

Progetto Numerico Modulo 1: Il modello di Ising

Roberto Dionisio

8 giugno 2023

Sommario

Lo scopo di questo progetto numerico è lo studio della termodinamica del modello di Ising bidimensionale in assenza di campo esterno studiando la transizione di fase ferromagnetica con il relativo andamento di alcune grandezze fondamentali.

1 Introduzione Teorica

1.1 Il modello

Il sistema consiste in un reticolo quadrato di lato L , dove ogni sito reticolare rappresenta uno spin $s_i \in \{1, -1\}$, la cui interazione è descritta dall'Hamiltoniana

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

e la somma su $\langle i,j \rangle$ è da intendersi sui primi vicini. Il segno di J determina il comportamento del sistema: $J > 0$ il sistema assume comportamento *ferromagnetico* (configurazione di minima energia spin paralleli) viceversa il sistema sarà detto *antiferromagnetico* (configurazione di minima energia spin anti paralleli).

Allora per reticolo quadrato i due sistemi si comportano in modo analogo e non richiedono trattazioni separate: in questo senso si osservi come (per un campo magnetico esterno nullo) le due configurazioni possiedono esattamente la stessa energia e sono entrambi gli stati a minore energia della relativa Hamiltoniana.¹

Quindi, per semplicità, nel seguito si fisserà $J = 1$ e le solite unità naturali $\hbar = k_B = c = 1$.

1.2 Simmetrie

Sia σ una certa configurazione di spin, allora all'equilibrio termico la probabilità di avere tale configurazione seguirà la distribuzione canonica:

$$P[\sigma] \sim \exp(-\beta H[\sigma])$$

Non essendoci alcun campo magnetico esterno il sistema gode della simmetria globale \mathcal{Z}_2 ovvero per $s_i \rightarrow -s_i$ l'Hamiltoniana resta invariante e di conseguenza $P[\sigma] = P[-\sigma]$. Questa simmetria globale è rotta spontaneamente (SSB) quando il valor medio della magnetizzazione

$$\langle m \rangle \equiv \frac{1}{V} \left\langle \sum_i s_i \right\rangle \neq 0$$

ossia $\langle m \rangle$ è il parametro d'ordine della transizione di fase.

¹Non più vero nella trattazione quantistica del sistema (i.e. *Modello di Heisenberg*), per questo il Modello di Ising è da considerarsi un modello classico.

Una quantità utile per lo studio della SSB è il cosiddetto cumulante di Binder (BC), definito come:

$$BC = \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2}$$

che nel limite termodinamico ($L \rightarrow \infty$) tenderà a 3 (1) per la fase disordinata (ordinata) cioè quando $\langle m \rangle \neq 0$ ($\langle m \rangle = 0$).

1.3 Andamento critico

È noto che il sistema presenta una transizione di fase continua a una data temperatura $\beta_c > 0$, in corrispondenza della quale gli andamenti attesi (nel limite termodinamico) per la lunghezza di correlazione ξ e la suscettività magnetica χ sono²

$$\xi \sim \tau^{-\nu} \quad \chi \sim \tau^{-\gamma}$$

dove

$$\tau = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad T = \frac{1}{\beta}$$

con

$$\beta_c = \frac{\log(1 + \sqrt{2})}{2} \simeq 0.44 \quad \nu = 1 \quad \gamma = \frac{7}{4}$$

Nel seguito si studierà il comportamento critico del sistema (stima esponenti critici e temperatura critica) attraverso simulazioni Monte Carlo su reticolo e verifica con Finite Size Scaling.

1.4 Simulazioni Numeriche

Data un certa configurazione iniziale del reticolo (per ogni simulazione il reticolo è stato inizializzato³ nella cosiddetta fase calda cioè con spin scelti in modo random per ogni sito), l'algoritmo usato per generare la Markov chain è un algoritmo Metropolis locale⁴ implementato nel codice dalla funzione `Metropolis()` che è stata chiamata per un totale di T_{MC} .

Si è allora simulato il comportamento di reticoli quadrati $L \times L$ e per ogni simulazione a L fissato si è variata β . In particolare, i valori usati per le varie simulazioni sono:

- $T_{MC} = 2 \times 10^6$ ($2 \times 10^6 L^2$ Metropolis updates)
- $L \in [10, 70]$ a passi di 5;
- $\beta \in [0.30, 0.55]$ a passi di 0.002 (tot: 126 valori);
- `save_measure` = 25.

dove l'ultimo parametro rappresenta la frequenza con cui vengono effettuate le misure, si è misurata la magnetizzazione ogni 25 sweeps Monte Carlo in modo da avere misure consecutive significativamente diverse e ridurre soprattutto il tempo computazionale.

² $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \sim e^{-d(i,j)/\xi} \quad \chi = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial h} \Big|_{h=0} = L^2 \beta (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$

³sono state scelta condizioni al bordo periodiche (PBC)

⁴si veda `simulation.ipynb`

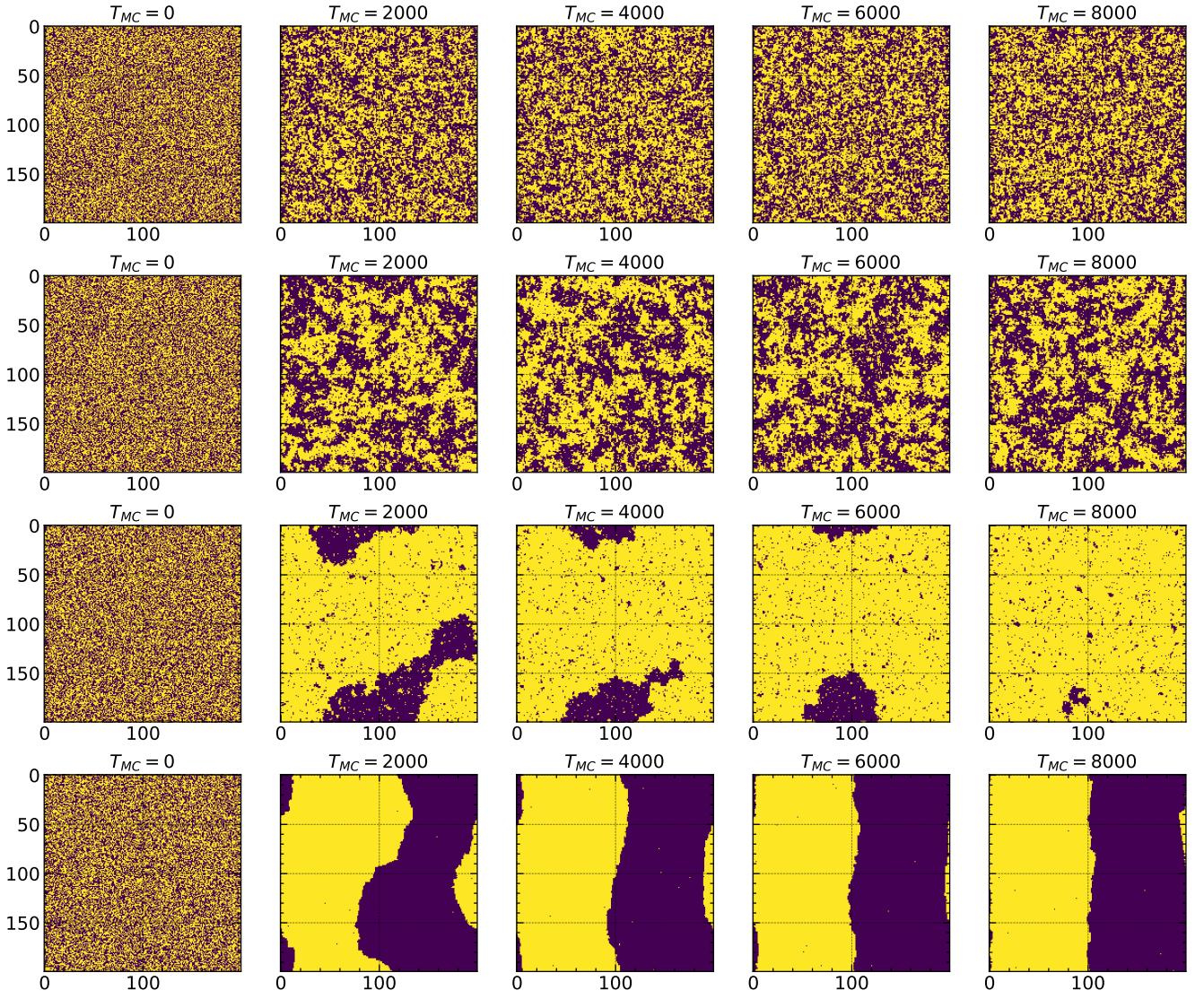


Figura 1: Ogni riga di snapshots si riferisce ad una simulazione a fisso β per reticolo di lato $L = 200$.
In ordine dall'alto $\beta = 0.3, 0.4, 0.5, 1.0$

2 Studio qualitativo

Per effettuare uno studio qualitativo e preliminare del sistema si è simulato il comportamento per un reticolo con un $L = 200$ e si è fatto evolvere⁵ il sistema per alcuni valori di temperatura abbastanza significative, durante la catena di Markov si sono presi degli snapshots della configurazione per valutarne l'evoluzione ogni 2000 sweeps Monte Carlo.

Come si può notare da Figura 1 per $\beta < \beta_c$ (alte temperature) il sistema si trova nella cosiddetta fase disordinata, si noti in particolare l'andamento previsto della lunghezza di correlazione cioè $\xi \rightarrow 0$ man mano che β diminuisce, apprezzabile anche visivamente nelle prime due righe di 1 dove l'estensione dei domini di spin con stessa magnetizzazione aumenta più ci si avvicina alla temperatura critica.

Invece nella terza riga di Figura 1, quindi per $\beta > \beta_c$, è avvenuta la transizione di fase, siamo cioè in presenza di SSB e il sistema ha "scelto" tra uno dei due possibili stati fondamentali infatti la maggioranza degli spin è orientata tutta allo stesso modo (fase ordinata).

Ciò che accade invece nell'ultima riga di Figura 1 è un problema ben noto dell'algoritmo che si è scelto di implementare. A basse temperature il sistema dovrebbe convergere più velocemente all'equilibrio ma quello che sembra accadere è che invece di ordinarsi, nel reticolo si formano due domini a grande scala e ben separati ognuno con magnetizzazione uniforme ma una l'opposto dell'altra.

Questi sono stati meta stabili, cioè la configurazione è in un minimo locale dell'energia e l'unico modo per spostarsi verso un altro minimo sarebbe quello di "spostare" la frontiera dei domini in modo tale da raggiungere il minimo globale, ma essendo l'algoritmo di Metropolis un algoritmo locale, cioè che propone uno spin flip alla volta e in maniera casuale, in aggiunta al fatto che a basse temperature l'acceptance ratio tende a diminuire, il sistema rimane bloccato in questa configurazione e la convergenza all'equilibrio richiederebbe tempi molto più lunghi.

Una soluzione a questo problema sarebbe quella di utilizzare una classe di algoritmi differenti come quella degli algoritmi a cluster i quali diventano più efficienti del Metropolis a basse temperature, in quanto propongono flip di interi gruppi di spin simultaneamente.

⁵In ogni simulazione ogni reticolo è stato inizializzato nella fase calda come si può vedere dalla prima colonna di Figura 1

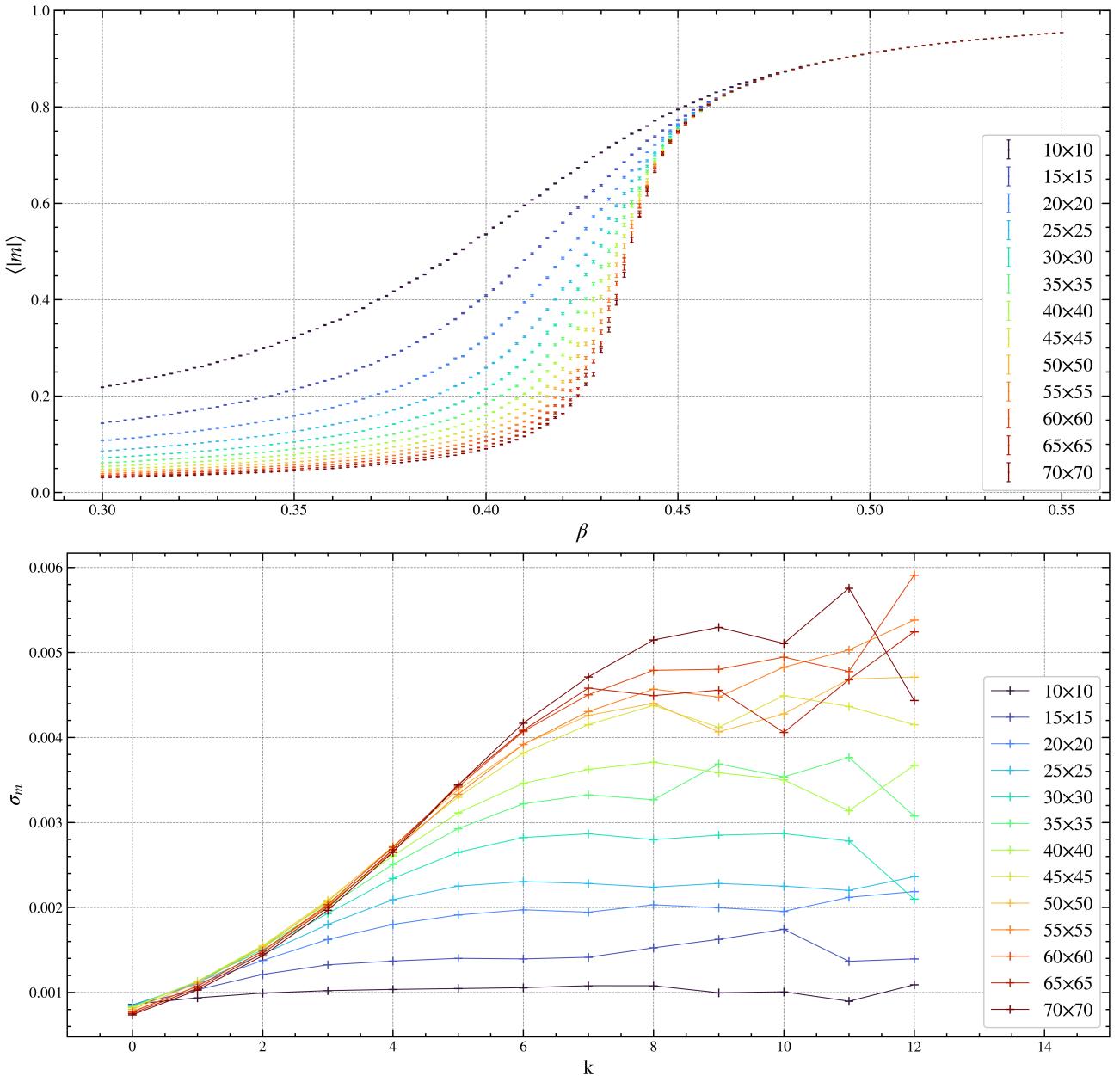


Figura 2: Plot della magnetizzazione, per ogni L , in funzione di β (sopra). Stima dell'errore associato alla magnetizzazione (sotto) con tecnica di blocking per varie dimensione dei blocchi (2^k).

3 Magnetizzazione

Realizzate le simulazioni con i parametri definiti in 1.4, si è calcolato il valor medio del valore assoluto della magnetizzazione e si sono riportati i risultati nel plot di Figura 2.

L'andamento è quello previsto: $\langle |m| \rangle$ per alte temperature tende a zero mentre per basse temperature il sistema tende alla configurazione ordinata con spin paralleli e quindi $\langle |m| \rangle$ cresce e tende al valore teorico ($\langle |m| \rangle \rightarrow 1$ per $\beta \rightarrow \infty$) e la transizione diventa sempre più rapida all'aumentare di L .

Inoltre si noti come per valori di $\beta \geq 0.44$ i punti tendano a sovrapporsi e questa potrebbe essere presa come una prima stima del β_c in accordo con il valore previsto.

3.1 Stima errori

Per stimare l'errore che si commette misurando la magnetizzazione l'approccio iniziale potrebbe essere quello di utilizzare l'errore standard

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{i=1}^N (m_i - \bar{m})^2$$

ma questo porterebbe ad una sottostima dell'errore in quanto valido per variabili statisticamente indipendenti, mentre in una Markov chain Monte Carlo c'è autocorrelazione tra le varie estrazioni essendo ogni nuova configurazione della catena dipendente dalla precedente. Bisognerebbe allora valutare la funzione di autocorrelazione $C(k)$ ⁶ e calcolare il tempo di autocorrelazione integrato $\tau_{int} \equiv \sum_{k=1}^{\infty} C(k)$ per poter

⁶ $C(i, j) = \frac{\langle \delta m_i \delta m_j \rangle}{\sigma_m^2}$ con $\delta m_i = m_i - \bar{m}$ e per una catena di Markov indipendente dal tempo dipende solo dalla differenza tra il passo i e il passo j della catena, $k = |i - j|$.

correggere l'errore σ_m e ottenerne:

$$\sigma_m^2 = \frac{\sigma_m^2}{N}(1 + 2\tau_{int})$$

Utilizzare questo metodo per ogni catena simulata diventerebbe molto oneroso da un punto di vista computazionale per questo si è utilizzata la tecnica del data-blocking che fornisce un approccio al problema più pratico e più veloce.

L'idea consiste nel dividere il data set iniziale in blocchi di uguale grandezza calcolare le medie per ogni blocco e queste costituiranno un nuovo campione (più piccolo di quello iniziale) su cui poter calcolare l'errore standard e la media campionaria.

Questa procedura la si itera incrementando via via la dimensione dei blocchi ottenendo vari campioni per ogni livello di blocking e per ogni campione si calcola l'errore standard ⁷ e si dimostra che l'errore calcolato ad un dato livello di blocking dipende dalla funzione di autocorrelazione del campione iniziale a distanza pari alla dimensione del blocco.

Allora si è implementata questa procedura per la stima del-

l'errore sulla magnetizzazione, usando blocchi di dimensione a potenza di 2, avendo però un campione di 80000 misure la cui bit size è di $2^{16} = 65536$ si sono eliminate le prime 14464 in modo da avere un campione adatto alla procedura e in questo modo si elimina anche il transiente iniziale di termalizzazione della catena.⁸ In Figura 2 ci sono i plot dell'errore sulla magnetizzazione⁹ per ogni reticolo al variare di k cioè con blocchi di dimensione 2^k crescenti. Si noti come l'errore cresca fino al raggiungimento di un plateau, questo è dovuto al fatto che per k piccoli i blocchi sono di una dimensione molto più piccola del tempo di autocorrelazione e risultano quindi ancora correlati fra di loro mentre quando si arriva ad un livello di blocking con dimensione dell'ordine (o maggiore) del tempo di autocorrelazione i blocchi generati saranno indipendenti e quindi l'errore smette di crescere.

Per la stima dell'errore sulla magnetizzazione si sono scelti blocchi di dimensione $2^{11} = 2048$.

⁷La media campionaria per ogni livello di blocking è la stessa cioè uguale a quella del campione iniziale

⁸In realtà, guardando le varie storie Monte Carlo, la termalizzazione avviene molto prima però poco male.

⁹Ogni reticolo è stato valutato alla stessa temperatura $\beta = 0.43$

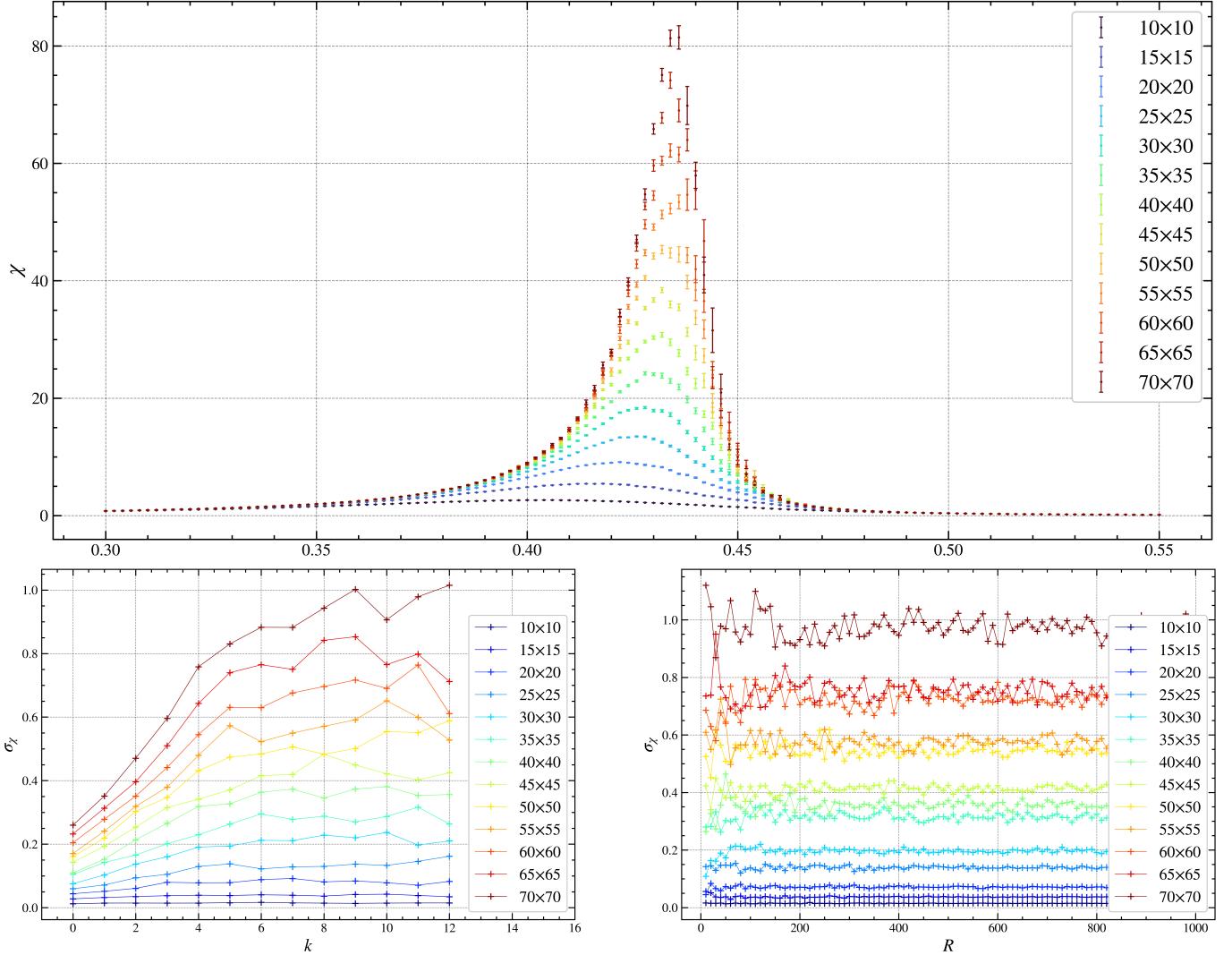


Figura 3: In alto plot della suscettività al variare di β per i vari reticolati. In basso, a sinistra stima dell'errore sulla suscettività per trovare la dimensione dei blocchi ottimali (2^k), a destra stima dell'errore al variare del numero dei resampling R .

4 Suscettività

A partire dalle magnetizzazioni misurate si è calcolata la suscettività:

$$\chi = L^2 \beta (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$$

4.1 Stima errori e Bootstrap

Per stimare l'errore si è usata la tecnica di ricampionamento del binned Bootstrap che permette di stimare le fluttuazioni attorno al valore centrale di un certo estimatore (in questo caso sarebbe la varianza di m) che dipende da variabili autocorrelate. L'idea su cui si basa questo metodo consiste nel dividere il campione iniziale in blocchi¹⁰ di stessa dimensione, generare R campioni fittizi, di ugual misura, e riempirli di volta in volta con blocchi scelti casualmente dal campione originale¹¹.

Dopodiché si calcola il valor medio dell'estimatore per ogni R ottenendo così un campione lungo R su cui calcolare l'errore standard. Si è allora implementata questa tecnica sul campione delle magnetizzazioni, prima di eseguirla su tutti i campioni si sono scelte le dimensioni ottimali dei blocchi (come nella sezione precedente) e anche il numero di resampling R necessario. Come si può vedere da Figura 3, con il plot a sinistra si è determinata la dimensione del blocco ottimale per cui l'errore raggiungesse un plateau $2^{11} = 2048$ mentre il numero di resampling $R = 300$.

4.2 Suscettività

Fatto questo, in Figura 3 si sono riportati i valori della suscettività in funzione di β per i vari reticolati. Il picco della suscettività cresce all'aumentare di L e questo è in accordo con il fatto che nel limite termodinamico ($L \rightarrow \infty$) χ debba divergere per $\beta = \beta_c$ e inoltre il β per cui la suscettività sia massima tende al valore teorico $\beta_c \sim 0.44$.

La divergenza della suscettività chiaramente non si osserva dato che la lunghezza di correlazione ξ , essendo la dimensione dei reticolati finiti, può al massimo crescere fino a L .

5 Analisi

5.1 Finite Size scaling

Nel seguito si utilizzerà che

- Nel limite termodinamico, alla temperatura critica, ξ diverge. Allora per L finito alla “temperatura pseudo-critica” \bar{T} ¹² la lunghezza di correlazione del sistema al massimo potrà valere $\xi_L \sim L$ e quindi

$$\chi_{\max}(L) \equiv \chi(\bar{T}(L)) \sim \xi_L^{\gamma/\nu} \sim L^{\gamma/\nu} \quad (1)$$

- Nel limite termodinamico, usando le definizioni degli esponenti critici si ha

$$\chi(\xi) \sim \xi^{\gamma/\nu} \quad (2)$$

A L finito χ risulta funzione di L e T : $\chi = f(L, T)$. Usando la definizione degli esponenti critici, si può eseguire un

cambio di variabile $|\tau| \sim \xi^{-1/\nu}$ e riscrivere $\chi = \tilde{f}(L, \xi)$. Inoltre:

- per valori della temperatura tali per cui $\xi \ll L$, non ci sono effetti di size finito e quindi $\xi = \xi_L$ e l'andamento del limite termodinamico $\chi(\xi) \sim \xi^{\gamma/\nu}$ risulta rispettato (almeno per reticolati con L grande)
- per valori della temperatura per cui $\xi \gtrsim L$, si avranno effetti di size finito; in questo caso $\xi \neq \xi_L \sim L$ e la suscettività χ non rispetterà l'andamento del limite termodinamico; in particolare essendo le uniche scale rilevanti per il sistema ξ ed L ci si aspetta che la deviazione da tale comportamento sia quantificata dal rapporto tra ξ ed L . Non solo, nel caso di ξ molto grande, ci si aspetta che il sistema perda memoria della sua struttura microscopica e quindi che l'unica quantità davvero rilevante per determinare la deviazione dal comportamento nel limite termodinamico sia il rapporto L/ξ .

Cioè riassumendo:

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} f(L/\xi) \quad \text{con} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 1$$

Per quanto detto al punto precedente, inoltre si ha $f(x) \sim x^{\gamma/\nu}$ per $x \rightarrow 0$. Mettendo tutto insieme, per temperature prossime a quella critica:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} f(L/\xi)$$

che ricordando la definizione degli esponenti critici si può riscrivere come:

$$\chi = g((T - T_c)L^{1/\nu}) L^{\gamma/\nu}$$

ovvero, eseguendo un plot delle curve

$$g(x) = \chi(T(x), L)L^{-\gamma/\nu} \quad (3)$$

dove

$$x = (T(x) - T_c)L^{1/\nu} \quad (4)$$

ci si aspetta che le curve corrispondenti a diversi L collassino su un'unica curva.

- Sfruttando quanto detto nel punto precedente si vede inoltre che:

$$x_{\max} = (\bar{T}(L) - T_c)L^{1/\nu} \Rightarrow \bar{T}(L) = x_{\max}L^{-1/\nu} + T_c \quad (5)$$

che permette di ricavare sia la temperatura critica, estrapolando l'andamento di $\bar{T}(L)$ all'aumentare di L , che una stima di ν .

5.2 Stima temperatura critica e ν

Per stimare la temperatura critica e l'esponente critico ν per prima cosa si sono stimate le temperature per le quali la suscettività fosse massima eseguendo dei fit prendendo alcuni punti¹³ attorno ai vari picchi della suscettività per ogni reticolo con modello quadratico $\chi(\beta) = \chi_{\max} + a(\beta - \beta_c)^2$ ottenendo quanto riportato (solo per alcuni L) in Figura 5.

¹⁰così si trasporta l'informazione sull'autocorrelazione all'interno di ciascun blocco anche nei nuovi campioni

¹¹ogni blocco può essere scelto più volte

¹² \bar{T} sarebbe la temperatura per la quale χ sia massima

¹³circa 10 punti

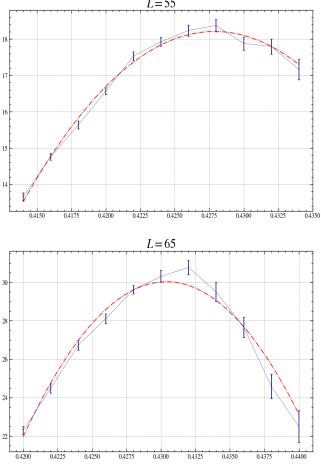


Figura 4: Fit, per alcuni reticolati, attorno ai picchi delle suscettività..

Si riportano nel seguito i risultati dei vari fit:

L	β_c	χ_{max}	χ^2/ndof
10	0.4052(9)	2.631(4)	7.56/10
15	0.4169(8)	5.42(1)	5.61/8
20	0.4214(1)	8.99(2)	8.36/10
25	0.4251(1)	13.40(4)	8.96/7
30	0.4278(3)	18.21(6)	12.22/8
35	0.4295(2)	23.9(1)	11.11/7
40	0.4303(1)	30.02(13)	19.99/8
45	0.4317(1)	37.4(2)	11.11/6
50	0.4325(1)	44.6(3)	15.59/6
55	0.4331(1)	51.9(4)	12.92/7
60	0.4335(1)	60.9(5)	21.5/6
65	0.4339(1)	68.9(6)	49.7/7
70	0.4345(1)	79.6(7)	16.6/6

Tabella 1: Risultati dei fit

Si noti da Tabella 1 che come previsto¹⁴:

- Il β_c cresce all'aumentare di L ;
- Il valore di χ_{max} cresce sempre all'aumentare di L in accordo con il fatto che aumentando le dimensioni del reticolo cresce anche il valore a cui ξ può tendere;
- Il χ^2 cresce all'aumentare di L in quanto il picco della suscettività si fa sempre più sharp e probabilmente il modello quadratico utilizzato per il fit diventa poco accurato.

A titolo d'esempio è stato provato un fit con modello lorenziano per il reticolo con $L = 65$ e si è ottenuto un valore del $\chi^2/\text{ndof} = 14.5/10^{15}$, tale modello però è molto più sensibile ai parametri iniziali da assegnare per far sì che il fit converga e sarebbe stato più complesso implementare la procedura in modo da automatizzare i fit per i vari reticolati.

¹⁴I valori di temperatura che qui sono chiamati β_c sono in realtà, essendo appunto effetti di size finito, i punti di massimo nella suscettività, più propriamente β_{\max} , ciò che prima è stato chiamata temperatura critica

¹⁵Con il modello quadratico è stato fondamentale scegliere i punti attorno al massimo per ottenere delle stime ragionevoli, mentre con modello lorenziano si sono potuti considerare anche i punti per i quali la concavità della suscettività cambiava

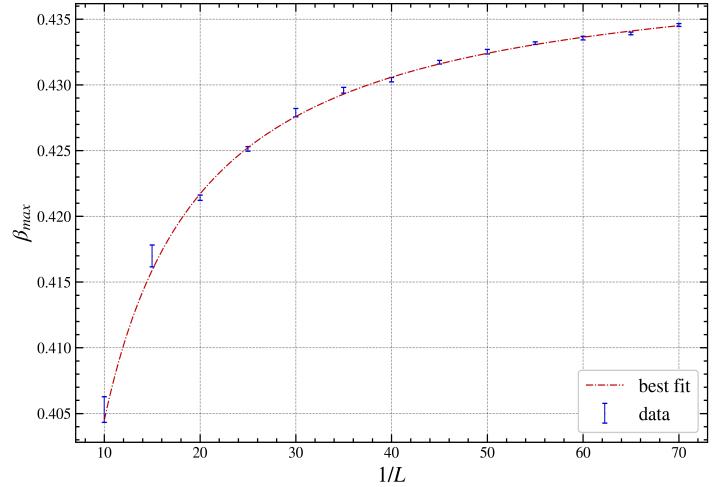


Figura 5: Fit per la stima di β_c e ν

Fatto ciò si hanno tutti gli ingredienti per stimare il β_c del Modello di Ising bidimensionale e anche l'esponente critico ν , fittando $\beta_{\max}(1/L)$ usando come modello la ¹⁶.

Si sono ottenuti i seguenti risultati:

$$\begin{aligned}\nu &= 0.955(44) & \nu_{\text{exp}} &= 1 \\ \beta_c &= 0.4401(5) & \beta_{c,\text{exp}} &\simeq 0.44068 \\ \chi^2/\text{ndof} &= 15.11/10\end{aligned}$$

che sono compatibili con i valori teorici.

5.3 Stima di γ/ν

Per dare una stima invece del rapporto di γ su ν si sono fittati i massimi della suscettività $\chi_{\max}(L)$ usando come modello¹⁷ l'equazione 1 ottenendo:

range	γ/ν	dist/ σ
tutti	1.720(4)	7.5
30-70	1.74(2)	0.2

cioè escludendo gli L minori la stima di γ/ν è più vicina, in unità dell'errore, al valore atteso $\gamma/\nu = 7/4 = 1.75$. Questo ce lo si aspetta in quanto il modello che si è utilizzato è valido per grandi L cioè nel limite termodinamico.

5.4 Comulante di Binder

Come accennato inizialmente, il cumulante di Binder è un estimatore utile per capire se la simmetria del sistema per un dato β sia o meno spontaneamente rotta.

A partire dalle magnetizzazioni si è allora calcolato il cumulante di Binder per $\beta = 0.35$ e 0.45 e per stimarne l'errore si è riutilizzata la tecnica del binned Bootstrap con 300 ricampionamenti e blocchi di dimensione 2048.

Ci si aspetta che nel limite termodinamico il BC tenda a 3 nella fase disordinata ($\beta = 0.35$) e ad 1 nella fase ordinata con SSB ($\beta = 0.35$). Per quanto riguarda la fase disordinata si sono fittati i cumulanti in funzione di $1/L$ usando come modello $BC(1/L) = BC_{\infty} + a(1/L)^2$ mentre per quella ordinata $BC(L) = BC_{\infty} + a/(L - d)$.

¹⁶ $(\bar{T}(L) - T_c) \sim (\beta_{\max} - \beta_c)$ in un intorno di β_c

¹⁷il modello completo è $\chi_{\max} = a + b(L)^d$ dove $d = \gamma/\nu$

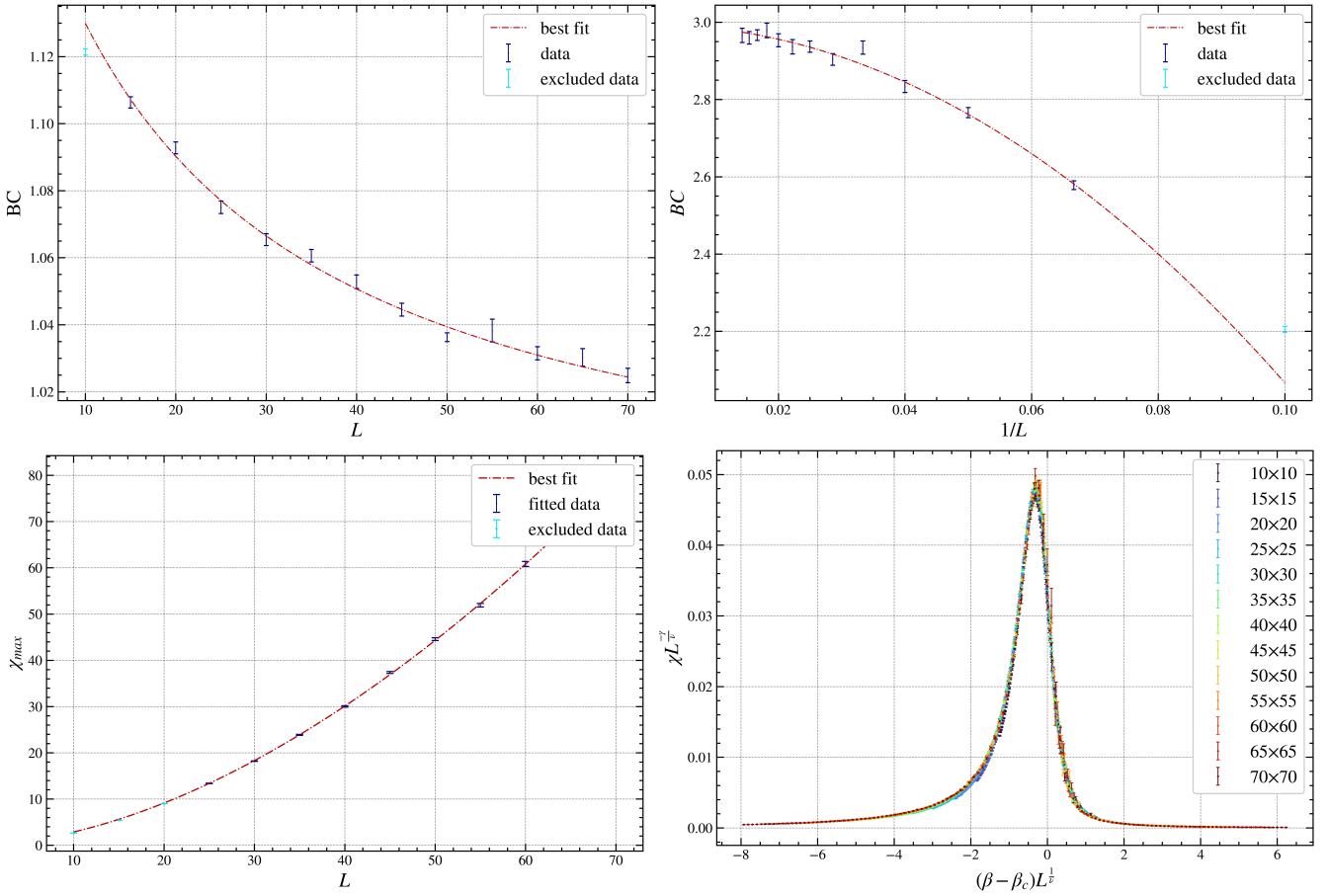


Figura 6: ciao

BC_∞	χ^2/ndof	dist/σ
2.992(6)	10.4/9	1.25
0.978(7)	$\mathcal{O}(10^4)$	3.14

I risultati ottenuti sono dunque compatibili con quanto previsto anche se per quanto riguarda la fase ordinata¹⁸ si è ottenuto un χ^2 molto elevato che suggerisce come sicuramente il modello usato per il fit non è adeguato a riprodurre correttamente l'andamento dei dati.

5.5 Finite Size Scaling

Infine si è verificato il Finite Size Scaling come detto in sezione 5.1, allora si sono plottate le varie suscettività per ogni reticolo come $\chi/L^{2/\nu}$ vs $(\beta - \beta_c)L^{1/\nu}$ usando le stime per gli esponenti critici e la temperatura critica stimata in precedenza. In Figura si osservi il collasso delle varie suscettività su un'unica curva¹⁹ proprio come previsto.

A Appendix

A.1 PRNG

Per l'estrazione dei numeri random si è utilizzato il generatore di numeri pseudo random(PRNG) di default presente nella

¹⁸si è provata la stessa procedura per valori della temperatura più lontani da quella critica $BC_\infty = 0.99911(2)$ e un χ^2 ancora più grande $\mathcal{O}(10^6)$

¹⁹sarebbe la funzione di scaling, che come si può vedere è valida a livello globale e non solo in un intorno della temperatura critica

libreria di Python NumPy basato sull'algoritmo di Mersenne Twister. Questo è un algoritmo ampiamente utilizzato e testato che genera numeri random di alta qualità con un periodo di $2^{19937} - 1$, ciò significa che può generare un vasto numero di sequenze casuali distinte prima di ripetersi.

Inoltre ha una grande dimensione interna di stati, composta da 624 interi. Questa ampia dimensione consente un notevole grado di entropia interna, che si traduce in una lunga periodicità e una maggiore casualità. In Figura si riportano uno scatter plot di coppie di variabili estratte random e un istogramma di un sample di 10000 numeri random per visualizzarne la frequenza.

A.2 Numba

Per le simulazioni Monte Carlo (ma anche per l'analisi) si è utilizzato Python che è noto per una lenta capacità di calcolo soprattutto quando deve gestire array o cicli. Si è usata però una libreria chiamata Numba che offre numerosi vantaggi per le simulazioni in Python. In primo luogo, fornisce la compilazione just-in-time (JIT), che traduce il codice Python in codice macchina altamente ottimizzato durante l'esecuzione. Questo processo di compilazione dinamica migliora notevolmente le prestazioni dei calcoli numerici, consentendo alle simulazioni di eseguirsi in modo significativamente più rapido.

Inoltre ottimizza automaticamente le prestazioni delle operazioni sugli array, come per calcoli elemento per elemento o algebra lineare. Questa ottimizzazione si traduce in simulazioni più veloci, poiché i calcoli complessi possono essere eseguiti in modo efficiente su grandi set di dati. Sfruttando

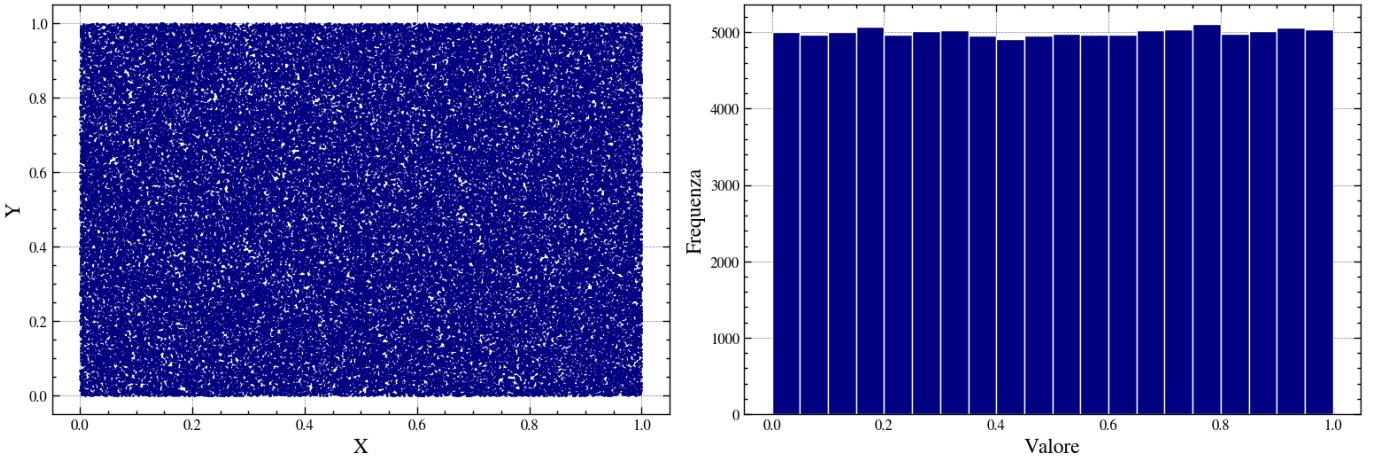


Figura 7: A sinistra scatter plot di coppie (x, y) estratte random, a destra istogramma della frequenza di valori estratti random.

la potenza della vettorizzazione e degli accessi efficienti alla memoria, Numba consente alle simulazioni di gestire ingenti quantità di dati con facilità. Con la sua capacità di integrarsi con NumPy, Numba fornisce un framework potente ed efficiente per condurre simulazioni in Python.

Nei codici le funzioni che sono state implementate usando **Numba** sono tutte quelle con il decoratore `@njit()` prima della definizione.

Le performance che si raggiungono con **Numba** sono simili, e in alcuni casi maggiori dei linguaggi di basso livello come **C** o **Fortran** in quanto in alcuni casi è possibile anche parallelizzare, in maniera immediata, alcune funzioni che lo supportano.

A.3 Implementazione

Il codice implementato per le simulazioni e per l'analisi si trova nella repository **Ising_model** in particolare per la simulazione si veda **simulation.ipynb** e per l'analisi **analysis+term.ipynb**.

Si è tradotto il codice in **iPython** in modo da poter visualizzarlo agevolmente come una sorta di presentazione , avendo anche salvati gli output generati da ogni cella di codice all'ultima esecuzione.

I parametri o risultati presenti possono essere diversi perché magari durante la stesura delle relazioni si sono modificati i valori per effettuare test o variazioni quindi sono da prendere a titolo di esempio.