

## 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  $\pm 1$ .  $s_i$  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  $\sigma_N = s_N \cdot s_1$ ,  $\sigma_i$  assume sempre valori  $\pm 1$  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

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

## Metodo di Metropolis



- Prendo uno spin a caso tra 1 e  $N$  e lo **flippo**
- valuto la differenza  $\Delta E$  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  $\Delta E$ ,  $2B, |B - 2|$  e  $B + 2$

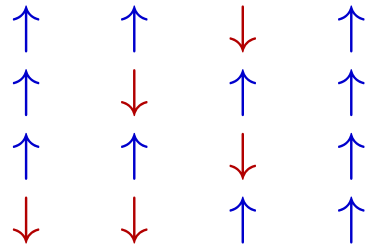
**Magnetizzazione** La magnetizzazione è data da

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

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  $\beta$
- Si nota che per  $\beta$  piccolo (temperatura alta) la magnetizzazione è nulla;
- per  $\beta$  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  $\beta - E, \beta - M, E - M$