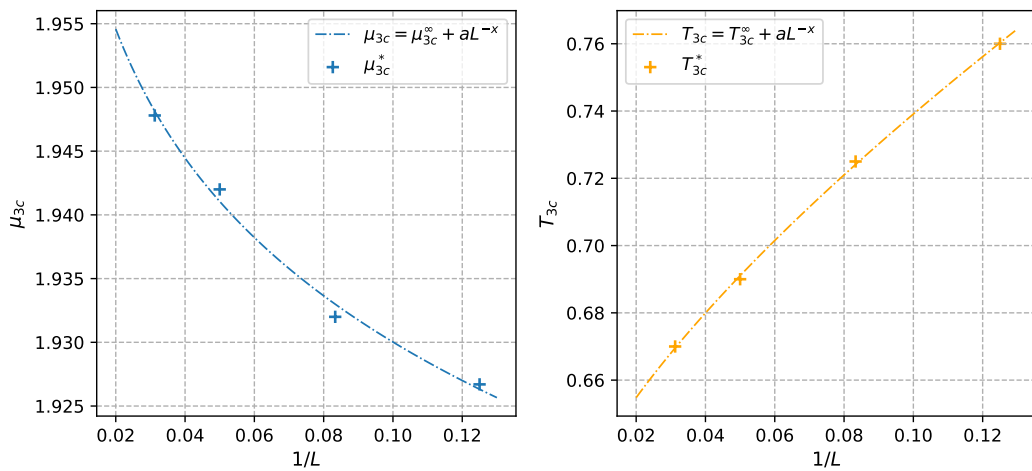


Figura 4.7. Andamenti dei punti pseudo tricritici in funzione dell'inverso della scala L .

Capitolo 5

Conclusione

In questo capitolo si riassumono i risultati ottenuti.

μ	T_c	T	μ_c	Transizione
0	1.691(4)			Secondo ordine
0.25	1.633(3)			Secondo ordine
0.5	1.565(3)			Secondo ordine
0.75	1.487(2)			Secondo ordine
1	1.395(5)			Secondo ordine
1.25	1.291(2)			Secondo ordine
1.5	1.154(7)			Secondo ordine
1.75	0.963(4)			Secondo ordine
1.9	0.773(5)			Secondo ordine
		0.61	1.963(1)	Primo ordine
		0.608	1.9648(6)	Primo ordine
		0.607	1.9654(7)	Primo ordine
		0.605	1.9673(4)	Primo ordine
		0.602	1.9674(8)	Primo ordine
		0.6	1.9683(5)	Primo ordine
		0.574	1.9747(5)	Primo ordine

Tabella 5.1. Tabella con i risultati delle simulazioni. Con T e μ si indicano le temperature oppure i potenziali tenuti fissi, mentre con il pedice c si indicano i rispettivi punti critici.

Nella tabella 5.1 sono riportati tutti i risultati delle sezioni 4.2,4.3. Come si può osservare anche dalla figura 5.1, i dati sono in ottimo accordo con le simulazioni riportate nell'articolo [1]. Si pone però attenzione ai dati evidenziati in grassetto. Il primo dato a $T = 0.61$ dovrebbe essere, nel limite termodinamico, una transizione di secondo ordine, ma come già osservato nella sezione 4.5, a causa della scala limitata si manifesta prima la transizione di primo ordine. Per quanto riguarda il secondo dato la logica è la stessa e in particolare questo punto dovrebbe, nel limite termodinamico, coincidere col punto tricritico. Difatti, è molto vicino al valore $(\mu_{3c}, T_{3c}) = (1.96604(1), 0.608)$ [1].

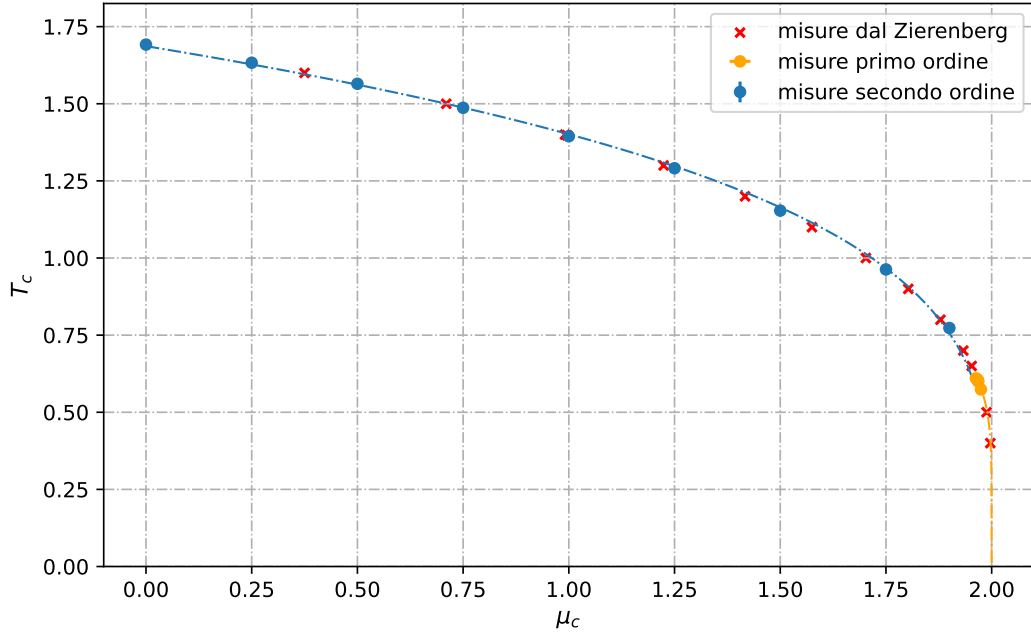


Figura 5.1. Linee di transizione del primo e secondo ordine nel piano (μ, T) con le misure ottenute in questo studio, accompagnate da quelle effettuate nell'articolo [1].

Per la caratterizzazione del punto tricritico, nella sezione 4.5 si sono individuati come problemi principali la mancanza di statistica e dei forti effetti di taglia finita, ancora troppo evidenti per le piccole dimensioni dei reticoli simulati. Entrambe i punti hanno un fattore in comune: l'algoritmo Metropolis, per quanto possa essere intuitivo e semplice, risulta molto inefficiente nel prendere misure nella zona critica a causa del *critical slowdown* [3]. Aumentare la dimensione, oppure effettuare troppe simulazioni, risulta essere un'operazione inefficiente. Nonostante ciò può essere utilizzato senza problemi per dare una stima grossolana del comportamento critico del modello di Blume Capel in 2D.

Capitolo 6

Appendice

6.1 Metodo del bootstrap [3]

Supponendo di avere una certa osservabile O , che può dipendere da altre osservabili più semplici come ad esempio l'energia o la magnetizzazione, il calcolo dell'errore attraverso la propagazione dell'errore potrebbe risultare complicato. Non solo, avendo dei dati che possono essere leggermente correlati, si dovrebbe tener considerazione anche delle covarianze e tutto questo risulta poco pratico. Il metodo del bootstrap è un metodo di calcolo dell'errore che si basa sul ricampionamento dei dati raccolti, e il procedimento, supponendo di avere n misure:

1. Si estraggono n misure dal campione in modo casuale permettendo duplicati.
2. Si calcola l'osservabile O da queste n misure attraverso la sua dipendenza funzionale.
3. Si ripetono questi due punti per k volte.
4. La media 6.1 e l'errore sulla media 6.2 sono date dalla media e dalla deviazione standard della distribuzione dell'osservabile.

$$\bar{O} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k O_i \quad (6.1)$$

$$\sigma_{\bar{O}} = \sqrt{\overline{O^2} - \bar{O}^2} \quad (6.2)$$

Bibliografia

- [1] Zierenberg, J., Fytas, N.G., Weigel, M. et al. Eur. Phys. J. Spec. Top. 226, 789–804 (2017).
- [2] Leuzzi L., Paoluzzi M., Crisanti A., Phys. Rev. B, 83, 014107 (2011)
- [3] Newman M.E.J., Barkema G.T. Monte Carlo methods in statistical physics, Oxford (1999)
- [4] Barone L.M., Marinari E., Organtini G., Ricci Tersenghi F., Programmazione scientifica, Pearson (2015)
- [5] Leuzzi L., Marinari E., Parisi G., Trattatello di Probabilità, versione a.a 2020-2021
- [6] https://it.wikipedia.org/wiki/Classe_di_universalità