



UNIVERSITÀ
DI PAVIA

Simulazione numerica del modello di Ising 2D.

Esame metodi statistici per la fisica.

Giuseppe Francesco Conte

January 26, 2025



UNIVERSITÀ
DI PAVIA

Indice

1 Introduzione

► Introduzione

► Implementazione

► Risultati



Introduzione

1 Introduzione

Il modello di Ising spiega la transizione di fase da ferromagnetico a paramagnetico oltre a una certa temperatura critica.

Consideriamo il caso di un reticolo bidimensionale di spin $\sigma = \pm 1$ descritto da un'Hamiltoniana della seguente forma:

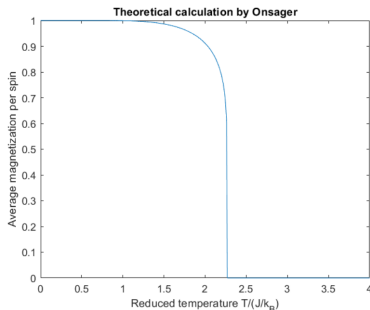
$$H = -J \underbrace{\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j}_A - h \underbrace{\sum_{i=1}^N \sigma_i}_B \quad (1)$$

A termine di interazione tra spin vicini con costante di accoppiamento J ;

B termine di interazione con un campo esterno h .



- settiamo $h = 0$ $\xrightarrow{\text{soluzione analitica}}$ esiste $T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.269$ tale per cui



$$\begin{cases} m_s \neq 0, & \text{per } T < T_c, \\ m_s = 0, & \text{for } T \geq T_c \end{cases} \quad (2)$$

- l'obiettivo è simulare il modello tramite l'algoritmo di Metropolis per riprodurre la curva teorica.

In meccanica statistica, il calcolo delle medie d'ensemble richiede una somma su tutti i punti dello spazio delle fasi, operazione in pratica impossibile. Utilizziamo quindi l'importance sampling, considerando solo gli stati che contribuiscono maggiormente alla media.

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_s e^{-\beta H(s)} A(s)}{\sum_s e^{-\beta H(s)}} = \frac{1}{M} \sum_s^M A(s) \quad (3)$$

Usiamo un peso Boltzmanniano $p(s) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ per concentrarci sugli stati rilevanti. M è il numero di stati “importanti” su cui effettuiamo la media, riducendo lo spazio delle fasi alla regione significativa.

Come generare la distribuzione per semplificare il calcolo?

- Utilizziamo un processo di Markov, dove uno stato $s + 1$ è costruito da uno stato s tramite una probabilità di transizione $W(s \rightarrow s + 1)$.
- Impostiamo un'equazione di bilancio che garantisca, per ogni coppia di stati s, r :

$$P_{eq}(s)W(s \rightarrow r) = P_{eq}(r)W(r \rightarrow s) \quad (4)$$

- Con una probabilità à-la-Boltzmann otteniamo:

$$\frac{W(s \rightarrow r)}{W(r \rightarrow s)} = e^{-\beta(H(r)-H(s))} \quad (5)$$

che definisce il rate di transizione.

Transizione e Conservazione

1 Introduzione

- Scegliendo:

$$W(s \rightarrow r) = \begin{cases} e^{-\beta(H(r)-H(s))} & \text{se } H(r) - H(s) < 0, \\ 1 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (6)$$

soddisfiamo la condizione (5).

- Questa scelta, pur non essendo unica, è la più efficiente ed evita che il sistema resti confinato in una regione limitata dello spazio delle fasi.
- Inserendo questa definizione nella Master Equation di Markov Conserviamo la probabilità per ogni s, t .
- Possiamo dimostrare che $P(s) \rightarrow P_{eq}(s)$ per $M \rightarrow \infty$ (Teorema Fondamentale delle Catene di Markov).



UNIVERSITÀ
DI PAVIA

Indice

2 Implementazione

► Introduzione

► **Implementazione**

► Risultati



Implementazione

2 Implementazione

In questa sezione mostriamo il codice MATLAB utilizzato per inizializzare il modello.

Procediamo per passi:

- 1 Creiamo una matrice $N \times N$ i cui elementi sono ± 1 , distribuiti casualmente.

% Creazione della matrice casuale

`H = rand(N);` *% Matrice con numeri uniformemente distribuiti in $[0,1]$*

% Assegnazione di +1 o -1 in base al valore

`for i = 1:N`

`for j = 1:N`

`if H(i,j) < 0.5`

`H(i,j) = -1;`

`else`

`H(i,j) = +1;`

`end`

`end`

`end`



Implementazione: Condizioni Periodiche

2 Implementazione

- 2 Fissiamo uno spin i e formalizziamo i concetti di "sopra", "sotto", "destra" e "sinistra", includendo le condizioni di periodicità.

```
% Condizioni periodiche per gli indici i (analogamente per j)  
% Questo codice è all'interno di un doppio ciclo for  
if i == 1  
    left = N;  
    right = i + 1;  
elseif i == N  
    left = i - 1;  
    right = 1;  
else  
    left = i - 1;  
    right = i + 1;  
end
```



Calcolo dell'Energia di Interazione

2 Implementazione

3 Calcoliamo:

- L'energia di interazione tra lo spin i e i suoi vicini.
- La differenza di energia ΔE tra due configurazioni, considerando il flip dello spin i .

% Energia di interazione dello spin i

```
H_interaction = -J * H(i,j) * (H(left,j) + H(right,j) + H(i,up) + H(i,down));
```

% Energia di interazione con lo spin i flippato

```
H_flipp = -H(i,j);
```

```
H_interaction_flipp = -J * H_flipp * (H(left,j) + H(right,j) + H(i,up) + H(i,down));
```

% Variazione di energia dopo il flip

```
deltaE = H_interaction_flipp - H_interaction;
```



Algoritmo di Metropolis

2 Implementazione

4 Implementazione dell'algoritmo di Metropolis:

- Calcolo ΔE tra la configurazione corrente e quella con lo spin flippato.
- Se $\Delta E < 0$, accetto il flip con probabilità 1.
- Se $\Delta E > 0$, accetto il flip con probabilità $e^{-\Delta E/(k_B T)}$.
- Se $\Delta E = 0$, accetto il flip con probabilità 50%.

```
if deltaE < 0
    H(i,j) = H_flipp;
elseif deltaE == 0  % 50% di probabilità di flippare
    if rand < 0.5
        H(i,j) = H_flipp;
    end
else
    % Accetto il flip con probabilità pesata da una distribuzione canonica
    if rand < exp(-deltaE / (kbT))
        H(i,j) = H_flipp;
    end
end
end
```



Sweep e Iterazioni

2 Implementazione

5 Per completare uno **sweep**:

- Seleziono uno spin del reticolo in modo casuale.
- Applico le operazioni descritte nei punti precedenti per ogni elemento della matrice.

```
for n = 1:N^2
    % Selezione casuale di uno spin
    i = randi(N);
    j = randi(N);

    % Operazioni descritte nei punti precedenti
    .
    .
    .
end
```

6 Itero il processo per $N_{sweeps} = 10^6$ volte.

Simulazione della Dinamica di Ising

2 Implementazione

Iterando la procedura per il numero di sweep desiderati, è possibile simulare la dinamica "alla Ising".

Di seguito, alcuni snapshot della matrice H calcolata con i seguenti parametri:

- Dimensione del reticolo: $N = 100$
- Temperature: $T = \{1, 1.5, T_c, 3\}$
- Step di osservazione: $Q = \{0, 10, 100, N_{sweeps}\}$

.



UNIVERSITÀ
DI PAVIA

Indice

3 Risultati

► Introduzione

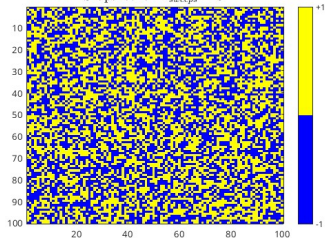
► Implementazione

► Risultati

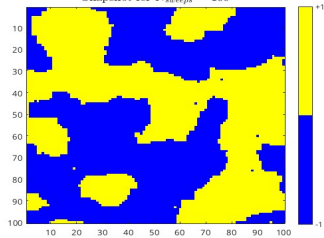
$T = 1$

3 Risultati

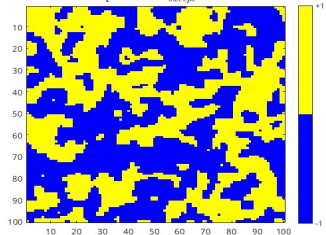
Snapshot for $N_{sweeps} = 0$



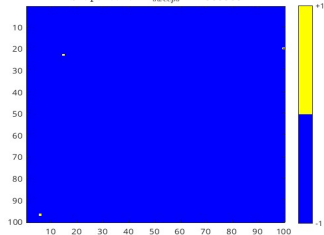
Snapshot for $N_{sweeps} = 100$



Snapshot for $N_{sweeps} = 10$



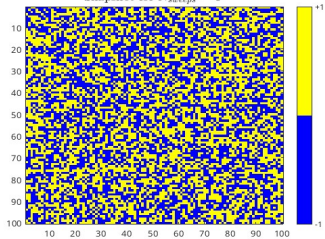
Snapshot for $N_{sweeps} = 1000000$



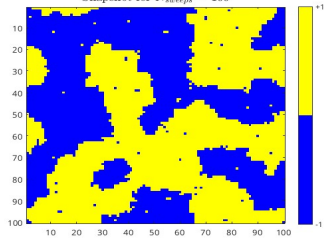
$T = 1.5$

3 Risultati

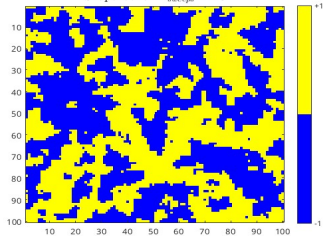
Snapshot for $N_{sweeps} = 0$



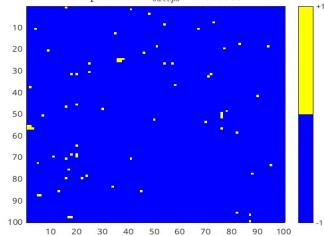
Snapshot for $N_{sweeps} = 100$



Snapshot for $N_{sweeps} = 10$



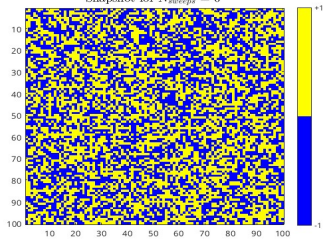
Snapshot for $N_{sweeps} = 1000000$



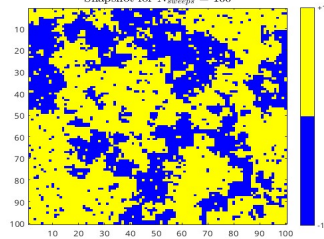
$$T = T_c$$

3 Risultati

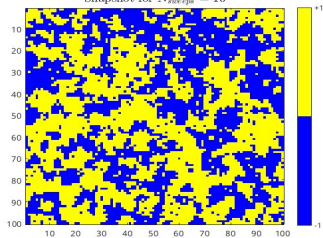
Snapshot for $N_{sweeps} = 0$



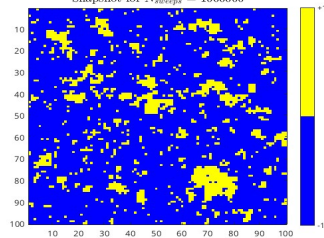
Snapshot for $N_{sweeps} = 100$



Snapshot for $N_{sweeps} = 10$



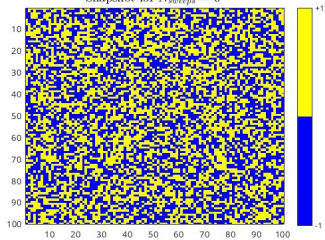
Snapshot for $N_{sweeps} = 1000000$



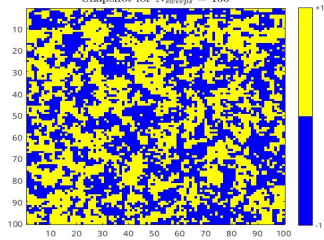
$T = 3$

3 Risultati

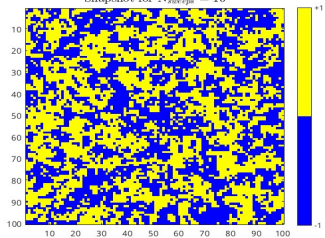
Snapshot for $N_{sweeps} = 0$



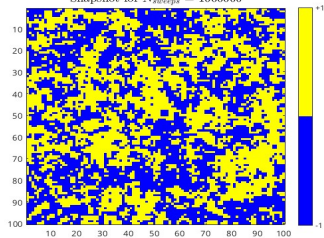
Snapshot for $N_{sweeps} = 100$



Snapshot for $N_{sweeps} = 10$



Snapshot for $N_{sweeps} = 1000000$



Dall'analisi degli snapshot si osserva che:

- Per $T < T_c$, si forma una fase ordinata, mentre per $T \geq T_c$ domina il disordine.
- All'aumentare della temperatura, è necessario un maggior numero di step per raggiungere l'ordine.
- Per $T \geq T_c$, la fase ordinata non si manifesta.



Magnetizzazione

3 Risultati

Iteriamo il codice del punto 5 su un set di temperature. La magnetizzazione è calcolata come media su tutti gli elementi della matrice H a N_{sweeps} fissato, e ulteriormente mediata per i passi successivi a τ_{eq} .

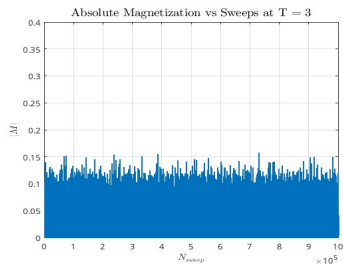
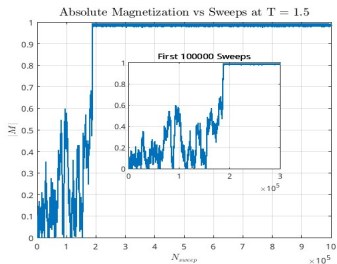
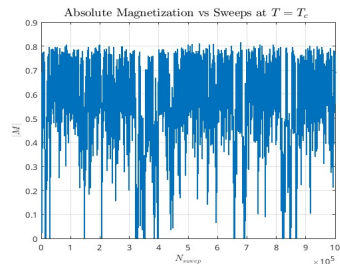
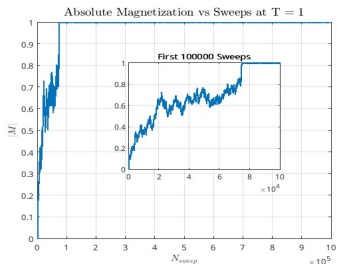
```
M_t = zeros(1, Nconf);  
for m = 1:Nconf  
    for ns = 1:Nsweeps  
        for n = 1:N^2  
            ...  
        end  
        % Magnetizzazione media per spin  
        M_m = sum(sum(H)) / N^2;  
        M_time(ns) = abs(M_m);  
    end  
    % Media della magnetizzazione per ns > tau  
    M_average_time = mean(M_time(tau:end));  
    M_t(m) = abs(M_average_time); % Memorizza la magnetizzazione assoluta  
end
```



UNIVERSITÀ
DI PAVIA

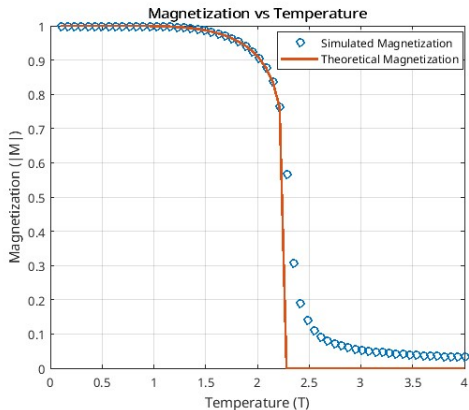
Waiting for equilibrium

3 Risultati





Il risultato della simulazione è relativa a 60 diversi valori della temperatura nell'intervallo $[0, 4]$ e scegliendo $\tau_{eq} = 10^5$.



Osservazioni

3 Risultati

- Tempo di equilibrio τ_{eq} : $\xrightarrow{\text{ergodicità}} \langle m \rangle = \bar{m}$.
- Transizione di fase evidente a T_c .
- Simulazione di un reticolo finito: \longrightarrow transizione più smooth.



UNIVERSITÀ
DI PAVIA

Grazie mille per l'attenzione!