

# Studio numerico del Modello di Ising in 2D

Marco Parrinello, Niccolò Tiezzi

## 1 Introduzione del progetto

In questo lavoro si vuole analizzare numericamente il cosiddetto modello di Ising in due dimensioni, in particolare studiarne la temperatura critica (i.e. a cui avviene la transizione di fase ferromagnetica) e gli altri vari esponenti critici attorno al punto di transizione.

## 2 Descrizione del modello

Il modello di Ising è descritto dalla seguente hamiltoniana

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

avendo indicato con  $\langle i,j \rangle$  le coppie  $i,j$  di primi vicini (ad esempio in una dimensione si avrebbe  $i, i+1$ ). Si sa che questo sistema presenta una transizione di fase del second'ordine a una temperatura critica pari a

$$\beta_c \approx 0.4407 \quad (2)$$

Quindi per  $T < T_c = 1/\beta_c$  la magnetizzazione media è non nulla. Vicino a  $\beta_c$  la lunghezza di correlazione diverge e il sistema quindi assume un comportamento critico. In particolare, indicando con  $t = (T - T_c)/T_c$  la temperatura ridotta, abbiamo le seguenti definizioni per gli esponenti critici:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (3)$$

$$\langle |M| \rangle \sim |t|^\beta, \quad T < T_c \quad (4)$$

$$\chi = \frac{\partial \langle |M| \rangle}{\partial h} \propto V(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \sim |t|^{-\gamma} \quad (5)$$

$$C = \frac{\partial \langle \varepsilon \rangle}{\partial T} \propto V(\langle \varepsilon^2 \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2) \sim |t|^{-\alpha} \quad (6)$$

essendo  $\xi$  la lunghezza di correlazione,  $M$  la densità di magnetizzazione,  $\chi$  la suscettività magnetica e  $C$  il calore specifico. I valori teorici sono i seguenti:

$$\nu = 1, \quad \beta = \frac{1}{8}, \quad \gamma = \frac{7}{4}, \quad \alpha = 0 \quad (7)$$

Un'altra quantità utile da analizzare è il *cumulante di Binder* dato da

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \quad (8)$$

che per  $T < T_c$  tende a  $2/3$  mentre per  $T > T_c$  tende a 0. Inoltre al variare di  $L$  i grafici dei cumulanti si intersecano proprio in  $T = T_c$ .

### 3 Finite size scaling

Nel caso di reticolo finito ovviamente la lunghezza di correlazione non può divergere, tuttavia possiamo dire che la lunghezza di correlazione sarà grande più o meno quanto la lunghezza del reticolo, pertanto possiamo dire che  $\xi \approx L$  al punto critico. Inoltre, assumendo che il sistema perda memoria della sua struttura microscopica, si trova che le funzioni termodinamiche possono dipendere solo da  $L/\xi$ , quindi ad esempio per la suscettività abbiamo:

$$\chi(\beta, L) = L^{\gamma/\nu} \phi(L/\xi) = L^{\gamma/\nu} \phi'(tL^{1/\nu}) = L^{\gamma/\nu} \Phi((\beta - \beta_c)L^{1/\nu}) \quad (9)$$

e analogamente per le altre quantità. Quindi abbiamo che

$$\frac{\chi(x)}{L^{\gamma/\nu}} = \Phi(x), \quad x = (\beta - \beta_c)L^{1/\nu} \quad (10)$$

Pertanto plottando  $\frac{\chi}{L^{\gamma/\nu}}$  in funzione di  $x$  dovremmo ottenere le stesse curve.

### 4 Simulazione numerica delle osservabili

Per la simulazione numerica è stato usato un algoritmo metropolis che ha preso le misure delle osservabili  $\langle m \rangle, \langle m^2 \rangle, \langle m^4 \rangle, \langle \varepsilon \rangle, \langle \varepsilon^2 \rangle$  100000 volte con passo di decorrelazione pari a 100. La simulazione è stata fatta per i valori  $L = 20, 30, 40, 50$ . Inoltre gli errori sono stati stimati con un bootstrap facendo 100 ricampionamenti di blocchi di lunghezza  $10^k$  con  $k = 1, 2, 3$  e prendendo il valore asintotico (questo per tenere in conto le autocorrelazioni). Per le simulazioni numeriche è stata scelta come condizione iniziale quella in cui tutti gli spin sono orientati casualmente. Non sono poi stati tolti punti di termalizzazione in quanto erano sicuramente trascurabili, come si può notare nella figura 1

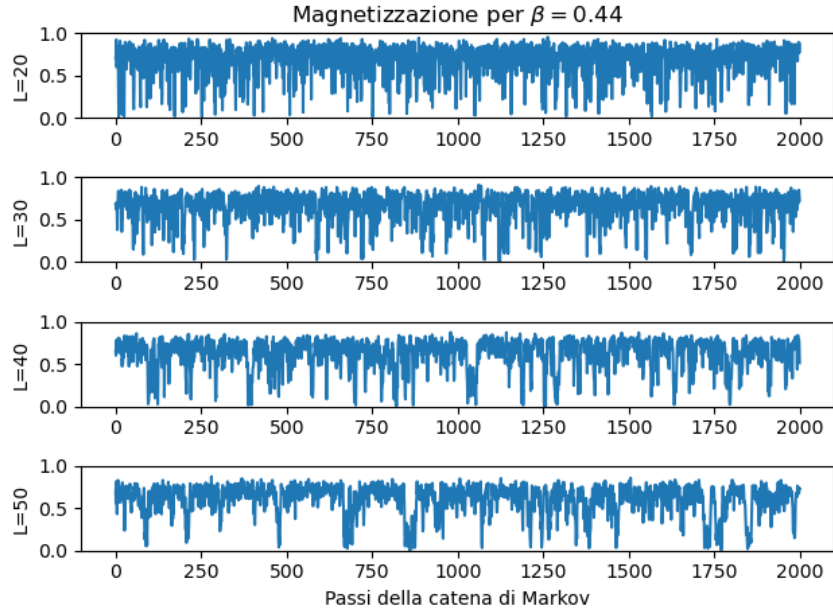


Figura 1: Plot di  $M$  per diversi valori di  $L$

Inoltre riportiamo di seguito i grafici della magnetizzazione, suscettibilità magnetica e capacità termica.

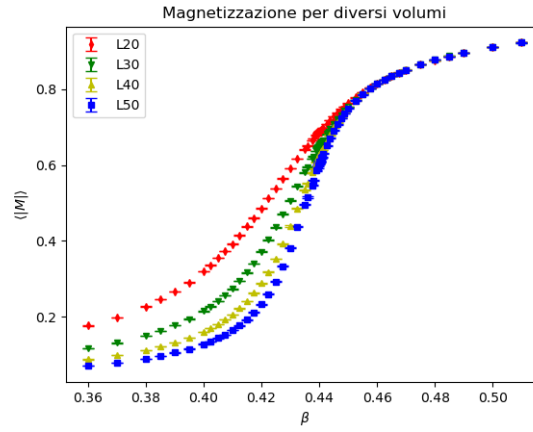


Figura 2: Grafico del valor medio della magnetizzazione in funzione della temperatura

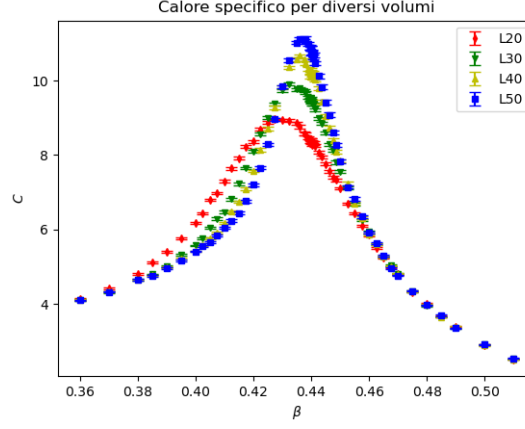


Figura 3: Grafico del calore specifico in funzione della temperatura

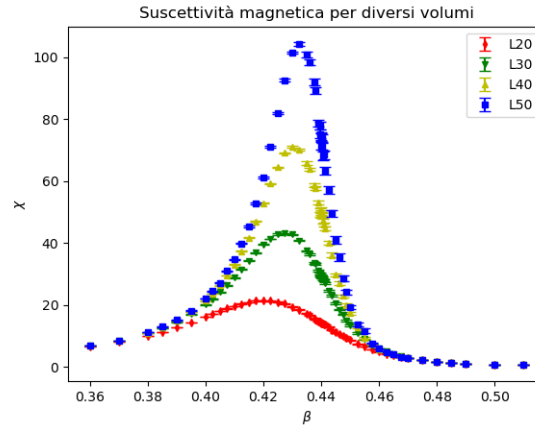


Figura 4: Grafico del valore della suscettività magnetica in funzione della temperatura

## 5 Stima degli indici critici

### 5.1 Stima di $\beta_c$ e $\nu$

Per stimare  $\beta_c$  e  $\nu$  abbiamo voluto fare un fit dalla seguente espressione:

$$x_{\max} = (\beta_{pc} - \beta_c)L^{1/\nu} \quad (11)$$

essendo  $x_{\max}$  il punto di massimo della funzione di scaling  $\Phi(x)$  definita in equazione (10). Per trovare questo massimo abbiamo cercato i parametri  $\beta_c, \nu, \gamma/\nu$

che fanno collassare le diverse curve  $\chi(\beta, L)$  sulla stessa  $\Phi(x)$ . La stima di  $\gamma/\nu$  è stata fatta assumendo che i massimi di  $\chi(\beta, L)$  abbiano un andamento del tipo  $\chi_{\max} \propto L^{\gamma/\nu}$

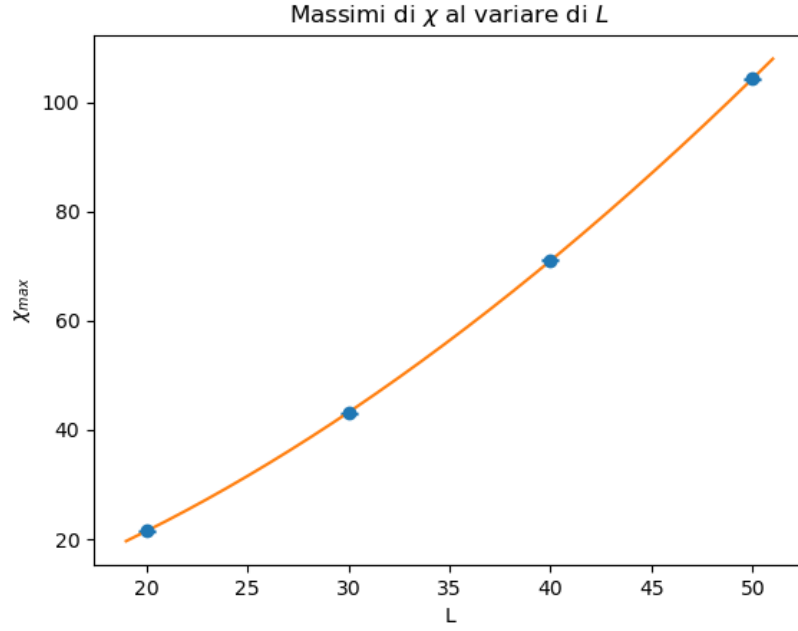


Figura 5: Plot di  $\chi_{\max}$  in funzione di  $L$

Il plot dà un valore di

$$\gamma/\nu = 1.725 \pm 0.002 \quad (12)$$

A questo punto possiamo ricavare le funzioni  $\chi(\beta, L)/L^{\gamma/\nu}$  e dobbiamo trovare i parametri  $\beta_c, \nu$  che causano il collasso. Usando come parametri

$$\beta_c = 0.44, \quad \nu = 1, \quad \gamma/\nu = 1.725 \quad (13)$$

notiamo che i grafici collassano.

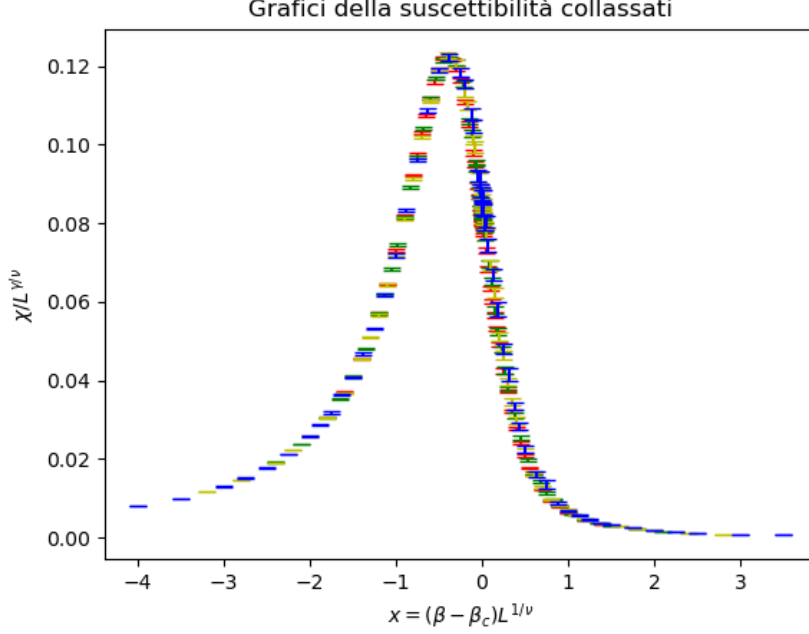


Figura 6: Grafici della suscettibilità per mostrare il collasso. I valori di  $\beta_c, \nu$  e  $\gamma/\nu$  sono rispettivamente 0.44, 1 e 1.725

Pertanto per avere una stima più precisa dei parametri del collasso abbiamo fatto una interpolazione lineare dei punti, ottenendo così delle funzioni

$$f_L(x = (\beta - \beta_c)L^{1/\nu}) \quad (14)$$

Definendo la funzione  $W(\beta_c, \nu)$  come segue:

$$W(\beta_c, \nu) = \sum_{L \neq L'} \langle f_L(x(L, \beta, \beta_c, \nu)), f_{L'}(x(L', \beta, \beta_c, \nu)) \rangle \quad (15)$$

Dove il prodotto scalare tra le due funzioni è dato da

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_{-1.5}^{0.5} [f(x) - g(x)]^2 dx \quad (16)$$

In questo modo i parametri  $\beta_c, \nu$  che minimizzano la funzione  $W(\beta_c, \nu)$  sono quelli per cui i punti si appiattiscono sulla stessa funzione, che sarà nient'altro che la  $\Phi(x)$  definita in (10). Si trovano come parametri che minimizzano la funzione  $W(\beta_c, \nu)$  nell'intervallo  $\beta_c \in (0.42, 0.46)$  e  $\nu \in (0.9, 1.1)$  sono i seguenti

$$\beta_c = 0.44075034 \quad (17)$$

$$\nu = 1.0000085 \quad (18)$$

In questo modo, oltre ad avere una stima dei parametri  $\beta_c, \nu$ , possiamo trovare il valore di  $x$  che massimizza  $\Phi(x)$ , che definiamo come:

$$x_{\max} = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 x_{\max}(L_i) \quad (19)$$

essendo  $x_{\max}(L) = (\beta_{pc}(L) - \beta_c)L^{1/\nu}$ . In questo modo otteniamo

$$x_{\max} = -0.412 \quad (20)$$

Adesso possiamo fare un fit della funzione che dà  $\beta_{pc}$  in funzione di  $L$ :

$$\beta_{pc}(L) = \beta_c + x_{\max}L^{-1/\nu} \quad (21)$$

ottenendo come valori di  $\beta_c, \nu$ :

$$\beta_c = 0.4407 \pm 0.0001 \quad (22)$$

$$\nu = 1.000 \pm 0.003 \quad (23)$$

che risultano entrambi compatibili con i valori teorici

$$\beta_c^{(\text{teorico})} = 0.44068..., \quad \nu^{(\text{teorico})} = 1 \quad (24)$$

Il fit è riportato nella seguente figura

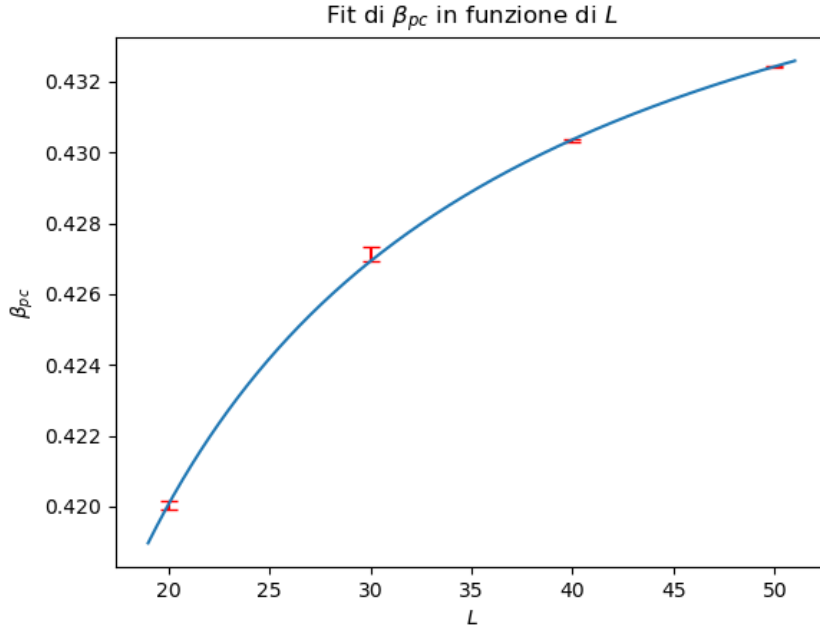


Figura 7: Grafico di  $\beta_{pc}$  in funzione di  $L$

Il  $\chi^2_{\text{rid}}$  è pari a 0.63.

## 5.2 Stima di $\gamma$

Sapendo che nel punto critico vale la relazione

$$\chi(\beta_c) \propto L^{\gamma/\nu} \quad (25)$$

Facendo un fit otteniamo il valore

$$\gamma/\nu = 1.743 \pm 0.005 \quad (26)$$

con  $\chi^2_{\text{rid}} = 0.06$

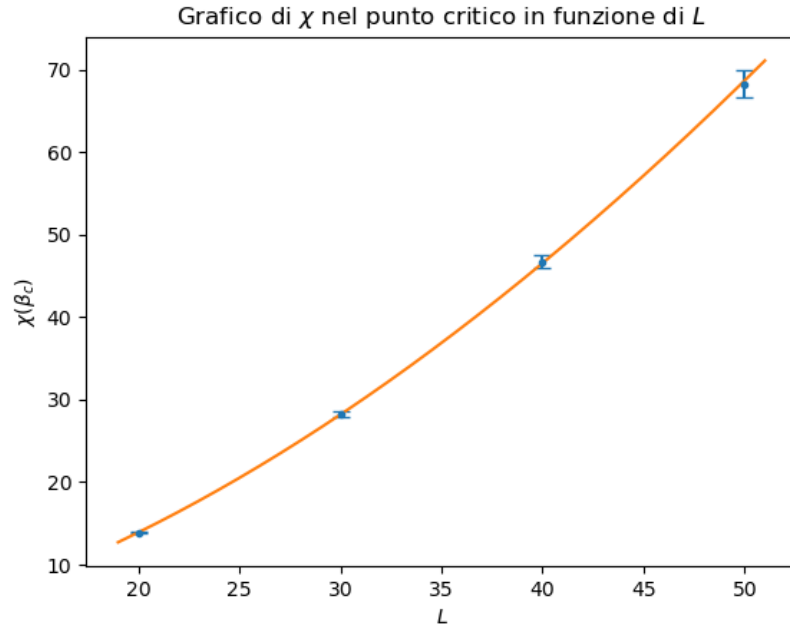


Figura 8: Grafico della suscettività al punto critico per diversi size del reticolo

Usando il valore di  $\nu$  ottenuto in (23) otteniamo per  $\gamma$  il valore

$$\gamma = 1.74 \pm 0.01 \quad (27)$$

## 5.3 Stima di $\beta$

L'esponente critico per la magnetizzazione si può trovare nello stesso modo, usando quindi il fatto che alla temperatura critica

$$M_c \propto L^{\beta/\nu} \quad (28)$$



Facendo un fit si trova

$$\beta/\nu = 0.1232 \pm 0.0009 \quad (29)$$

con  $\chi^2_{\text{rid}} = 0.11$ . Il grafico è il seguente

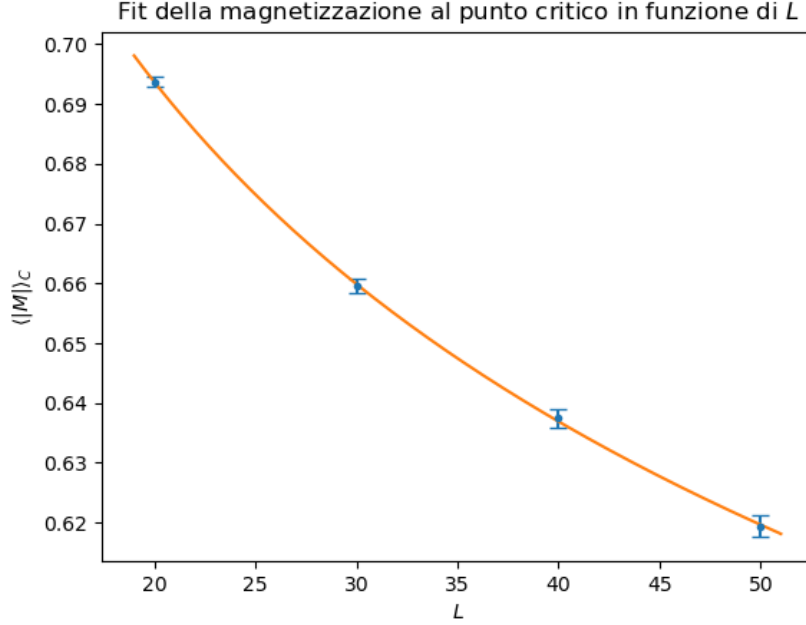


Figura 9: Grafico della magnetizzazione al punto critico in funzione del size del reticolo

#### 5.4 Stima di $\alpha$

Si può mostrare che, in due dimensioni, l'andamento del calore specifico vicino alla temperatura critica ha un andamento logaritmico, essendo l'esponente critico  $\alpha = 0$ . Pertanto verifichiamo che l'andamento del calore specifico sia del tipo

$$C = a + b \log(L) \quad (30)$$

E si ottengono i valori

$$a = 0.54 \pm 0.25, \quad b = 2.59 \pm 0.07 \quad (31)$$

con un  $\chi^2_{\text{rid}} = 0.74$ . Si ottiene il seguente plot

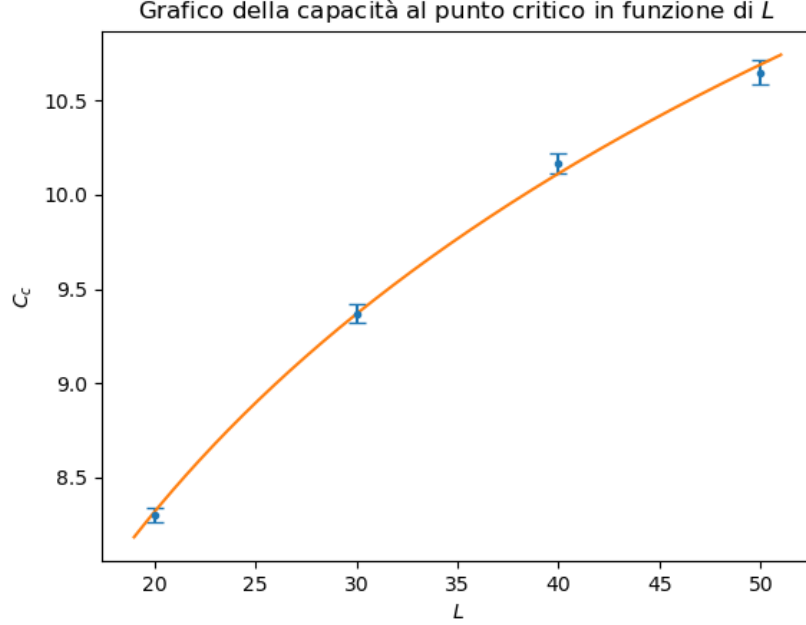


Figura 10: Grafico del calore specifico al punto critico

## 5.5 Critical slowing down

Ci si aspetta che l'algoritmo, attorno alla transizione di fase, faccia più fatica a decorrelare le misure, in quanto si creano domini di spin sempre più grandi. Pertanto ci aspettiamo il seguente andamento per il tempo di autocorrelazione

$$\tau \propto L^z \quad (32)$$

Essendo  $\tau$  definito come

$$\tau = \sum_{k=0}^{\infty} C_M(k) \quad (33)$$

essendo  $C_M(k)$  dato da

$$C_M(k) = \frac{1}{N-k} \sum_{i=1}^{N-k} (M_i - \langle M \rangle)(M_{i+k} - \langle M \rangle) \quad (34)$$

L'andamento della correlazione a diversi  $\beta$  è mostrato nel seguente grafico

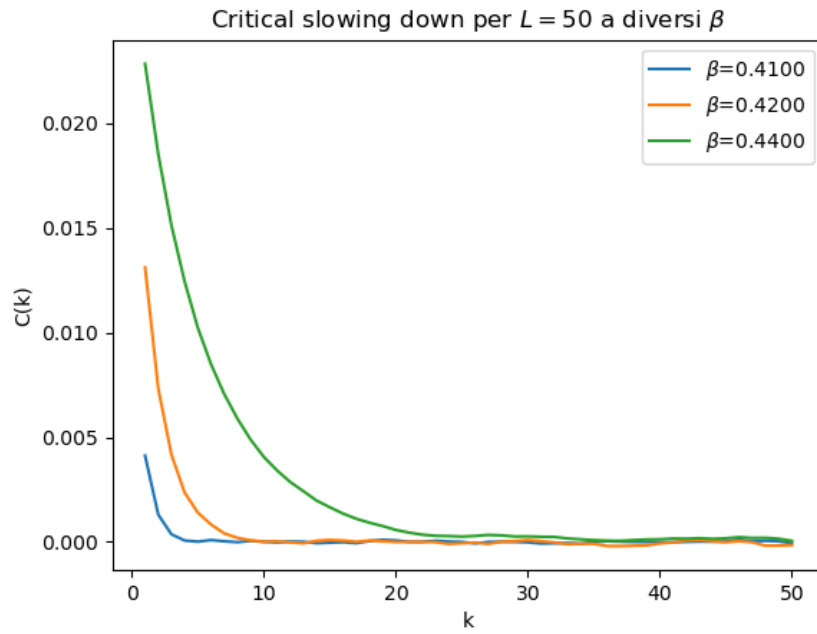


Figura 11: Grafico della correlazione a diversi  $\beta$  per  $L = 50$

Considerando il caso  $\beta = 0.44$  otteniamo il seguente fit

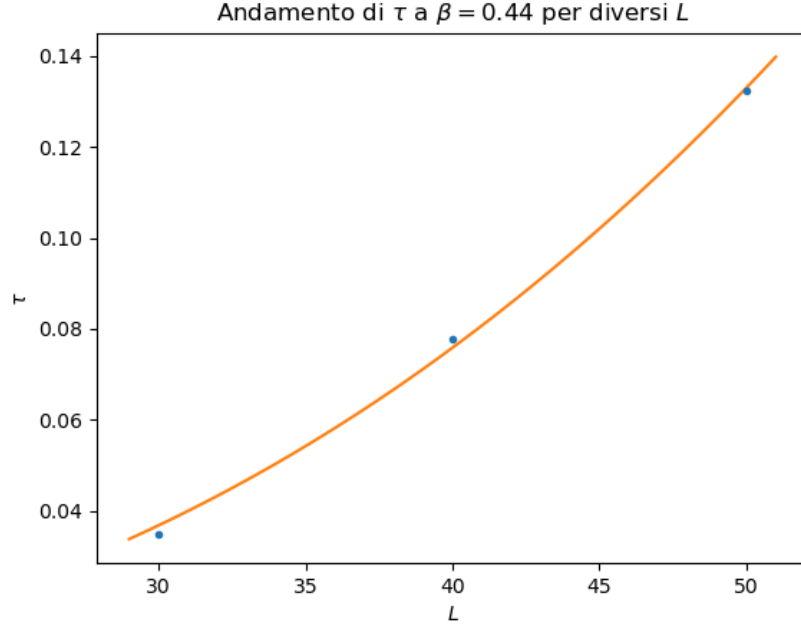


Figura 12: Grafico del tempo di autocorrelazione per diversi  $L$

E si ottiene per  $z$  il seguente valore

$$z = 2.52 \pm 0.13 \quad (35)$$

## 5.6 Conclusioni

La simulazione numerica del modello di Ising tramite algoritmo Metropolis ha mostrato i comportamenti attesi dallo studio teorico del modello stesso. In particolare si sono ottenuti i corretti esponenti e parametri critici, nonché si è verificata l'ipotesi di invarianza di scala. Alcuni valori bassi del  $\chi^2$  potrebbero essere attribuiti ad overfitting, avendo più volte fittato funzioni a due parametri con 4 punti.