

Simulazioni e Metodi Montecarlo

- Cercano gli stati fondamentali di sistemi complessi non risolvibili 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 (ergodicità).

Modello di Ising in una dimensione

Uno dei pochi modelli solubili esattamente e trattabili con tecniche Montecarlo è il modello di Ising.

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

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

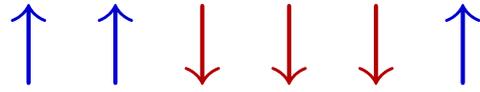
dove la somma è estesa a tutti possibili stati, quindi le 2^N possibilità con $\sigma_i = \pm 1$

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

Calcolo quindi l'energia per spin

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

Metodo 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

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

Se la probabilità è stazionaria, non cambia con il tempo. Sia $P(i \rightarrow j)$ 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 . Allora

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

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

$$\begin{aligned} A(i \rightarrow j) &= 1 & E_j < E_i \\ A(i \rightarrow j) &= e^{-\beta(E_j - E_i)} & E_j \geq E_i \end{aligned}$$

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

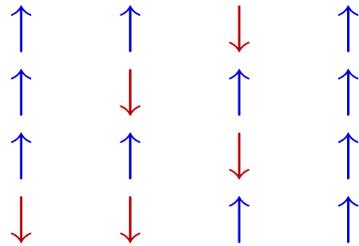
- Se s_{i-1} e s_{i+1} sono discordi $\Delta E = \pm 2B$
- se sono concordi $\Delta E = \pm 2(2 \pm B)$
- supponendo sempre $B > 0$ si ottengono, come valori positivi di ΔE , $2B$, $|B - 2|$ e $B + 2$

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 $\beta \approx 0.44$.

Onsager ha trovato la soluzione analitica per questo modello

$$E/N_s = \beta \coth(2\beta) \left(1 + \frac{2}{\pi} (2 \tanh^2(2\beta) - 1) K_1(\kappa) \right)$$

con

$$K_1(\kappa) = \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{1 - \kappa^2 \sin^2 y} \quad \kappa = 2 \frac{\sinh(2\beta)}{\cosh^2(2\beta)}$$

$$M/N_s = \pm \frac{(1 + z^2)^{1/4} (1 - 6z^2 + z^4)^{1/8}}{(1 - z^2)^{1/2}} \quad z = e^{-2\beta}$$

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.

Calcoli possibili

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 $\beta - E, \beta - M, E - M$