

Simulazioni e Metodi Montecarlo

- Cercano gli stati fondamentali di sistemi complessi non risolubili analiticamente e le loro proprietà
- analoghi per molti versi al problema del commesso viaggiatore
- lasciano evolvere un sistema in base alle leggi della fisica
- il risultato finale si deve poter ottenere tramite piccoli passi
- se q_1 indica uno stato di un sistema S , e q_2 un qualsiasi altro stato, ci deve sempre essere un modo per andare da S_{q_1} a S_{q_2} e viceversa.

Modello di Ising in una dimensione

È uno dei pochi modelli solubili esattamente (in una e due dimensioni) e trattabili con tecniche Montecarlo.

Considero un insieme di variabili s_1, s_2, \dots, s_N che possano assumere valori ± 1 . s_i sono detti spin e sono descritti da un'energia (Hamiltoniana)

$$H = - \sum_{i,j} s_i \cdot s_j$$

dove i e j devono essere primi vicini, cioè $j = i \pm 1$.

H non è completamente definita finché non viene definito il comportamento degli spin agli estremi s_1 e s_N . La scelta abituale, detta delle condizioni al contorno periodiche è dire che s_1 viene dopo s_N

Soluzione esatta

Definendo $\sigma_i = s_i \cdot s_{i+1}$ e $\sigma_N = s_N \cdot s_1$, σ_i assume sempre valori ± 1 e si ottiene

$$H = - \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

e per la funzione di partizione

$$Z = \sum_p e^{\beta \sum_{i=1}^N \sigma_i}$$

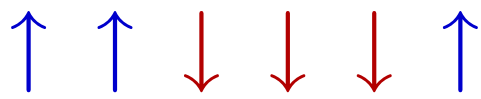
dove la somma è estesa a tutti possibili stati, quindi le 2^N possibilità con $\sigma_i = \pm 1$

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta \sigma_1} \dots e^{\beta \sigma_N} \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} e^{\beta \sigma_1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta \sigma_N} = (e^{\beta} + e^{-\beta})^N \end{aligned}$$

Calcolo quindi l'energia per spin

$$E = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{e^{\beta} - e^{-\beta}}{e^{\beta} + e^{-\beta}}$$

Algoritmo di Metropolis



- Prendo uno spin a caso tra 1 e N e lo **flippo**
- valuto la differenza ΔE di energia rispetto alla situazione precedente
- se $\Delta E < 0$. accetto il cambiamento
- se $\Delta E > 0$. accetto il cambiamento con probabilità $e^{-\beta\Delta E}$
- osservo che per $\Delta E > 0$ è possibile solo $\Delta E = 4$ e quindi $e^{-4\beta}$ può essere calcolato una volta per tutte

Equilibrio termodinamico

Sia p_i la probabilità di occupazione dello stato i all'equilibrio. Sappiamo che $p_i = N e^{-\beta E_i}$. Il valore medio di una quantità fisica A è dato da

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i p_i}{\sum_i p_i}$$

la probabilità è stazionaria, non cambia con il tempo $P(i \rightarrow j)$ è la probabilità di passare dallo stato i allo stato j all'istante successivo. In condizioni non stazionarie sia w_i la probabilità di occupare lo stato i

$$w_i(t_{N+1}) = \sum_j P(j \rightarrow i) w_j(t_N)$$

Posso usare una notazione matriciale per scrivere

$$\vec{w}(t_{N+1}) = P \vec{w}(t_N)$$

Sotto condizioni piuttosto generali

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P^N \vec{w} = \vec{p}$$

Bilancio dettagliato

Se p_i e p_j sono le probabilità di occupazione degli stati i e j del sistema in condizioni stazionarie, il numero medio di particelle che entrano nello stato i da qualsiasi stato j è dato da

$$\sum_j p_j P(j \rightarrow i)$$

mentre quelle che escono sono

$$\sum_j p_i P(i \rightarrow j)$$

La stazionarietà richiede allora

$$\sum_j p_i P(i \rightarrow j) = \sum_j p_j P(j \rightarrow i)$$

che è la condizione di bilancio dettagliato. La scelta più semplice per soddisfare questa equazione è

$$p_i P(i \rightarrow j) = p_j P(j \rightarrow i)$$

per qualunque stato i e j all'equilibrio.

$$\frac{p_j}{p_i} = \frac{P(i \rightarrow j)}{P(j \rightarrow i)} = \frac{e^{-\beta E_j}}{e^{-\beta E_i}} = e^{-\beta(E_j - E_i)}$$

Probabilità di selezione e ampiezza di transizione

$P(i \rightarrow j)$ può essere divisa in due parti

- la probabilità $g(i \rightarrow j)$ che venga selezionato un nuovo stato j quando il sistema è in uno stato i
- la probabilità che il sistema effettivamente passi dallo stato i allo stato j (Ampiezza di transizione $A(i \rightarrow j)$)

$$P(i \rightarrow j) = g(i \rightarrow j)A(i \rightarrow j)$$

Il metodo di Metropolis prende $g(i \rightarrow j)$ costante per i primi vicini. Il rapporto delle ampiezze di transizione è allora fissato

$$\frac{A(i \rightarrow j)}{A(j \rightarrow i)} = \frac{P(i \rightarrow j)}{P(j \rightarrow i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)}$$

- Mi interessa avere il massimo del cambiamento possibile e quindi scelgo $A(i \rightarrow j) = 1$ nel caso più favorevole e ottengo quindi

$$A(i \rightarrow j) = 1 \quad E_j < E_i$$

$$A(i \rightarrow j) = e^{-\beta(E_j - E_i)} \quad E_j \geq E_i$$

Modello di Ising con campo magnetico

$$H = -\sum_{i,j} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

$$H = -s_0 s_1 - \dots - s_{i-1} s_i - s_i s_{i+1} - \dots - s_{N-1} s_0 \\ - B s_0 - \dots - B s_i - \dots - B s_{N-1}$$

Se ora flippo il segno di uno spin s_i , solo una parte di H viene cambiata di segno

$$-s_{i-1} s_i - s_i s_{i+1} - B s_i \implies +s_{i-1} s_i + s_i s_{i+1} + B s_i$$

$$H' - H = 2 \left(s_{i-1} s_i + s_i s_{i+1} + B s_i \right) = \\ 2 s_i \left(s_{i-1} + s_{i+1} + B \right)$$

Per rendere più rapido il calcolo è conveniente calcolare una volta per tutte i pochi possibili valori positivi di $\Delta E = H' - H$ Risulta

- Se s_{i-1} e s_{i+1} sono discordi $\Delta E = \pm 2B$
- se sono concordi $\Delta E = \pm 2(2 \pm B)$
- supponendo sempre $B > 0$ si ottengono, come valori positivi di ΔE , $2B$, $|B - 2|$ e $B + 2$

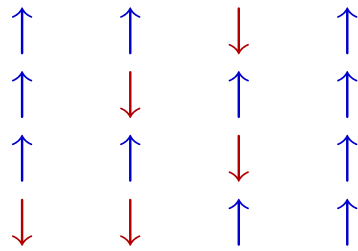
Magnetizzazione

La magnetizzazione è data da

$$M = \frac{1}{N} \sum_i s_i$$

È interessante sapere che tipo di comportamento ha il sistema al variare della temperatura a parità di campo magnetico. In questo caso non esiste una soluzione analitica.

Modello di Ising in due dimensioni



- Ogni spin ha 4 vicini (invece di 2);
- l'espressione dell'energia è la stessa che in una dimensione;
- anche l'energia magnetica ha la stessa forma.

È conveniente studiare la magnetizzazione M in funzione della temperatura β

- Si nota che per β piccolo (temperatura alta) la magnetizzazione è nulla;
- per β grande (temperatura piccola) la magnetizzazione si avvicina a 1;
- si ha un cambiamento brusco di M (transizione di fase) per $\beta \approx 0.44$.

Dettagli del calcolo in $D = 2$

- Nel calcolo dell'energia ogni interazione tra due spin contribuisce a due spin diversi: si può quindi contare le interazioni tra coppie di spin e moltiplicare per due il risultato;
- la differenza di energia tra due stati è (trascurando il campo magnetico):

$$\Delta E = 2s_{i,j} (s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1})$$

che si può scrivere $\Delta E = 2k$ con $k = 0, \pm 2, \pm 4$. È quindi ancora possibile memorizzare in

anticipo pochi valori di $e^{-\beta\Delta E}$;

- invece di prendere uno spin a caso è possibile passarli in modo sistematico per righe e per colonne $s_{0,0}, s_{0,1}, \dots, s_{1,0}, \dots, s_{N-1,N-1}$;
- è essenziale fare un grafico della magnetizzazione in funzione della temperatura.

Che grandezze ci interessano?

È possibile calcolare

- lo scarto quadratico medio per l'energia e per la magnetizzazione:

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad \text{e} \quad \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$$

- la funzione di correlazione tra spin

$$\langle s_\mu s_\nu \rangle - \langle s_\mu \rangle \langle s_\nu \rangle$$

- la dipendenza dal campo magnetico dell'energia
- i grafici $\beta - E, \beta - M, E - M$

Tempo di correlazione

Nel calcolare il valore di E e M ho fatto la media su diversi stati alla stessa temperatura.

Questi stati, per dare una media significativa, devono essere statisticamente indipendenti

Il tempo τ che deve trascorrere perché abbia stati statisticamente indipendenti è il tempo di correlazione;

Vicino alla transizione di fase, gli spin si raggruppano in cluster dello stesso segno con dimensione tipiche di ξ , che viene detta lunghezza di correlazione

Vicino alla transizione di fase

$$\xi \sim \left(\frac{T_c}{T - T_c} \right)^\nu \quad \text{e} \quad \tau = \xi^z$$

Il numero z dipende dall'algoritmo usato, mentre ν è universale. Per Metropolis $z \approx 2.1$

Algoritmi per cluster

Considero un algoritmo che mi cambi il segno dello spin di un intero gruppo di spin in un colpo solo

Scelgo il cluster in modo che non comprenda tutti gli spin dello stesso segno

il tempo di correlazione sarà molto minore

Devo soddisfare le condizioni di ergodicità e bilancio dettagliato

La prima è soddisfatta se posso avere cluster di un solo spin, ricadendo quindi nel caso di Metropolis

Metodo di Wolff

Prendo un singolo spin di segno arbitrario

Mi guardo intorno per vedere se ci sono altri spin ugualmente orientati

Aggiungo ognuno di questi al cluster con probabilità P_{add}

Ripeto il procedimento ricorsivo per ciascuno dei siti aggiunti al cluster

Quando la procedura sarà terminata il cluster avrà dei precisi confini, ed i legami con gli spin fuori dal cluster saranno m con spin uguali e n con spin opposti. La differenza di energia è quindi $\Delta E = 2\beta(m - n)$ La probabilità di selezionare questo cluster sarà quindi

$$(1 - P_{add})^m$$

Bilancio dettagliato per il metodo di Wolff

Suppongo ora di cambiare lo stato di tutti gli spin del cluster, e di voler calcolare la probabilità di selezionare lo stesso cluster di prima, ma con spin invertiti. In questo caso avrò n legami con spin uguali e m con spin opposto. La probabilità di ottenere lo stesso cluster sarà quindi

$$(1 - P_{add})^n$$

A questo punto posso applicare il bilancio dettagliato

$$\frac{g(i \rightarrow j)A(i \rightarrow j)}{g(j \rightarrow i)A(j \rightarrow i)} = \frac{(1 - P_{add})^m A(i \rightarrow j)}{(1 - P_{add})^n A(j \rightarrow i)}$$

Scegliendo $P_{add} = (1 - e^{-2\beta})$ trovo

$$\frac{e^{-2m\beta} A(i \rightarrow j)}{e^{-2n\beta} A(j \rightarrow i)} = e^{-2\beta(m-n)}$$

che soddisfa il bilancio dettagliato nel modo migliore perché consente di scegliere le ampiezze di transizione $A(i \rightarrow j)$ uguali ad uno in tutti i casi.

Per Wolff $z \approx 0.25$