

# Simulazione Monte Carlo

**Origine: Ulam, Fermi, Von Neumann, Metropolis durante il Manhattan project (anche Feynman)**

Calcoli che riguardavano come innescare una esplosione nucleare effettuati con macchine calcolatrici meccaniche

Von Neumann suggerì poi l'uso del primo calcolatore elettronico ENIAC (1945)

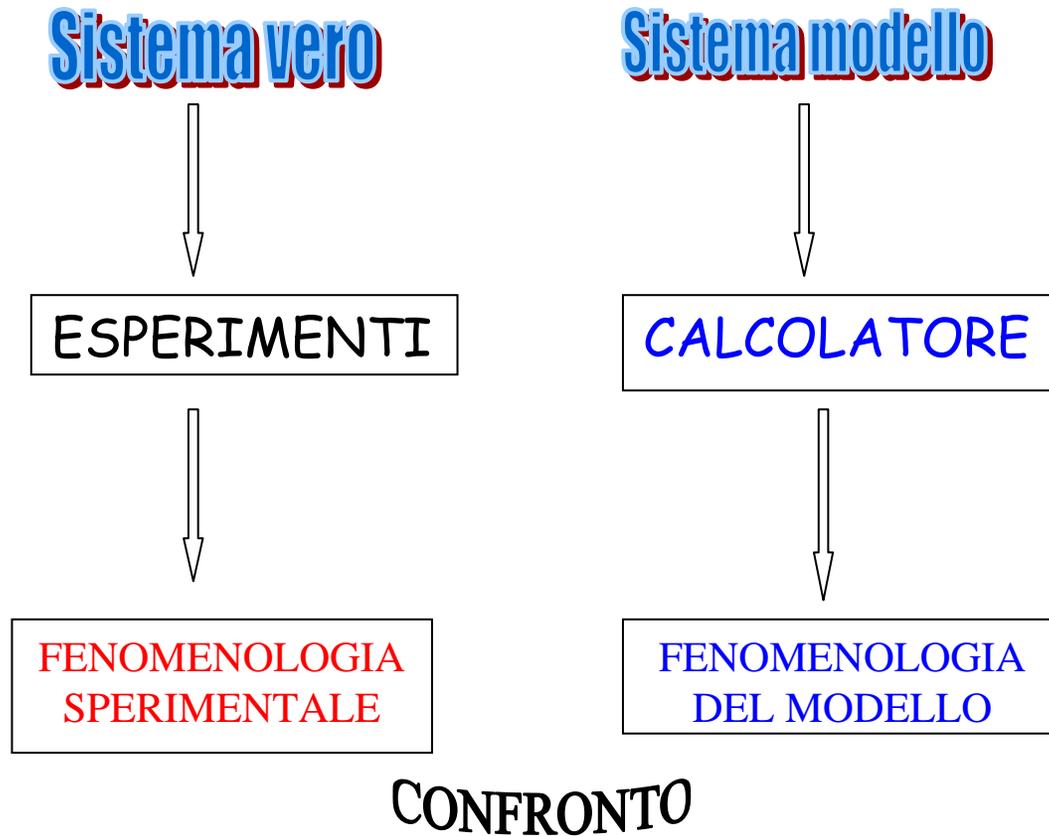
Dopo la guerra: calcoli numerici su MANIAC e MANIAC II

Metropolis and Ulam 1949 

Fermi, Pasta and Ulam 1955 

Metropolis et al. 1953 

# Simulazione di sistemi fisici



# Modello per un sistema fisico

- Il modello in analogia col sistema fisico è costituito da un numero molto grande di atomi che interagiscono fra loro
- per calcolare le proprietà del sistema occorre usare i metodi della Meccanica Statistica
- possiamo calcolare le proprietà medie del sistema, in particolare quelle di equilibrio e confrontarle con quelle del sistema vero
- poche volte i calcoli si possono fare in modo analitico

# Meccanica Statistica

Distribuzione statistica di Boltzmann

$$p(\alpha) = \frac{e^{-E(\alpha)/kT}}{Z(T)}$$

$$Z(T) = \sum_{\alpha} e^{-E(\alpha)/kT}$$

I valori medi si calcolano come

$$\langle A \rangle = \int d\alpha A(\alpha) p(\alpha)$$

# Stati del sistema

Ogni stato è caratterizzato da coordinate e impulsi delle particelle che lo compongono

$$\alpha = (r_1, r_2, \dots, r_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$$

- Come facciamo a generare una sequenza di stati per calcolare i valori medi ?
- Come facciamo a generarli in modo che siano distribuiti in modo *opportuno* ?

*Modo opportuno* vuol dire random ma con distribuzione alla Boltzmann

# Integrali statistici

Dal punto di vista numerico dobbiamo calcolare integrali a molte dimensioni del tipo

$$\int d\alpha A(\alpha) \frac{e^{-E(\alpha)/kT}}{Z}$$

con

$$\alpha = (r_1, r_2, \dots, r_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$$

Potremmo implementare una procedura M.C. ?

# Esempio: modello di Ising

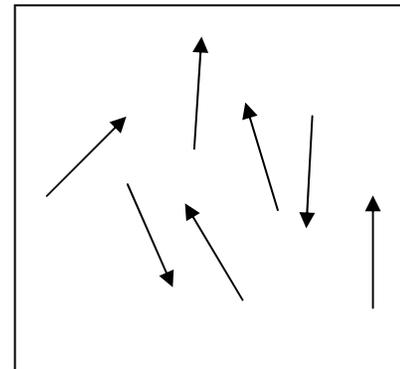
## Problema del ferromagnetismo

- alcune sostanze hanno la proprietà di acquistare una magnetizzazione, un momento di dipolo magnetico, quando immerse in un campo magnetico esterno (paramagneti)
- fra di esse alcune al di sotto di una certa temperatura rimangono magnetiche anche in assenza del campo esterno (magneti permanenti)

# Sostanze paramagnetiche

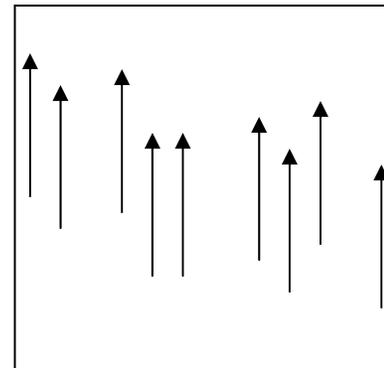
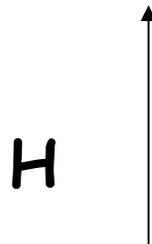
Nei materiali paramagnetici gli atomi possiedono un momento magnetico dovuto agli spin degli elettroni.

In condizioni normali questi momenti magnetici sono orientati casualmente in tutte le direzioni



$$M = \sum_i m_i = 0$$

In presenza di un campo esterno  $H$  si orientano nella direzione del campo



$$M = \sum_i m_i \neq 0$$

# Sostanze ferromagnetiche

Alcune sostanze hanno una magnetizzazione anche in assenza di un campo esterno e vengono chiamate ferromagnetiche.

Per queste sostanze esiste una temperatura  $T_C$  tale che

Per  $T > T_C$  sono paramagnetiche

Per  $T < T_C$  sono ferromagnetiche

Da cosa deriva il ferromagnetismo ?

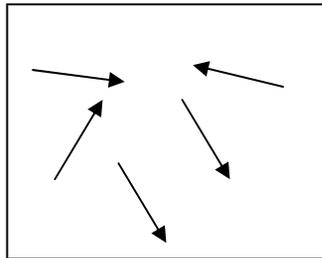
# Interazione di scambio

E' presente un'interazione fra i momenti magnetici atomici che favorisce l'allineamento

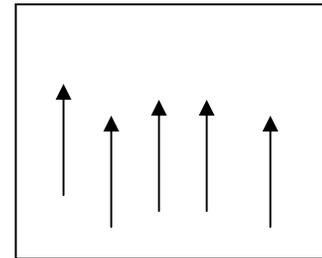
$$\text{Energia}(\uparrow\uparrow) < \text{Energia}(\uparrow\downarrow)$$

Questa interazione è chiamata di **scambio**. Se l'interazione di scambio è abbastanza forte riesce a contrastare l'effetto della temperatura che tende a disordinare i momenti magnetici.

$$T > T_C$$



$$T < T_C$$

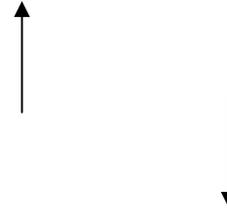


# Modello per un paramagnete o un ferromagnete

Modello molto semplice per studiare alcune caratteristiche essenziali del problema.

Modello  
di Ising

Ogni particella è dotata di uno spin che dà origine ad un momento magnetico. Lo spin può essere positivo o negativo



Fra due particelle abbiamo un potenziale  $J > 0$

$$\phi(s_1, s_2) = -J s_1 s_2 \begin{cases} = +J & \text{se } s_1 = -s_2 \\ = -J & \text{se } s_1 = s_2 \end{cases}$$

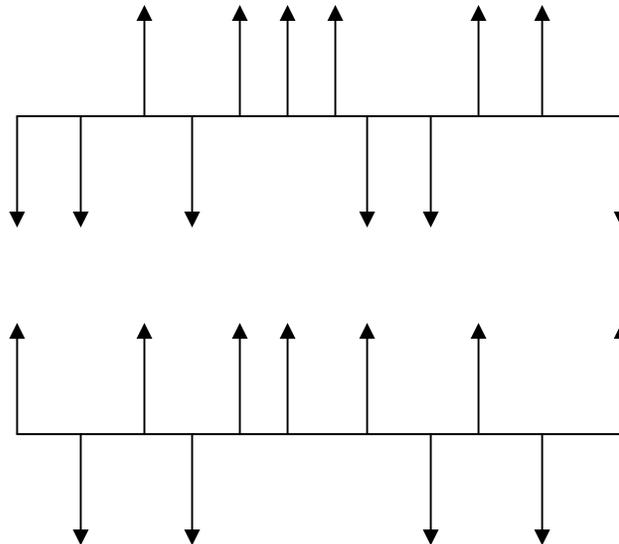
# Modello di Ising in 1 dimensione

Reticolo  
unidimensionale



$$H = -J \sum_i s_i s_{i+1} \quad s_i = \pm 1$$

Configurazioni possibili



# Magnetizzazione media

Catena di N particelle con la condizione periodica al contorno

$$s_{N+1} = s_1$$

Il modello di Ising in 1 dimensione può essere calcolato esattamente

Si può ricavare la magnetizzazione definita da

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i$$

come valor medio

$$\langle m \rangle = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \frac{e^{-E(\alpha)/kT}}{Z} \quad Z = \sum_{\alpha} e^{-E(\alpha)/kT}$$

# Calcolo con simulazione Monte Carlo

Come generare le varie configurazioni ?  $\alpha = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$

Algoritmo ideato da Metropolis

- genera stati random con distribuzione di Boltzmann
- nello stesso tempo equivale a calcolare l'integrale statistico con un importance sampling

$$\langle m \rangle = \int d\alpha m(\alpha) p_B(\alpha) \quad p_B(\alpha) = \frac{e^{-E(\alpha)/kT}}{Z}$$

# Importance sampling

Devo calcolare  $\langle m \rangle = \int d\alpha m(\alpha) p_B(\alpha)$       $p_B(\alpha) = \frac{e^{-E(\alpha)/kT}}{Z}$

Equivale a calcolare

$\int d\alpha m(\alpha)$  con  $\alpha$  distribuito secondo  $p_B(\alpha)$

**Se come distribuzione scegliamo proprio quella di Boltzmann**

$$\langle m \rangle = \int d\alpha_B m(\alpha_B) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m(\alpha_i)$$

media su  $n$  stati generati secondo Boltzmann

# Importance sampling alla Metropolis

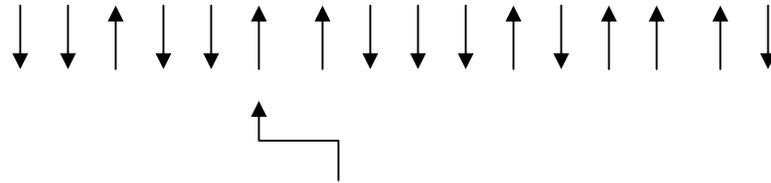
$$\langle m \rangle = \int d\alpha_B m(\alpha_B) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m(\alpha_i)$$

Come generiamo le configurazioni  $\alpha_i$  distribuite secondo Boltzmann?

Si può fare con l'algoritmo di Metropolis

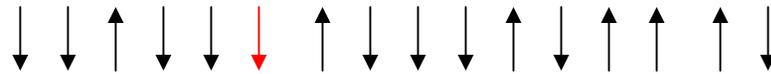
# Algoritmo alla Metropolis (1)

$\alpha_1$



si sceglie a caso uno degli spin e si ruota

$\alpha_2$



$\alpha_1$



$E_1$

$\alpha_2$



$E_2$

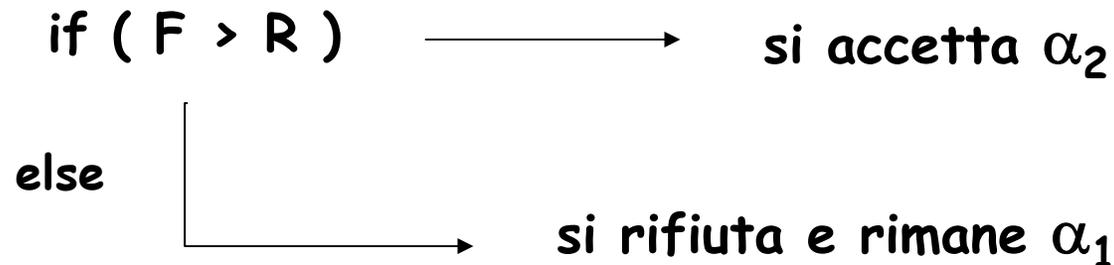
$$\Delta E = E_2 - E_1$$

# Algoritmo alla Metropolis (2)

Si calcola quindi

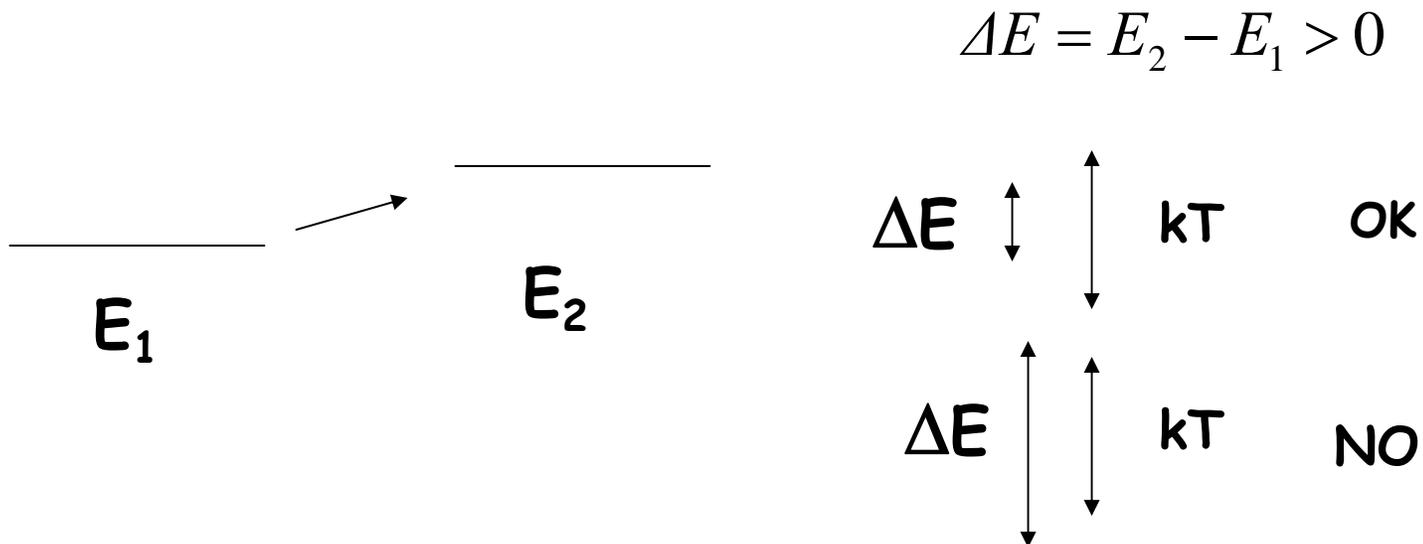
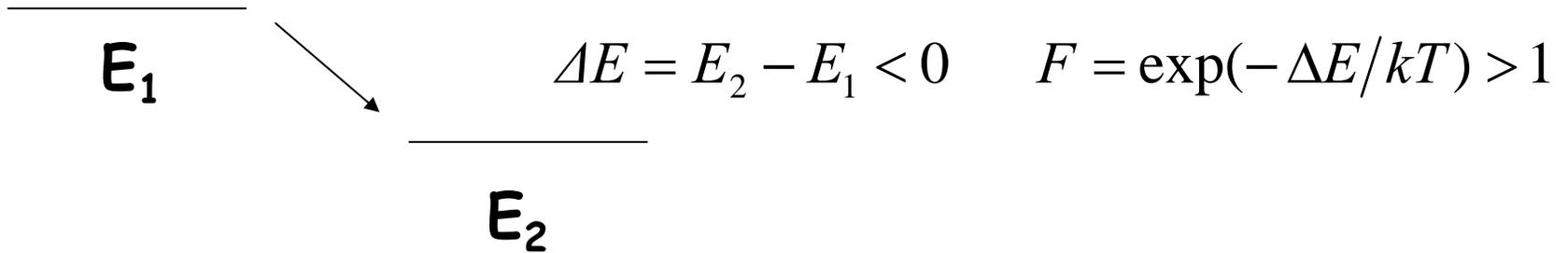
$$F = \exp(-\Delta E/kT) \quad \Delta E = E_2 - E_1$$

si estrae un numero random  $0 \leq R \leq 1$



Si ricomincia ruotando un altro spin

# Interpretazione fisica



# Interpretazione statistica

Con l'algoritmo di Metropolis si dimostra che le configurazioni generate sono distribuite secondo la distribuzione statistica di Boltzmann

$$p(\alpha) = \frac{e^{-E(\alpha)/kT}}{\sum_{\alpha} e^{-E(\alpha)/kT}}$$

# Nello spazio delle fasi

$x$  configurazione del sistema

per esempio:  $x = (s_1, s_2, \dots, s_N)$

Con l'algoritmo di Metropolis si genera un random walk nello spazio delle fasi

$$x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3 \rightarrow \dots$$

Determinato dalla probabilità di transizione  $w(1 \rightarrow 2)$

ad ogni passo si perde memoria del passo precedente (processo alla Markov):

$$w(1 \rightarrow 2) \quad w(2 \rightarrow 3) \dots$$

# Probabilità di transizione

probabilità per unità di tempo che il sistema da uno stato 1 passi ad uno stato 2

$$w_{12} = w(1 \rightarrow 2)$$

Nell'algoritmo di Metropolis se  $\Delta E_{12} = E_2 - E_1$

$$w_{12} = \begin{cases} 1 & \text{se } \Delta E_{12} < 0 \\ \exp(-\Delta E_{12})/kT & \text{se } \Delta E_{12} > 0 \end{cases}$$

# Bilancio dettagliato

Si può dimostrare che all'equilibrio un sistema deve soddisfare la condizione di bilancio dettagliato

$p_i$  probabilità dello stato  $i$ -simo

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

Se la probabilità  $p_i$  è quella di Boltzmann abbiamo

$$w_{ij} / w_{ji} = \exp(-\Delta E_{ij} / kT)$$

Questa condizione è soddisfatta da Metropolis

Essa assicura la reversibilità del processo

# Simulazione in 1 DIM del modello di Ising

$N=200$  dipoli ( $2^N$  possibili configurazioni!)

Condizioni periodiche

$$E = -J \sum_i s_i s_{i+1} \quad m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i$$

$J=1$ ,  $KT=100$ , iniziare con una configurazione random

Prendere uno spin a caso

Invertire lo spin e calcolare energia della nuova configurazione

Se è minore della precedente si accetta

Se è maggiore allora si estrae un numero a random distribuito uniformemente tra 0 e 1,  $r$ , e si calcola  $P = \exp(-\Delta E/KT)$

Se  $P$  maggiore uguale a  $r$  si accetta senò si rifiuta (variante dell'algoritmo di rejection alla von Neumann).

# Simulazione in 1 DIM del modello di Ising

Calcolare  $E(T)$  e  $M(T)$  per particella e verificare che l'energia media calcolata in funzione della temperatura segua la soluzione esatta analitica.

Le medie si calcolano mediando i valori calcolati alla fine di ogni montecarlo step. Prima equilibrare, poi calcolare le medie.

Per il calcolo di  $C_V(T)$  calcolare Energia media e energia media al quadrato totale (non per particella) e poi:

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{(K_B T)^2}$$

Anche in questo caso verificare che il risultato numerico segua la soluzione analitica

# Calore specifico

In un ensemble canonico:  $N, V, T$

$$\langle E \rangle = \frac{\int d\alpha E(\alpha) e^{-\beta E(\alpha)}}{\int d\alpha e^{-\beta E(\alpha)}} \quad \langle E^2 \rangle = \frac{\int d\alpha E^2(\alpha) e^{-\beta E(\alpha)}}{\int d\alpha e^{-\beta E(\alpha)}}$$

$$Z = \int d\alpha e^{-\beta E(\alpha)}$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)_{N,V} \quad \langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \left( \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right)_{N,V}$$

# Calore specifico e fluttuazione dell'energia

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \left( \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \right)_{N,V} = - \left( \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \right)_{N,V}$$

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{N,V}$$

$$\frac{C_V}{k} = \frac{1}{(kT)^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

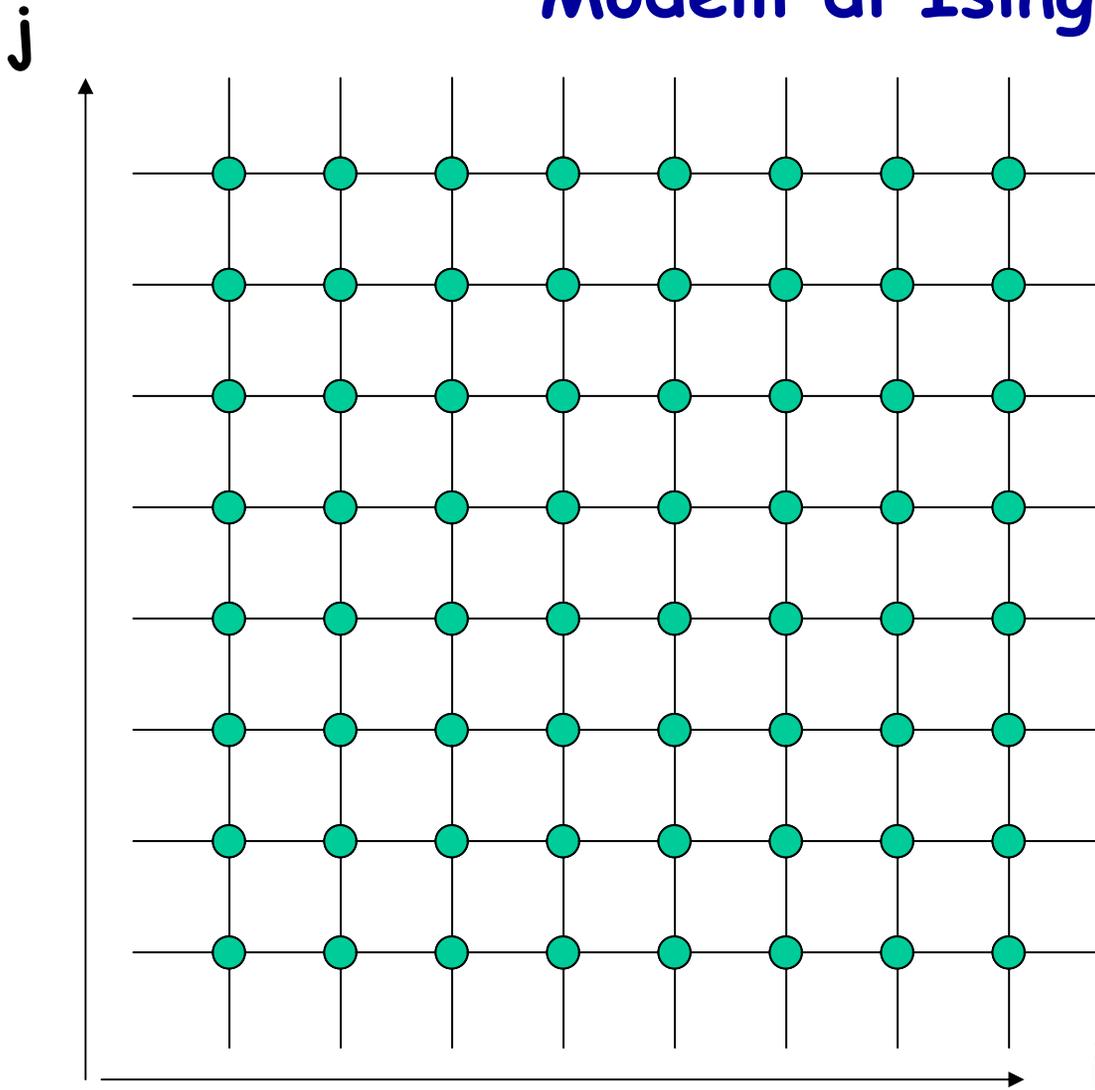
# Simulazione in 1 DIM del modello di Ising

Aggiungere il campo magnetico modificando l'Hamiltoniana:

$$E = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - H \sum_{i=1}^N S_i$$

Verificare che la soluzione numerica segua l'andamento teorico della soluzione esatta.

# Modelli di Ising in 2D



Ogni sito è  
occupato da  
uno spin

$$s_{ij} = \pm 1$$

Condizioni  
periodiche al  
contorno

# Ferromagnetismo del modello

Si dimostra che in 1 dimensione il modello è paramagnetico ma non ferromagnetico (Ising)

$$M(T, H \rightarrow 0) \rightarrow 0 \quad \text{per ogni } T$$

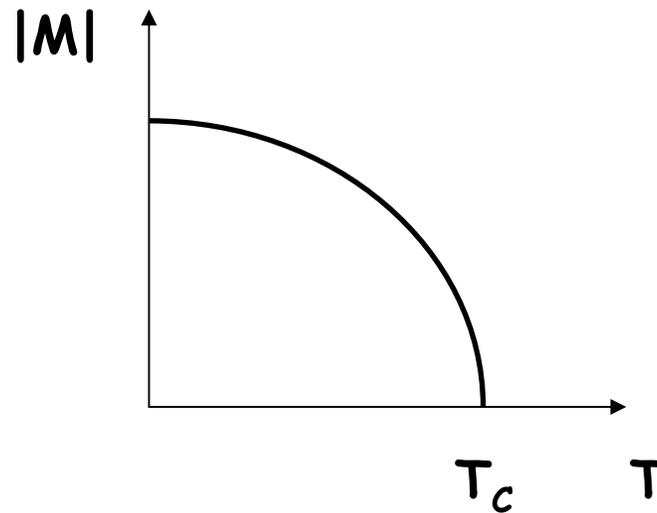
In dimensione 2 è dimostrato invece esattamente che esiste una fase ferromagnetica (Onsager)

$$M(T, H \rightarrow 0) \neq 0 \quad \text{per } T < T_C$$

E' vero anche in dimensione 3

# Ferromagnetismo in 2D

Esiste una magnetizzazione spontanea per  $T < T_c$



Si trova che  $\frac{kT_c}{J} = 2.269$

# Simulazione in 2D

Parametro in input la temperatura in unità di  $J/k$

Si può partire da:

- a) Una configurazione random
- b) Una configurazione ordinata
- c) Una configurazione precedente

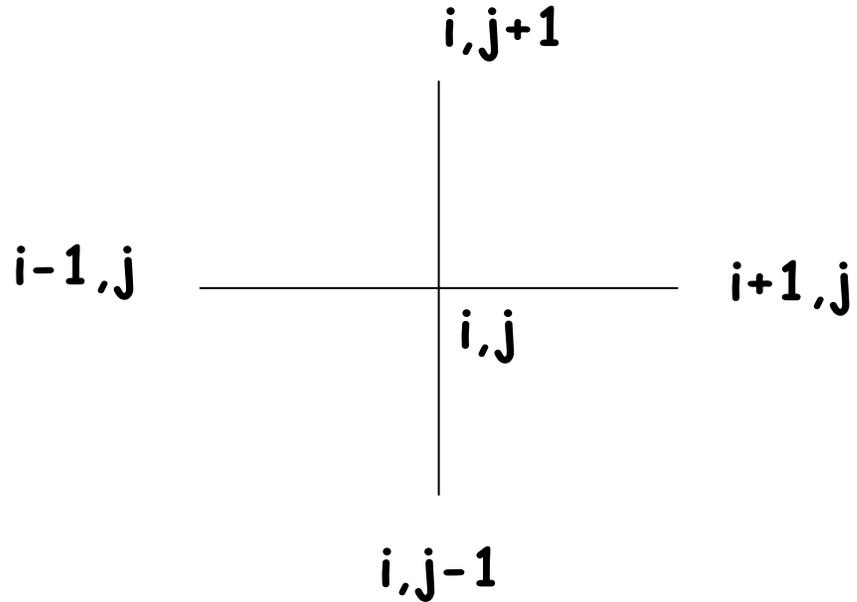
Partendo da b)

Per  $T > 2.269$  ci aspettiamo che il sistema vada in una fase disordinata

Per  $T < 2.269$  ci aspettiamo che il sistema rimanga in una fase ordinata

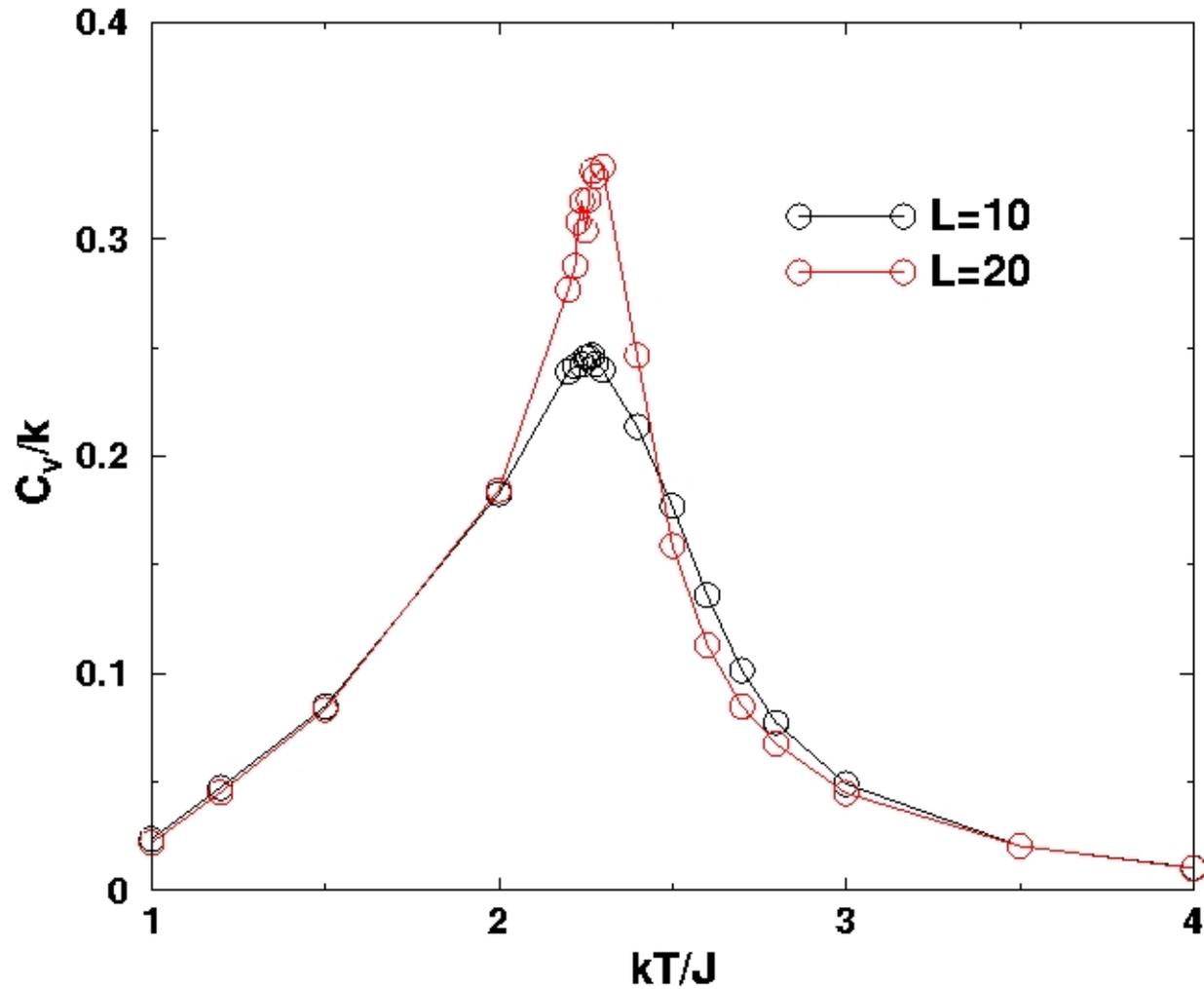
# Energia in 2D

Calcolo dell'energia



$$\begin{array}{cccccccccc} & + & & & - & & & - & & \\ + & + & + & + & + & + & + & + & - & \Lambda \\ & + & & & + & & & + & & \end{array}$$

# Modello di Ising in 2D



```

iaccept = 0
do 1 ics = 1,mcsmax
c      start m.c. step (typewriter)
      mcs = mcs + 1
      iprint = iprint + 1
      iconf = iconf + 1
      do 2 i = 1,lat
        do 2 j = 1,lat
          ici = ispin (i,j)
          iet = ispin (ip(i),j) + ispin (im(i),j) +
&           ispin (i,ip(j)) + ispin (i,im(j))
          ien = ici*iet
          call rmar(rr)
          if ( rr. lt. w(ien) ) then
            iaccept=iaccept+1
            ispin (i,j) = - ici
            msp = msp - 2 * isign (1,ici)
            isume = isume + iet*(ici - ispin(i,j))
          end if
2      continue

```

# Transizioni di fase

Il problema delle transizioni di fase è uno dei più affascinanti e "challenging" della meccanica statistica.

In fisica una transizione di fase è la trasformazione di un sistema termodinamico da una fase ad un'altra. La caratteristica distintiva è il cambiamento improvviso e sostanziale di una o più quantità fisiche in corrispondenza di un piccolissimo cambiamento di una variabile termodinamica (per es. la temperatura).

Esempi di transizioni di fase sono: transizioni tra fase solida, liquida e gassosa. Transizione tra fase ferromagnetica e paramagnetica al punto di Curie. La superconduttività presente in certi metalli sotto una temperatura critica. La condensazione di Bose-Einstein etc.

# Transizioni di fase

**Definizione:** matematicamente una transizione di fase è un punto singolare della funzione di partizione  $Z(V,N,T)$  e un punto di transizione di fase è definito come un punto di non analiticità dell'energia libera canonica ( $f = \log Z / N$  per  $N$  e  $V$  che vanno ad infinito e  $V/N$  fisso) o del gran potenziale gran canonico. Nota: una funzione è non analitica se non può essere espansa in serie di Taylor.

**Schema di classificazione di Ehrenfest:** le transizioni di fase sono raggruppate secondo il grado di non analiticità coinvolto.

**Transizioni di fasi del I ordine:** presentano una discontinuità nella derivata prima dell'energia libera rispetto ad una variabile termodinamica. Le transizioni solido/liquido/gas sono del primo ordine perchè la pressione cambia con discontinuità attraverso la transizione e la pressione è la derivata prima dell'energia libera rispetto a  $V$ .

# Transizioni di fase

**Transizioni di fase del II ordine:** hanno una discontinuità nella derivata seconda dell'energia libera. Il nostro gas di spin sul reticolo esibisce in due dimensioni una transizione di fase del II ordine. Infatti abbiamo visto che  $M$ , che è la derivata prima dell'energia libera rispetto ad  $H$ , sale con continuità da zero sotto  $T_C$ .  $C_v$ , che è proporzionale alla derivata seconda dell'energia libera rispetto a  $T$ , a campo nullo diverge da entrambi i lati di  $T_c$ .

Non sono note transizioni di fase ad ordini superiori.

# Transizioni di fase del II ordine: modello di Ising

Il modello di Ising è il modello più semplice che subisce una transizione di fase.

Il primo lavoro è sostanzialmente la tesi di dottorato di Ising [Ising E., *Z. Physik* **31**, 253 (1925)] Egli risolse esattamente il modello 1Dim e non trovò transizioni di fase, con grande delusione, visto che sperava di riprodurre i risultati di un ferromagnete. Fornì poi argomenti per escludere la transizione in 2 e 3 dimensioni e quindi per molto tempo il modello fu abbandonato.

Fu riconsiderato negli anni '30 da Bragg e Williams, Bethe, Peierls e altri, ma principalmente per mimare il comportamento di leghe metalliche binarie piuttosto che ferromagneti.

# Transizioni di fase del II ordine: modello di Ising

Nel 1936 Peierls diede una prova dell'esistenza del ferromagnetismo nel modello bidimensionale che era sbagliata! L'errore fu notato solo molti anni dopo da Fisher e Sherman.

Nel 1941 Kramers e Wannier diedero una svolta al problema formulando il modello come un problema matriciale e da considerazioni di simmetria riuscirono a localizzare il punto critico nel modello 2Dim. Loro però non risolsero il problema completamente e la soluzione completa si deve ad Onsager

La soluzione di Onsager è stata la prima dimostrazione dell'esistenza di una transizione di fase fatta a partire dalla funzione di partizione e solo da quel momento cominciò a prender piede l'idea che la funzione di partizione conteneva tutta l'informazione necessaria alla transizione di fase.

# Transizioni di fase del II ordine: modello di Ising

**Universalità degli indici critici:** nelle transizioni di fase del secondo ordine è possibile definire degli esponenti critici che rappresentano la potenza con la quale divergono al punto critico le quantità come il calore specifico.

Gli esponenti critici non sembrano dipendere dal particolare sistema studiato. Per esempio il calore specifico  $c_v$  va come

$(1-T/T_c)^\alpha$  con  $0_{\log} < \alpha < 0.2$  sia per sistemi fluidi che magnetici.