

CONFRONTO DI ALGORITMI MONTECARLO PER LA SIMULAZIONE DI SISTEMI DI SPIN

**Università degli studi di Parma
Corso di laurea triennale in Fisica**

**Candidato: Federico Di Credico
Relatore: Professor F. Di Renzo**

UN SISTEMA DI SPIN

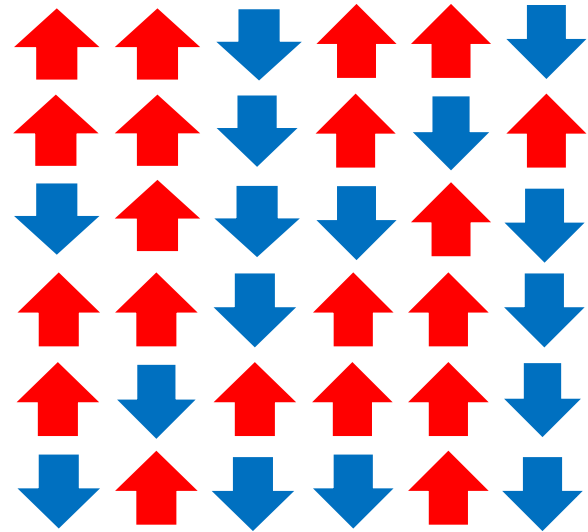
Modello di ising 2D:

$$H(\sigma) = \underbrace{-J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j}_{H_0} - \underbrace{h \sum_i \sigma_i}_{H'}$$

- H_0 : interazione tra spin primi vicini ($\langle i, j \rangle$)
- H' : interazione tra gli spin e il campo magnetico esterno (h)

- Per $D \geq 2$ il sistema presenta una transizione di fase (possibilità di magnetizzazione spontanea)

Reticolo: $L^2 = V$ elementi



$$\sigma_i = \mp 1$$

OSSERVABILI DEL SISTEMA

- In meccanica statistica voglio calcolare:

$$\langle f(x) \rangle_{\Pi} = \sum_i f(x_i) \Pi(x_i) \equiv \sum_i f(x_i) \Pi_i$$

- L'obiettivo è quello di sostituire medie sulla distribuzione di probabilità con medie temporali su una evoluzione stocastica

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N f_t \quad t.c. \quad \bar{f} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Pi}$$

PROCESSO DI MARKOV

- Definiamo la matrice W tale che:

$$W_{ij} = P(i \leftarrow j) \quad i, j \text{ configurazioni del sistema}$$

- Per W valgono le seguenti proprietà:

- $W_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j$ - è una probabilità
- $\sum_i W_{ij} = 1 \quad \forall j$ - condizione di normalizzazione
- $\forall i, j \quad \exists N_{ij} \text{ t.c. } W_{ij}^{N_{ij}} > 0$ - processo irriducibile

- Data una distribuzione di probabilità iniziale P^0

$$W^N P^0 = P^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \Pi \quad \text{se vale } \boxed{W\Pi = \Pi}$$

PROBLEMA INVERSO E BILANCIO DETTAGLIATO

- Conosco Π : come trovo una W che soddisfi la condizione di stazionarietà?
- Una condizione sufficiente è quella del bilancio dettagliato:

$$W_{xy}\Pi_y = W_{yx}\Pi_x$$

- Dimostrazione semplice:

- Poiché $\sum_i W_{ij}\Pi_j = 1$
- Se sommo su i ottengo:

$$\sum_i W_{ij}\Pi_j = \Pi_j = \sum_i W_{ji}\Pi_i \quad \text{ovvero} \quad \boxed{\sum_i W_{ji}\Pi_i = \Pi_j}$$

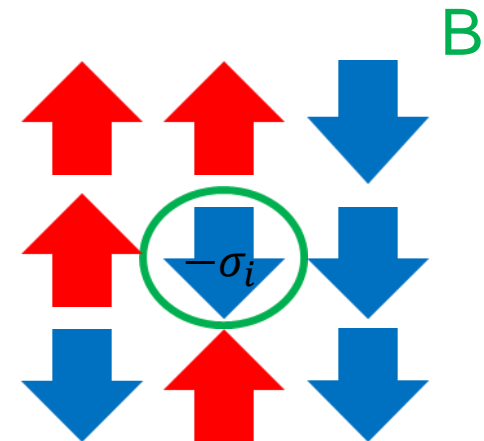
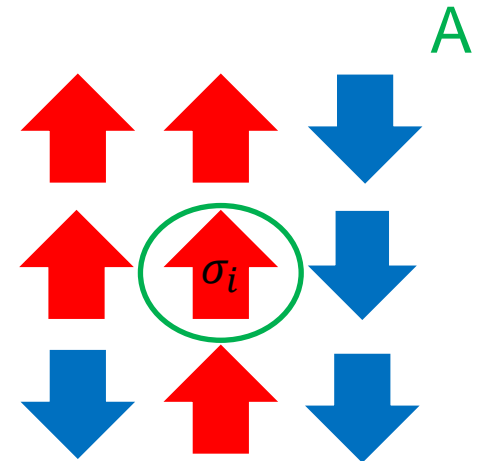
- L'algoritmo Metropolis soddisfa il bilancio dettagliato

ALGORITMO METROPOLIS

1. Propongo di girare uno spin
2. Calcolo $\Delta E = E(B) - E(A)$
 - Se $\Delta E \leq 0$ accetto la mossa
 - Se $\Delta E > 0$ accetto con probabilità

$$P(\sigma_i \rightarrow -\sigma_i) = e^{-\beta \Delta E}$$

3. Ad ogni iterazione ripeto per ogni $\sigma_i \in \text{reticolo}$ in **ordine casuale**



MISURE IN UNA SIMULAZIONE MONTECARLO

- Cosa voglio misurare?

- Magnetizzazione: $\langle M \rangle_{\Pi}$

- Misura:

$$\bar{X} = \sum_{i=1}^N \frac{X_i}{N} \quad N = n^{\circ} \text{ di iterazioni}$$

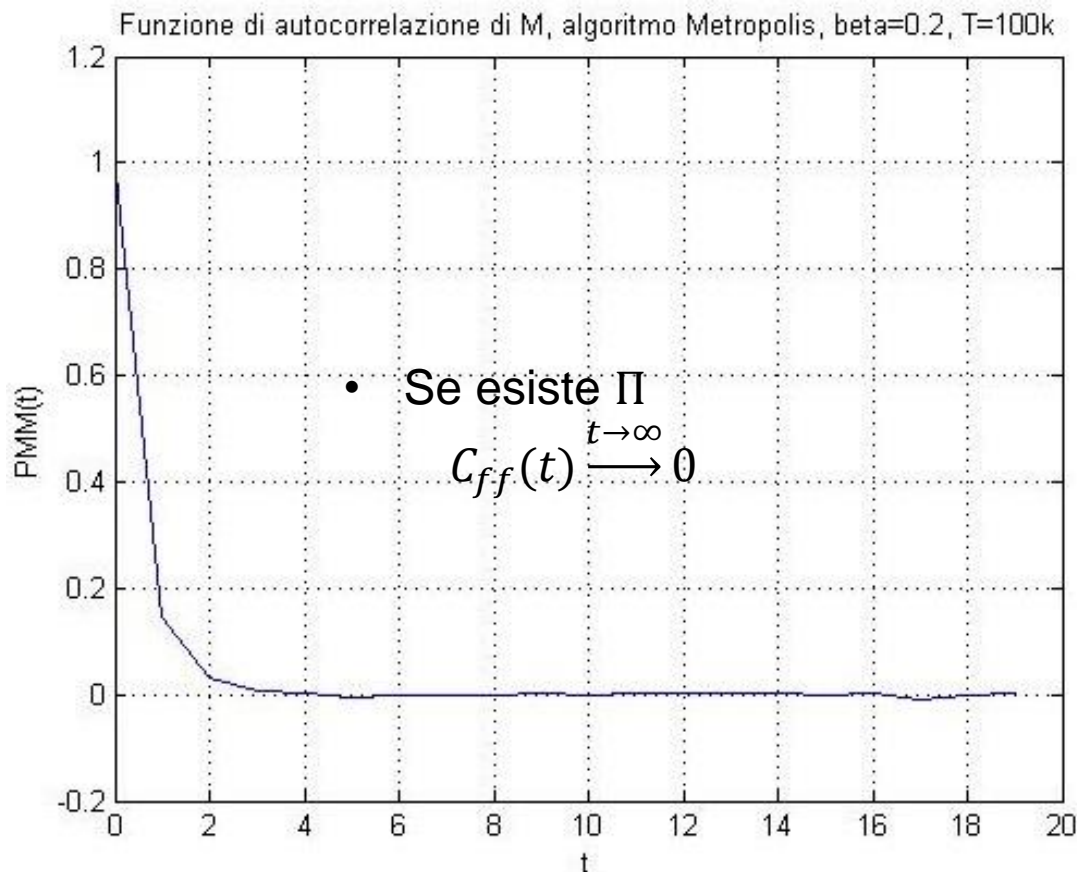
- Errore:

$$\Delta X = \frac{\text{Std}(X)}{\sqrt{\frac{N}{2\tau_{int,X}}}} \quad \leftarrow \text{dalla varianza di } \bar{X}$$

FUNZIONE DI AUTOCORRELAZIONE

- Per calcolare $\tau_{int,X}$ devo valutare la funzione di autocorrelazione, che è definita in questo modo:

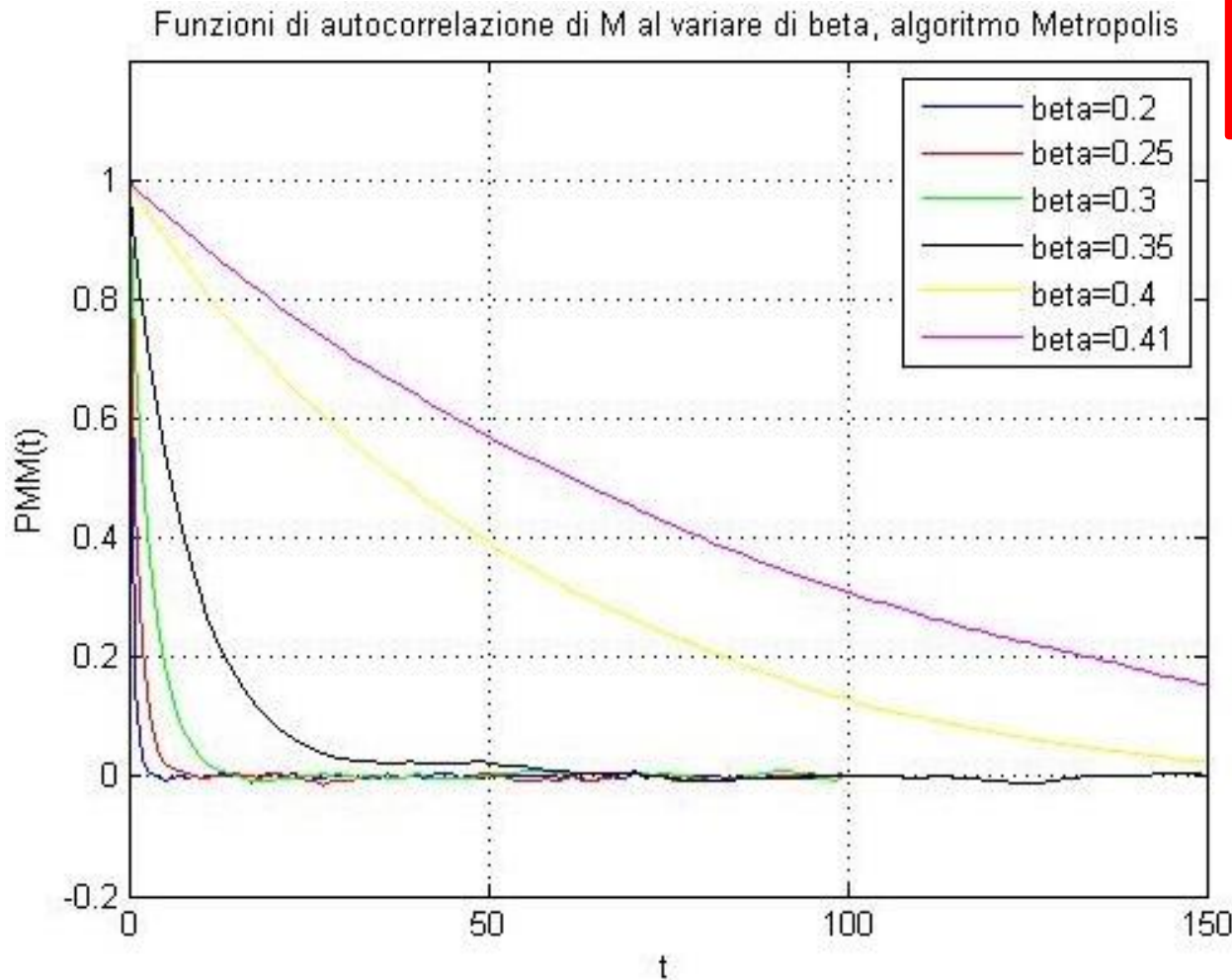
$$C_{ff}(t) \equiv \langle f_s f_{s+t} \rangle_{\Pi} - \langle f_s \rangle_{\Pi} \langle f_{s+t} \rangle_{\Pi}$$



- $\tau_{int,M} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \rho_{ff}(t)$
- $\rho_{ff}(t) = \frac{C_{ff}(t)}{C_{ff}(0)}$
- $N_{eff} = \frac{N}{2\tau_{int,M}}$

RALLENTAMENTO CRITICO

- Cosa succede se abbasso la temperatura?



$$\tau_{int,M} \xrightarrow{\beta \rightarrow \beta_{crit}} \infty$$

- Questo avviene in prossimità di una transizione di fase del II ordine

TRANSIZIONE DI FASE

La transizione di fase esiste nelle ipotesi in cui:

1. $h = 0$

2. Volume infinito del sistema

- $m(h)$: parametro d'ordine del sistema

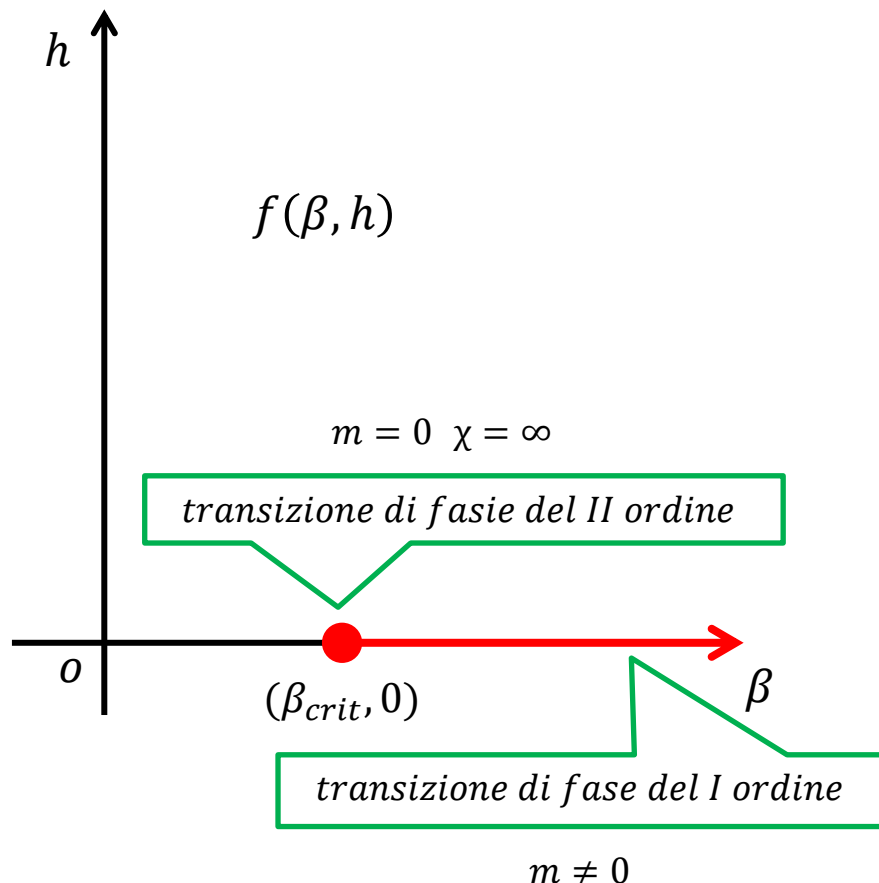
- $f = \frac{F}{V} = -\frac{1}{\beta V} \ln(Z)$

- $m = -\frac{\partial f}{\partial h}$

- $\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = -\frac{\partial^2}{\partial h^2} f$

- $\chi = \frac{\beta}{V} \sum_{ij} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c$

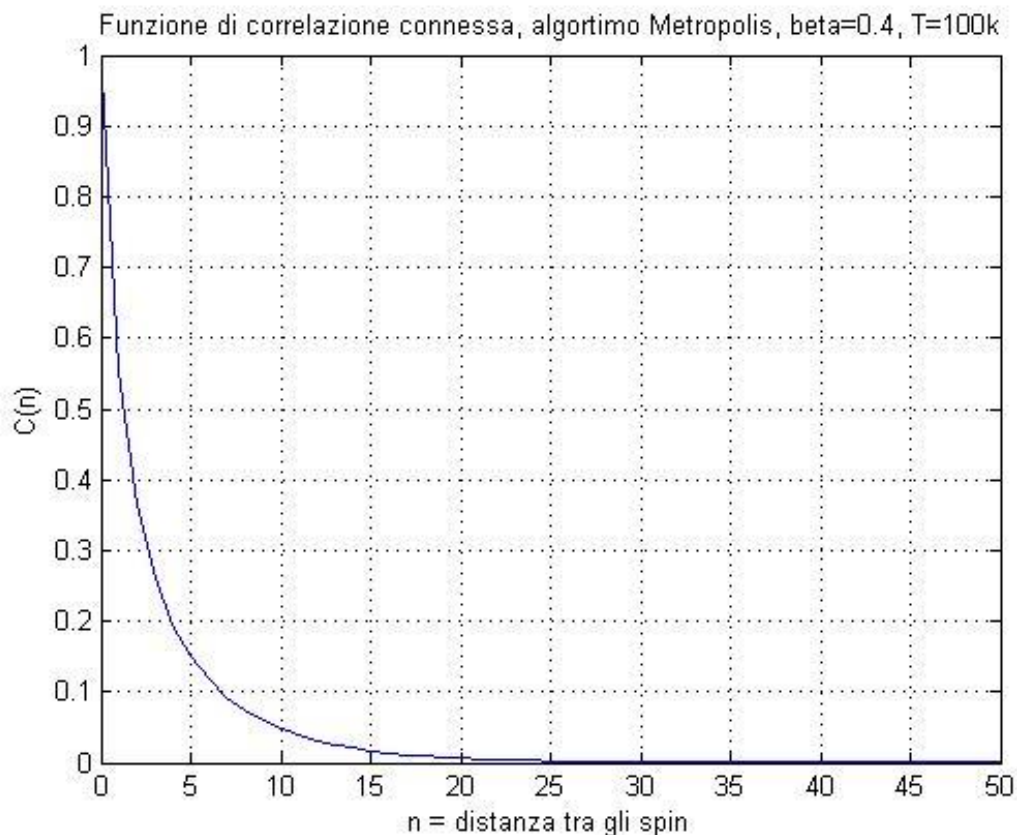
- $\lim_{\beta \rightarrow \beta_{crit}} \chi = \infty$



FUNZIONE DI CORRELAZIONE CONNESSA

- La suscettività dipende dalla funzione di correlazione connessa:

$$C(n) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2 \quad n = |i - j|$$



- Lontano da β_{crit} :

$$C(n) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c \sim e^{\frac{-|n|}{\xi}}$$

- In prossimità di β_{crit} :

$$C(n) \sim n^{-\alpha} e^{\frac{-|n|}{\xi}}$$

- In $\beta = \beta_{crit}$:

$$C(n) \sim n^{-\alpha}$$

ξ lunghezza di correlazione

ISOLE DI SPIN E RALLENTAMENTO CRITICO

- Il parametro ξ mi da una stima dell'ordine di grandezza delle isole di spin correlati.
- Per $\chi \rightarrow \infty$ è associata una $\xi \rightarrow \infty$; questo significa grandi isole in prossimità della temperatura critica.
- Per algoritmi a mosse locali come il Metropolis

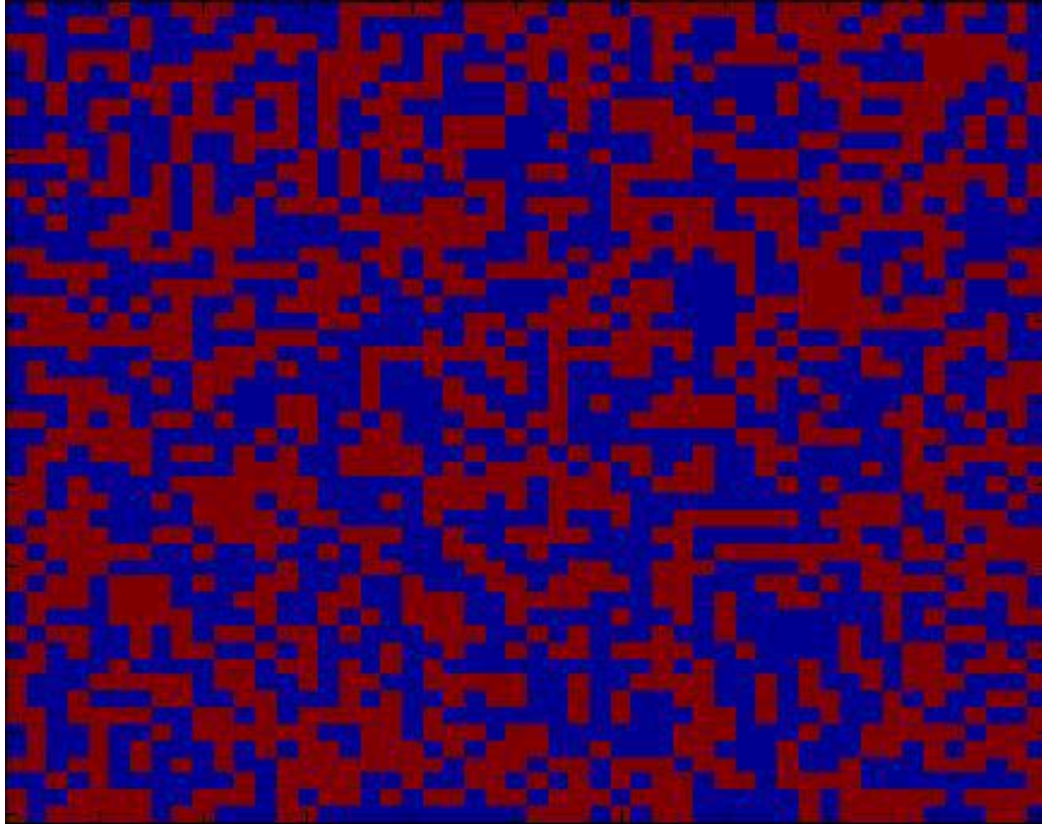
$$\tau_{int,f} = \min(L, \xi)^z$$

$$\xi(\beta) \xrightarrow{\beta \rightarrow \beta_{crit}} \infty$$

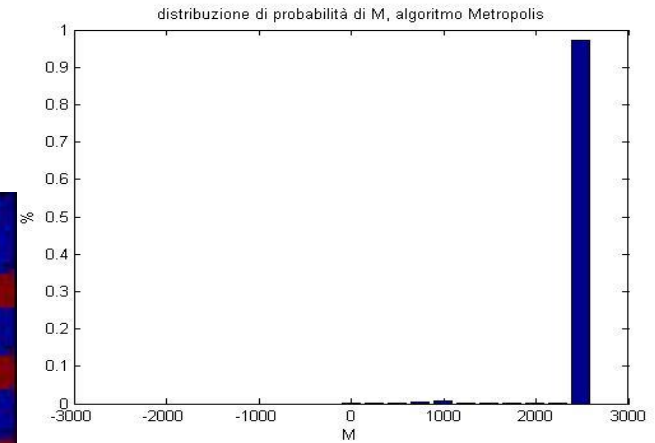
*L = taglia reticolo
z \cong 2 per algoritmi a
mosse locali*

$$\lim_{\beta \rightarrow \beta_{crit}} \chi = \infty$$

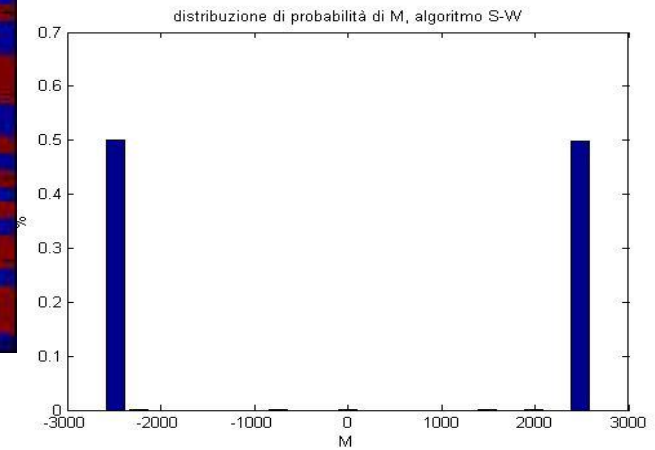
RALLENTAMENTO CRITICO



$$\beta = 0.6$$
$$L = 50$$
$$T = 100$$



Come è

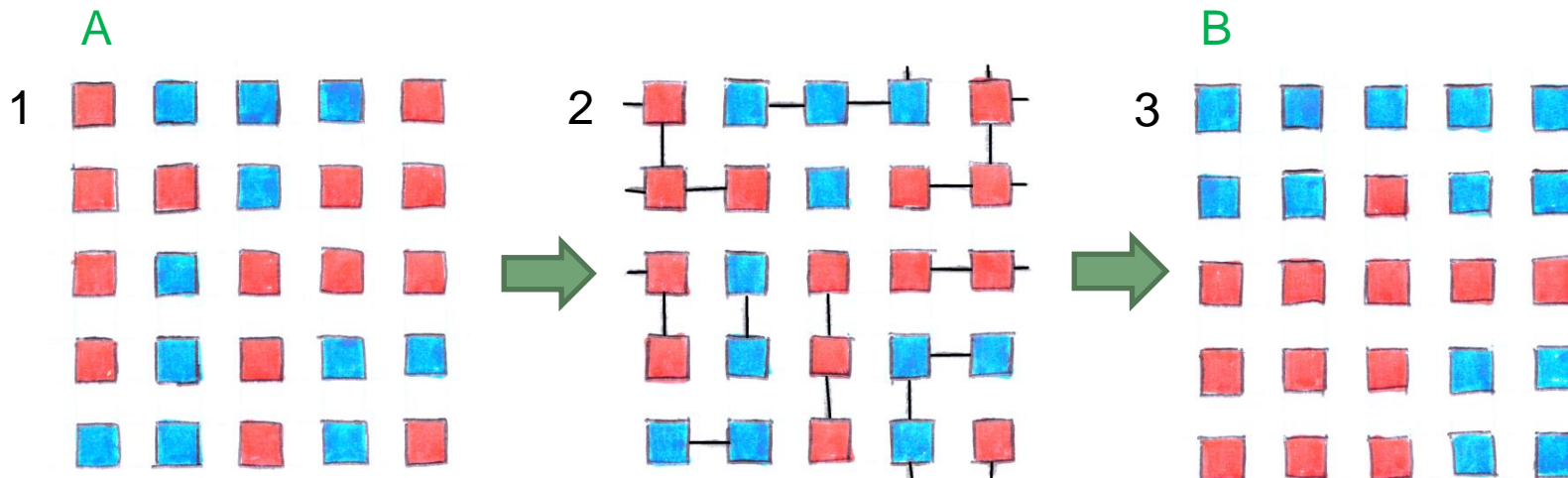


Come dovrebbe essere

ALGORITMO DI SWENDSEN E WANG

- In prossimità della zona critica conviene usare un algoritmo a mosse globali come l'algoritmo S-W:

1. Configurazione A
2. Getto legami con probabilità:
 - $P_{ij} = 0$ se $\sigma_i \neq \sigma_j$
 - $P_{ij} = 1 - e^{-\beta}$ se $\sigma_i = \sigma_j$
3. Sono individuati dei *cluster*
4. Rovescio ogni cluster di legami con probabilità $\frac{1}{2}$



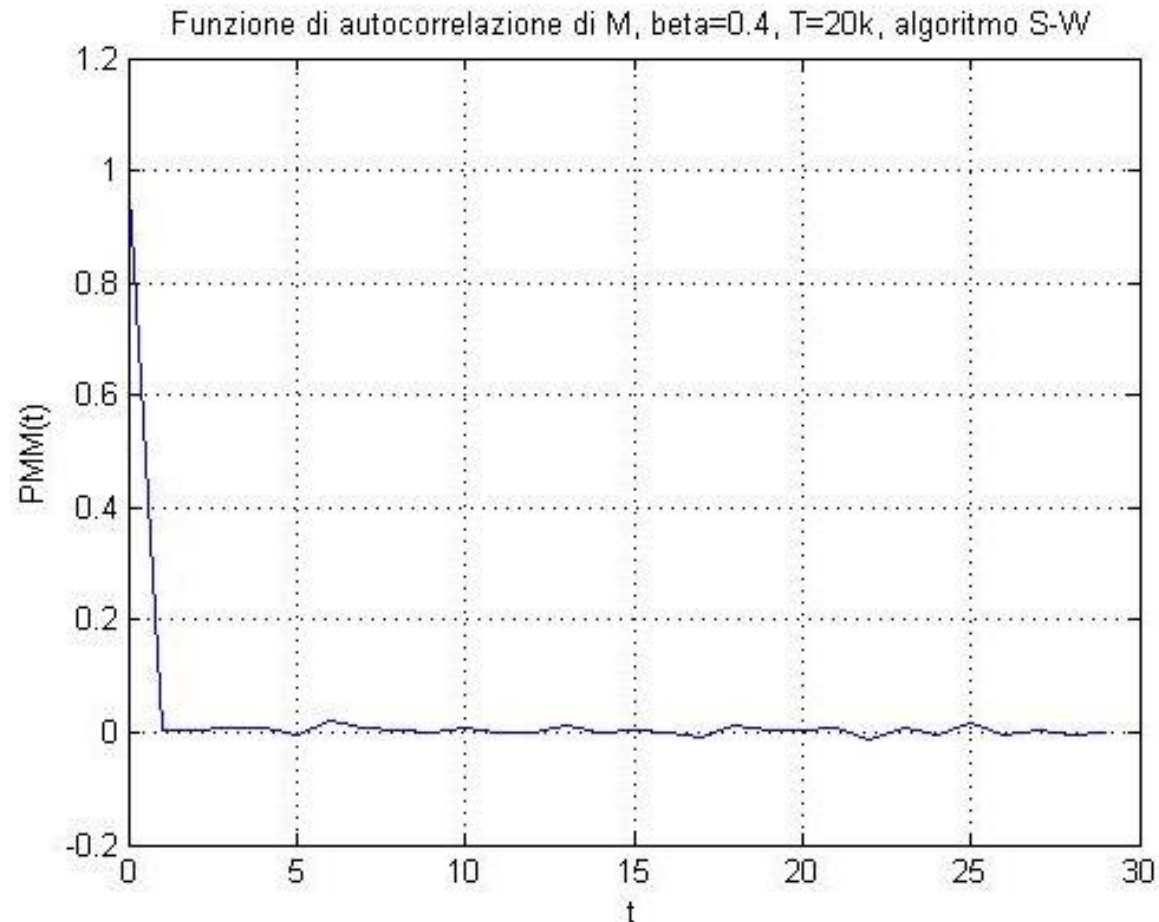
ALGORITMO DI SWENDSEN E WANG

- Algoritmo a mosse globali, più efficace nella zona critica

- $\tau_{int,M} \cong \frac{1}{2} \rightarrow N_{eff} \cong N$

$$\tau_{int,M} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \rho_{ff}(t)$$

$$N_{eff} = \frac{N}{2\tau_{int,M}}$$

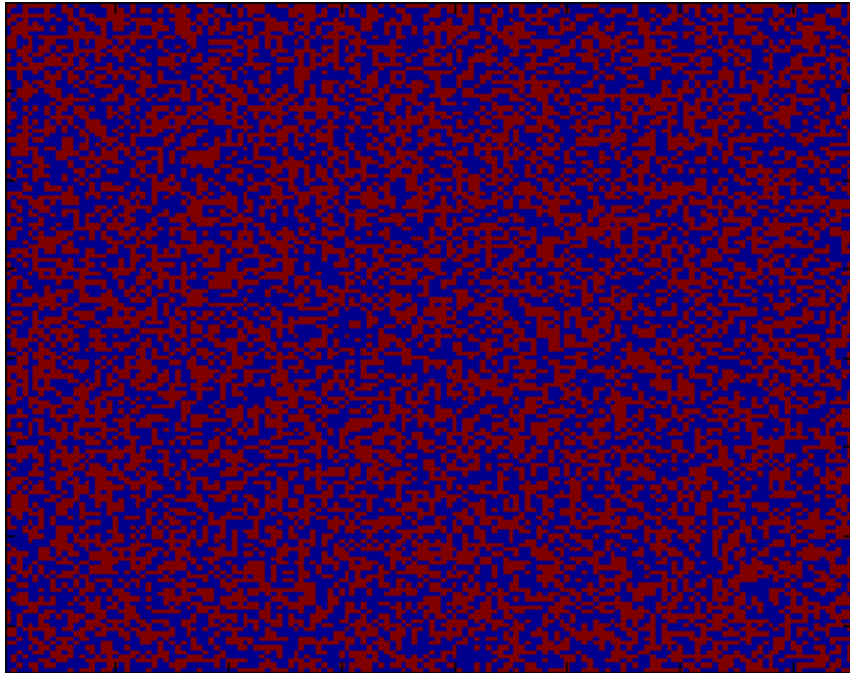


ALGORITMI A CONFRONTO

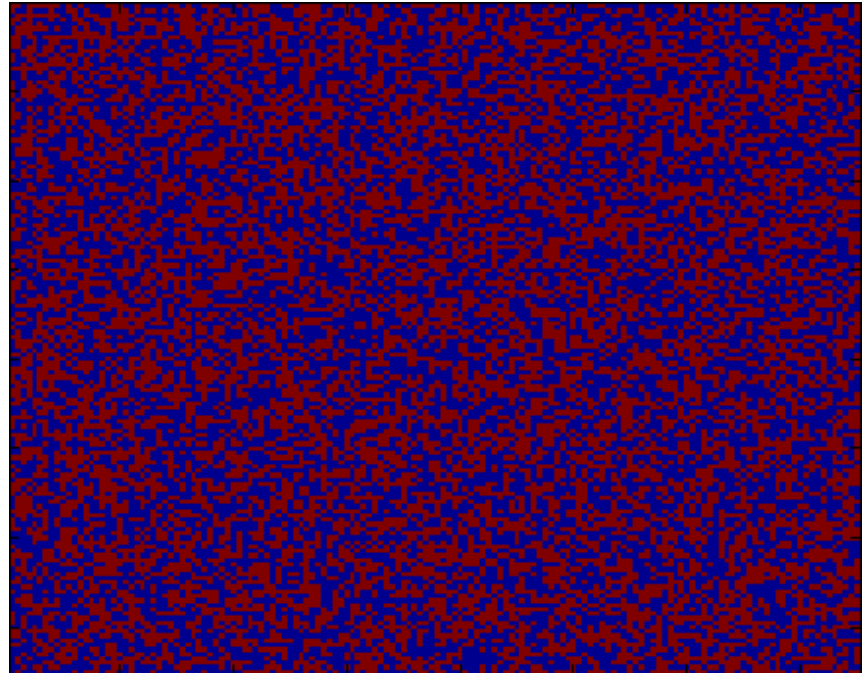
$$\beta = 0.42$$

$$L = 200$$

$$T = 250$$



Metropolis

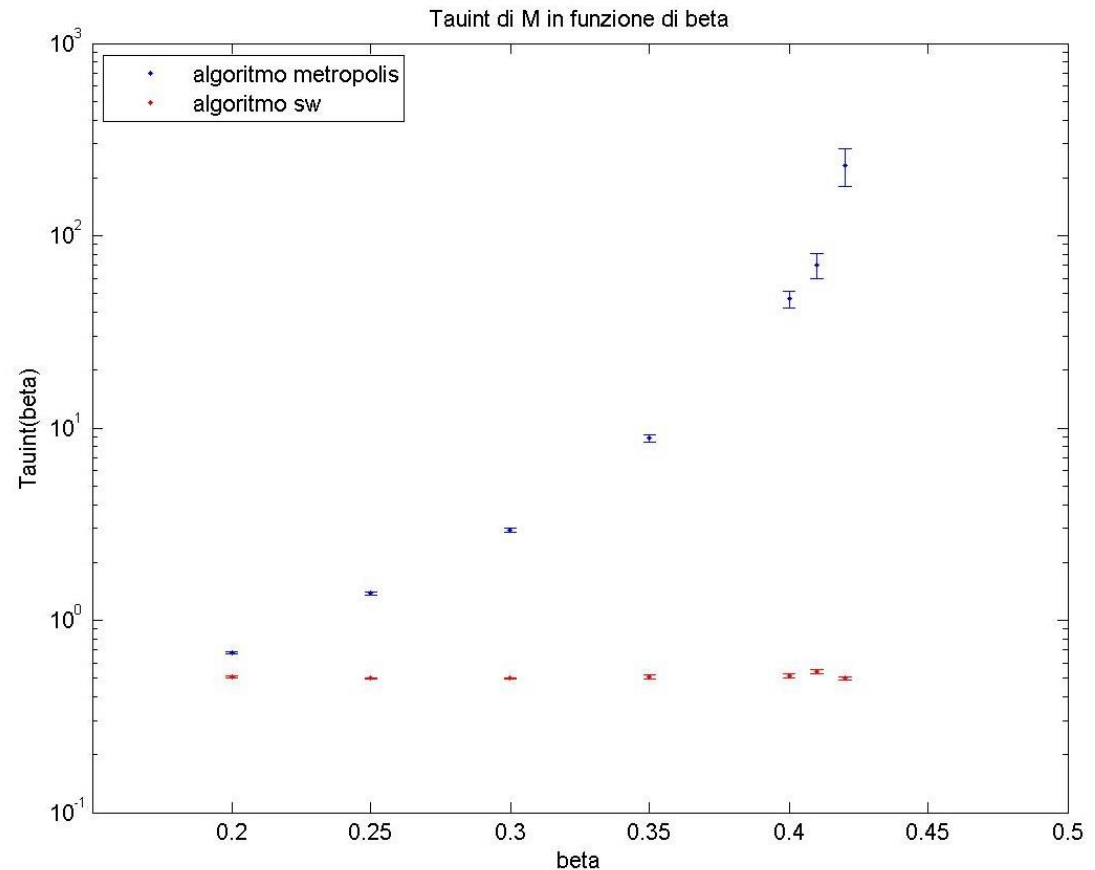


Swendsen-Wang

ALGORITMI A CONFRONTO

$$N_{eff} = \frac{N}{2\tau_{int,M}}$$

Dati raccolti



metro					
beta	L	N	tc (sec)	tauint_M	k'
0,2	50	100k	216	0,67(1)	3,59(7)
0,25	50	100k	209	1,37(3)	1,82(5)
0,3	50	100k	211	2,94(9)	0,84(3)
0,35	100	100k	784	8,8(4)	0,303(16)
0,4	100	100k	956	47(5)	0,047(5)
0,41	150	50k	1033	70(11)	0,033(5)

sw					
beta	L	N	tc	tauint_M	k'
0,2	50	100k	1034	0,507(6)	1,000(16)
0,25	50	100k	1103	0,498(3)	0,954(11)
0,3	50	100k	1018	0,498(3)	1,033(12)
0,35	100	20k	816	0,50(1)	1,01(3)
0,4	100	20k	809	0,51(1)	1,01(3)
0,41	150	15k	1398	0,540(15)	0,94(3)
0,42	200	10k	1704	0,50(1)	0,99(3)

PARAMETRO DI MERITO

- Definisco un parametro di merito K :

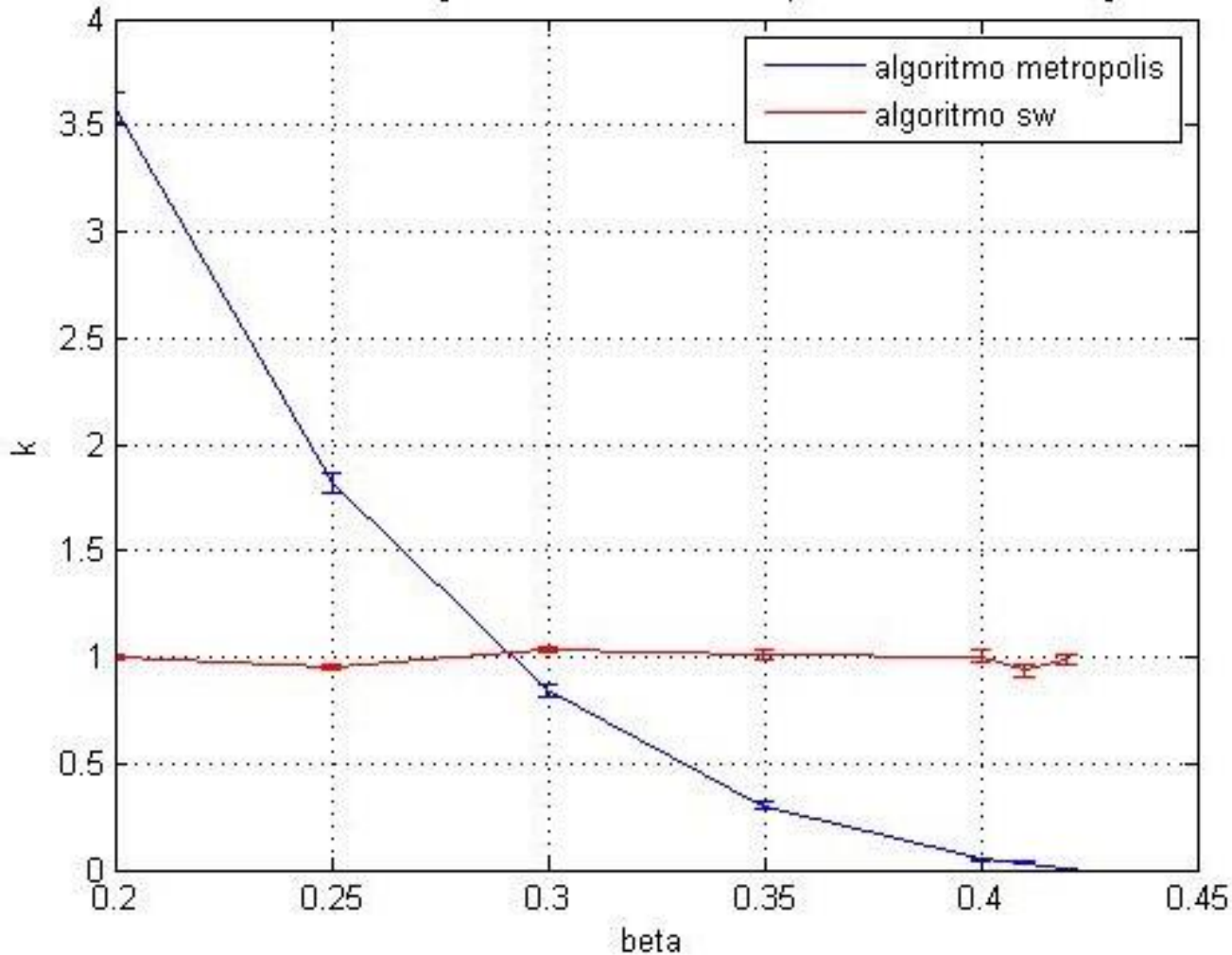
$$K = \frac{NL^2}{2t_c\tau_{int,X}}$$

- Il parametro è inteso come il rapporto delle seguenti grandezze:

$$\frac{N_{eff}}{N} = \frac{1}{2\tau_{int,X}} \quad \text{e} \quad t_{cn} = \frac{t_c}{NL^2}$$

ALGORITMI A CONFRONTO

confronto efficienza dei due algoritmi al variare di beta per il calcolo della magnetizzazione



$$K = \frac{NL^2}{2t_c\tau_{int,X}}$$

I grafici sono rinormalizzati rispetto al primo termine S-W

CONCLUSIONI

- La fisica del sistema che voglio simulare influenza pesantemente l'efficienza degli algoritmi.
- In prossimità di transizione di fase del *II* ordine, algoritmi a mosse globali sono da preferirsi.
- Un algoritmo che fallisce in certe regioni può essere assolutamente competitivo in altre.