

Metodo Monte Carlo per lo studio numerico del modello di Ising in 3D

di Armanini Elisabetta e Piazza Irene

14 Gennaio 2021

Il metodo Monte Carlo

Il termine Monte Carlo indica un serie di tecniche e algoritmi che permettono di simulare un processo fisico numericamente. L'obiettivo del metodo Monte Carlo è quello di generare una successione casuale di stati nello spazio delle fasi, ad esempio per un sistema di meccanica statistica, distribuiti secondo una probabilità

$$P(x \in S) = \frac{1}{Z(\beta)} \int_{x \in S} e^{-\beta H(x)} dx$$

dove $Z(\beta)$ è la funzione di partizione che assicura la normalizzazione della distribuzione. In meccanica statistica, grazie all'ipotesi ergodica di Gibbs, la media temporale di una quantità $f(q, p)$

$$\overline{f(q, p)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int f(q(t), p(t)) dt$$

Il metodo Monte Carlo

si calcola come un integrale nello spazio delle fasi

$$\langle f(q, p) \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \int d^n q d^n p f(q, p) e^{-\beta H(q, p)}$$

La strategia del metodo Monte Carlo è totalmente opposta: si calcolano le medie come medie temporali, ma senza dover risolvere numericamente le equazioni di Newton.

Infatti, basta scegliere un qualunque processo dinamico che abbia come distribuzione di probabilità stazionaria la distribuzione di Gibbs. Nel nostro caso utilizziamo un metodo particolare chiamato algoritmo di Metropolis, per studiare il modello di Ising.

Il modello di Ising

Il modello di Ising è un modello fisico della meccanica statistica ideato per descrivere il magnetismo nella materia, in particolare la transizione tra ferromagnetismo e paramagnetismo che sono proprietà legate alla presenza di un momento di dipolo magnetico permanente associato agli atomi. La proprietà principale che differenzia i materiali ferromagnetici da quelli paramagnetici consiste nella permanenza di una magnetizzazione totale del materiale, detta magnetizzazione residua, anche quando dopo aver applicato un campo magnetico esterno lo si riporta a zero. E' possibile eliminare la magnetizzazione residua innalzando la temperatura sopra la cosiddetta temperatura critica, oltre la quale il materiale si comporta come un paramagnete.

Il modello di Ising

Si considera un sistema di N siti fissi che formano un reticolo d -dimensionale, con condizioni al contorno periodiche. Ad ogni sito viene associata una variabile di spin s_i con $i = (1, \dots, N)$ che può assumere il valore $+1$ o -1 . L'energia del sistema è data da:

$$H(s_1, \dots, s_N) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

dove nella prima sommatoria si considera che ogni spin può interagire solo con gli spin più vicini (primi vicini). Invece J è una costante, mentre B è il campo magnetico esterno.

La funzione di partizione del sistema

$$Z_N(H, T) = \sum_{s_1=-1}^1 \sum_{s_2=-1}^1 \dots \sum_{s_N=-1}^1 e^{-\beta H(s_1, \dots, s_N)}$$

Conoscendo Z_N è possibile ricavare altre variabili termodinamiche:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad \text{Energia media}$$

$$\langle C \rangle = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2} \quad \text{Calore specifico medio}$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial B} = \sum_i^N s_i \quad \text{Magnetizzazione media}$$

$$\langle \chi \rangle = \frac{\partial M}{\partial B} = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad \text{Suscettività media}$$

Le proprietà del modello vengono studiate attraverso l'algoritmo di Metropolis utilizzando il linguaggio Matlab.

Simulazione Matlab nel caso 3-dimensionale

Suddivisione in reticoli

Il reticolo in 3 dimensioni è costituito da $(2N)^3$ spin e la proposta del Metropolis deve essere fatta per ogni spin del reticolo, essendo $N = \frac{L}{2}$, con L lunghezza del lato del reticolo.

Risulta dunque conveniente dividere il reticolo in 8 sottoreticoli, in base al valore delle coordinate. Si ha il sottoreticolo dei pari-pari-pari "eee", dei pari-pari-dispari "eeo" e così via. Vengono poi rinominate le coordinate del reticolo per sottoreticoli, ad esempio, nel sottoreticolo eee si hanno i punti di coordinate $(2, 2, 2)$, $(2, 2, 4)$, $(2, 4, 4)$ ecc che vengono rinominati come $(1, 1, 1)_{eee}$, $(1, 1, 2)_{eee}$, $(1, 2, 2)_{eee}$ e così via per tutti gli altri punti e sottoreticoli.

Simulazione Matlab nel caso 3-dimensionale

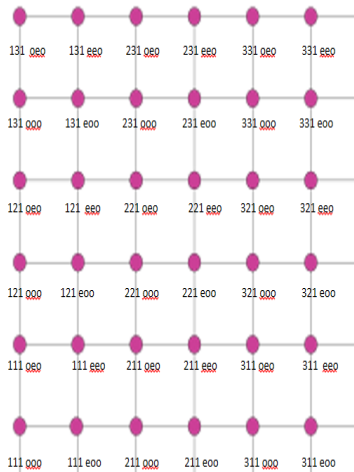
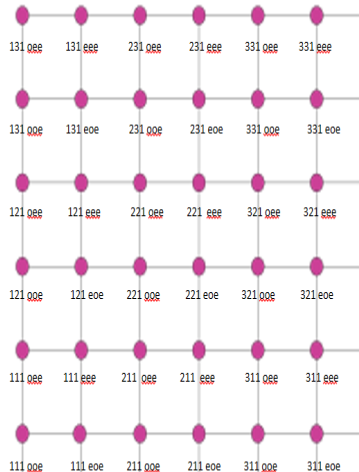
Suddivisione in reticoli

In questo modo risulta semplice andare a definire i primi vicini: ogni spin ha 6 primi vicini, dato che le condizioni al contorno sono periodiche, di cui 4 si trovano sullo stesso piano, quindi allo stesso valore di z . Dopo aver definito i vettori

$$e2o = [2:N, 1];$$

$$o2e = [N, 1:N-1];$$

si trovano i primi vicini per i vari sottoreticoli.

Z DISPARI ($z=1$)Z PARI ($z=2$)

Nelle immagini vi sono i reticoli utilizzati per l'individuazione dei primi vicini.

Simulazione Matlab nel caso 3-dimensionale

Algoritmo di Metropolis

Si procede poi con la realizzazione del codice per la termalizzazione e l'evoluzione del sistema di spin.

Si utilizza il metodo di Metropolis per realizzare un processo di Markov con una distribuzione di probabilità stazionaria assegnata, nel nostro caso la distribuzione di Gibbs $P(\omega) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\omega)}$. Si parte da una configurazione del sistema di spin arbitraria. Nel nostro caso, partiamo da β piccole ($\approx 0,05$), per cui gli spin sono distribuiti a caso con valori $+1$ e -1 , a causa dell'agitazione termica:

```
%inizializzazione degli spin del reticolo nel caso  
%del sottoreticolo pari-pari-pari  
S.eee = sign(randn(N,N,N));
```

Simulazione Matlab nel caso 3-dimensionale

Algoritmo di Metropolis

Nel ciclo di termalizzazione e di evoluzione si visitano tutti i siti del reticolo e si propone la mossa $s_i = -s_i$, la quale viene accettata o rifiutata in base alla variazione dell'energia $\beta\delta E$.

$$\beta\delta E = \beta(E_{fin}^i - E_{iniz}^i) = 2J\beta \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + 2B\beta s_i$$

Simulazione Matlab nel caso 3-dimensionale

Algoritmo di Metropolis

Volendo termalizzare e far evolvere il sistema in una configurazione data dalla distribuzione di probabilità di Gibbs, si propone di accettare la mossa con probabilità

$$P_{accept} = \min(1, e^{-\beta\delta E})$$

mentre

$$P_{reject} = 1 - P_{accept}$$

Dunque, se $e^{-\beta\delta E} > 1$, sicuramente la mossa viene accettata, dato che se $\beta\delta E < 0$, aumenta il peso statistico della configurazione. La mossa viene però accettata anche nel caso in cui $\beta\delta E > 0$, con probabilità $e^{-\beta\delta E}$.

Simulazione Matlab nel caso 3-dimensionale

Si sceglie con la funzione *rand*, per ogni punto del reticolo, un numero r a caso tra 0 e 1 e, se r risulta minore di $e^{-\beta\delta E}$, allora la mossa viene accettata, altrimenti si effettua la transizione nulla. Per esempio:

%Metropolis update per gli spin PARI-PARI-DISPARI eeo

```
NN = S.eeo + S.oeo + S.eeo(:,e2o,:) + S.oeo(e2o,,:,:) +  
S.eee + S.eee(:, :, o2e);
```

```
r = rand(N,N,N);
```

```
accept = r < exp(-2*b.*(NN+B).*S.eeo);
```

```
S.eeo(accept) = -S.eeo(accept);
```

Simulazione Matlab nel caso 3-dimensionale

Nel nostro caso, poniamo il parametro che quantifica la forza dell'interazione tra spin $J = 1$. In seguito si calcolano le quantità che ci interessano per studiarne gli andamenti in funzione di β facendo girare il programma con i seguenti parametri:

```
'Dimensione del reticolo N' = '4, 8, 16, 32'  
'Campo magnetico B' = '0'  
'Cicli di evoluzione sweeps' = '1.0e+5'  
'Cicli di termalizzazione' therm = '1.0e+3'  
'Passo di campionamento' skip = '500'  
'\beta_{min}' bmin = '0.05'  
'Passo di \beta' delta = '0.01'  
'\beta_{max}' bmax = '0.5'
```

Magnetizzazione media

$$\frac{\langle M \rangle}{N} = \frac{\langle \sum_i s_i \rangle}{N}$$

dove N è il numero totale di siti del reticolo.

La magnetizzazione media $\langle M \rangle = 0$ per β piccoli ma, ad un certo valore critico, chiamato β_c , la magnetizzazione risulta non nulla e, in modulo, cresce fino a 1 per grandi valori di β . Si verifica dunque una rottura spontanea di simmetria, e lo scopo è determinare con una certa precisione il valore di β_c , di cui non si conosce il valore esatto. Da alcuni studi (Butera e Comi - PRB (62) 2000), il valore è stato stimato a $\beta_c = 0,22165\dots$

Ising3D Metropolis - Magnetizzazione media per spin

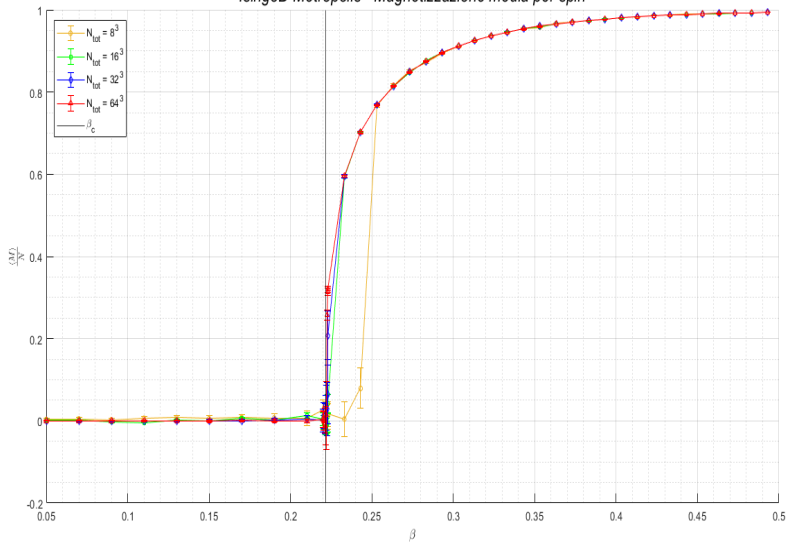


Figura: Magnetizzazione media per spin

Ising3D Metropolis - Magnetizzazione media per spin

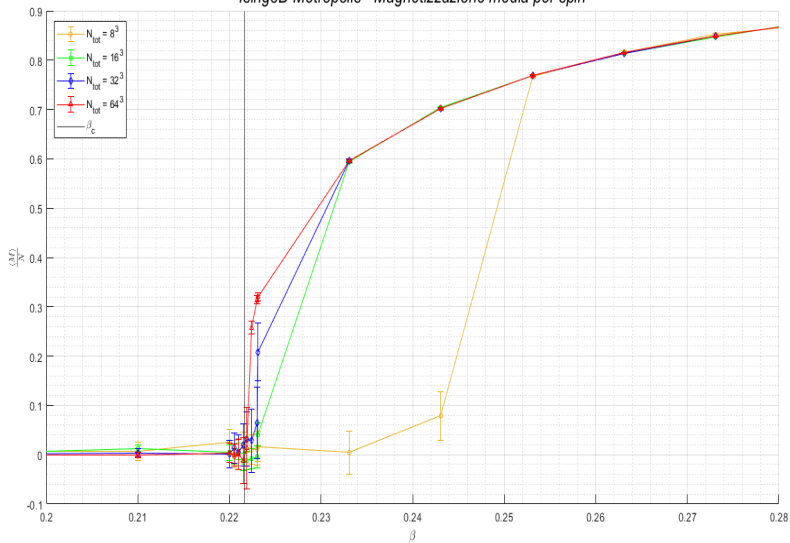


Figura: Magnetizzazione media per spin vicino a β_c

Suscettività magnetica media

$$\frac{\langle \chi \rangle}{N} = \frac{1}{N} \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

Sapendo che $\langle M \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = \langle \sum_i s_i \rangle$ e $\langle M^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} = \langle (\sum_i s_i)^2 \rangle$ e applicando le regole di derivazione.

La suscettività magnetica media per spin va a zero sia per β grandi che per β piccoli.

Vicino alla β_c la suscettività media diverge, e il picco risulta tanto più elevato quanto più la dimensione del reticolo è elevata.

Ising3D Metropolis - Suscettività media per spin

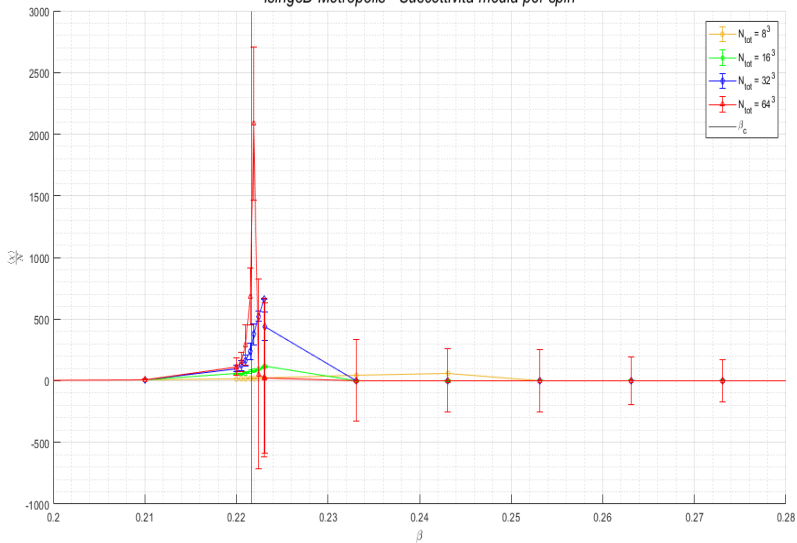


Figura: Suscettività media per spin

Ising3D Metropolis - Suscettività media per spin in scala log

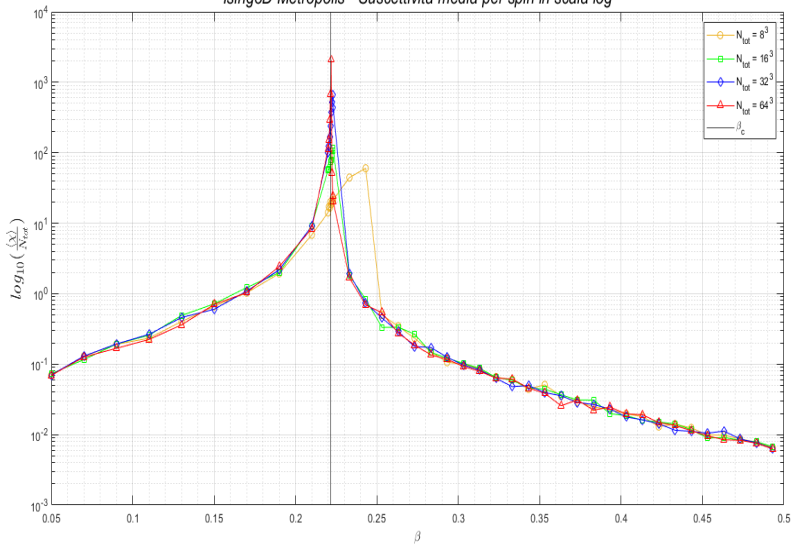


Figura: Suscettività media per spin in scala logaritmica

Energia media per spin

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = -\frac{\langle \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \rangle}{N} = -\frac{\langle \sum_{i,j} s_i s_j \rangle}{2N}$$

Studiandone gli andamenti, ci aspettiamo che

$$\begin{cases} \frac{\langle E \rangle}{N} \rightarrow 0 & \text{per } \beta \rightarrow 0 \\ \frac{\langle E \rangle}{N} \rightarrow -3 & \text{per } \beta \rightarrow \infty \end{cases}$$

Infatti, per valori piccoli di β gli spin sono disposti casualmente e dunque in media l'energia è nulla, mentre per β grandi, $-\langle \sum_{i,j} s_i s_j \rangle = -6N$, dato che gli spin sono tutti allineati e $s_i s_j = 1$ ed ogni spin ha 6 primi vicini. Dividendo per $2N$ si ottiene il risultato scritto sopra.

Ising3D Metropolis - Energia media per spin

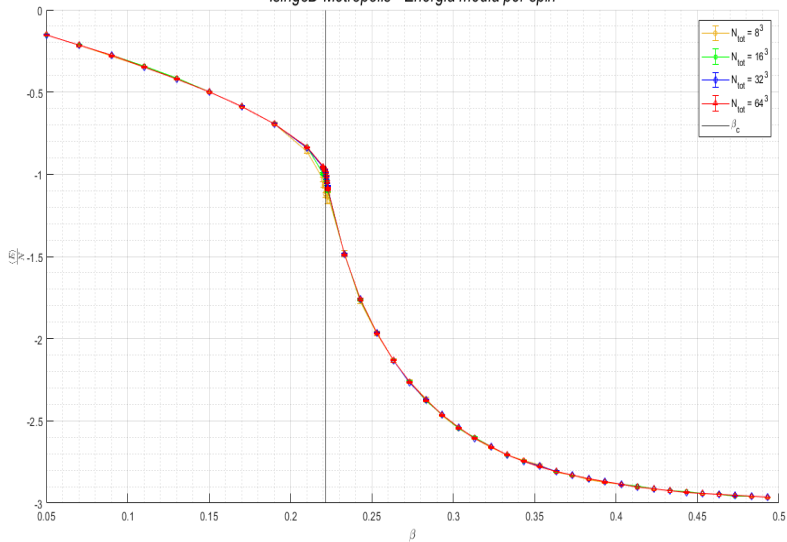


Figura: Energia media per spin

Calore specifico medio per spin

$$\frac{\langle C \rangle}{N} = \frac{1}{N} \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{N k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

Avendo posto $k_B = 1$, ricordando che $\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\langle \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \rangle$ e $\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = \langle (-\sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j)^2 \rangle$ e applicando le regole di derivazione.

Anche il calore specifico medio, così come la suscettività, diverge vicino alla β_c e il valore di $\langle C \rangle$ nel picco cresce con la dimensione del reticolo.

Ising3D Metropolis - Calore specifico medio per spin

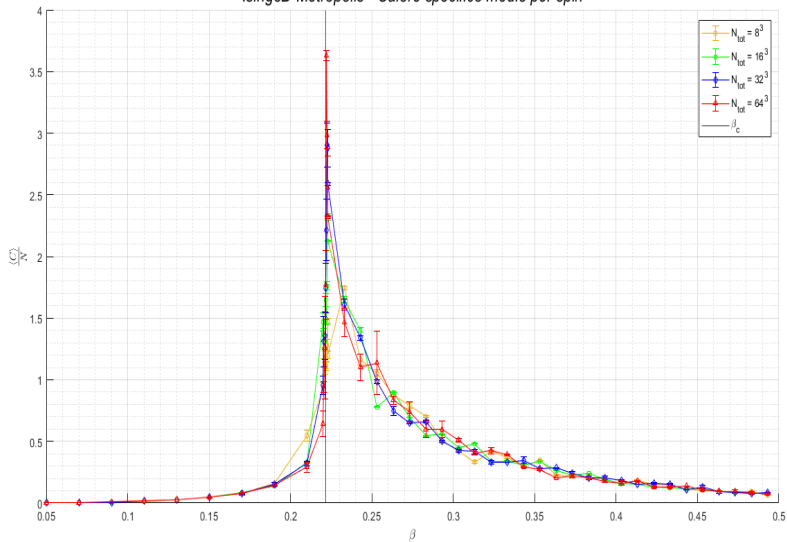


Figura: Calore specifico medio per spin

Dall'osservazione degli andamenti delle quantità calcolate attraverso la simulazione, è possibile determinare la temperatura critica del sistema.

Poichè le simulazioni vengono fatte utilizzando dimensioni del reticolo finite vi è un errore nella determinazione della temperatura critica, che viene ridotto imponendo condizioni al contorno periodiche e aumentando il numero di spin del reticolo.

Determinazione della β_c

Dai grafici risulta evidente, infatti, che aumentando il valore di N_{tot} , il fenomeno della magnetizzazione spontanea avviene sempre più nei pressi della β_c teorica e analogamente i picchi della suscettività o del calore specifico si spostano verso il valore teorico.

Da queste considerazioni, le temperature critiche per le diverse quantità nel caso in cui $N_{tot} = 64^3$ sono i valori più precisi che abbiamo potuto ottenere dalle simulazioni in tempi di calcolo ragionevoli:

Quantità	β_c
$\langle M \rangle$	$\beta_c = 0,2220$
$\langle \chi \rangle$	$\beta_c = 0,2219$
$\langle C \rangle$	$\beta_c = 0,2219$

Determinazione della β_c

Cumulante di Binder

Per determinare il valore della β_c più correttamente, e confrontarlo con quello tabulato, utilizziamo un parametro chiamato cumulante di Binder, definito come

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}$$

Se si calcola U per diverse dimensioni del reticolo, si ha che, alla β_c , U assume lo stesso valore. Graficando, dunque, per diversi valori di N_{tot} , U in funzione di β , si può avere una stima della β_c .

Ising3D Metropolis - Cumulante di Binder

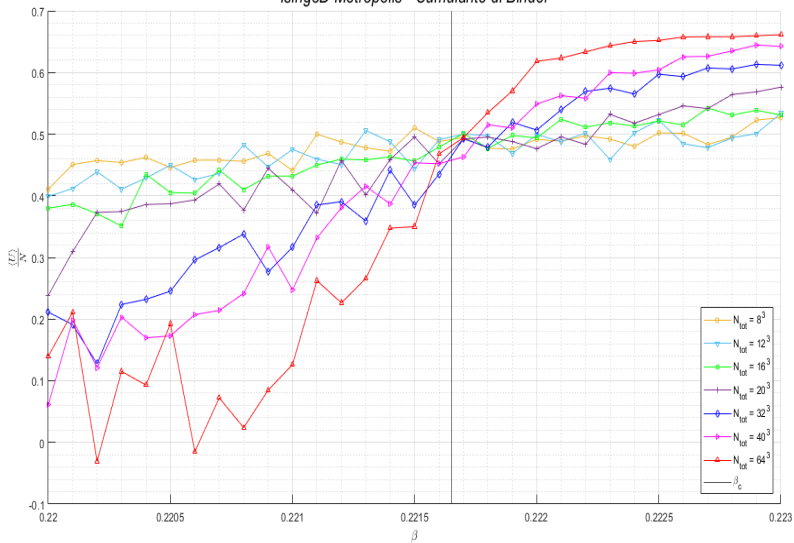
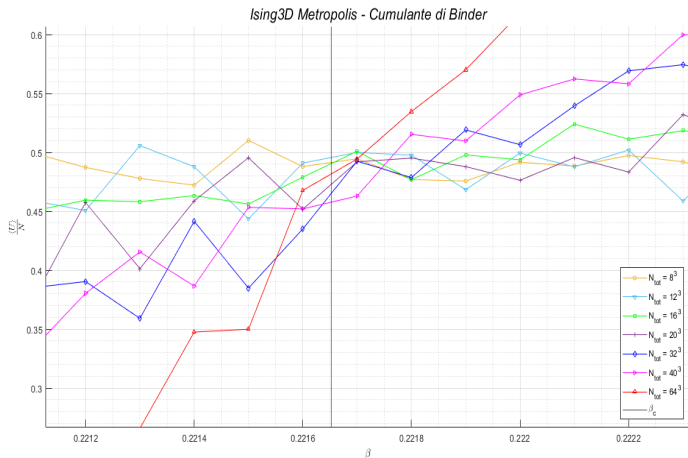


Figura: Cumulante di Binder



Nella zona della β_c si osserva che cumulanti hanno valori molto vicini tra di loro nella zona $\beta = (0, 2217 \pm 0, 0001)$: il valore ottenuto è consistente con il dato tabulato della β_c .

Determinazione della β_c

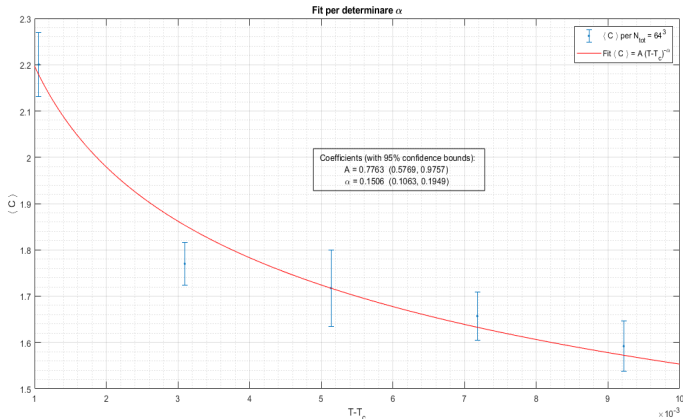
Esponenti critici

Vicino alla β critica, si osserva che le quantità termodinamiche hanno un andamento a potenza, che viene descritto e parametrizzato teoricamente da quelli che sono chiamati esponenti critici. Ad ogni quantità è associato un esponente critico, che descrive il suo andamento vicino alla T_c .

Esponente	Andamento	Condizione
α	$\langle C \rangle \sim T - T_c ^{-\alpha}$	$B = 0$
β	$\langle M \rangle \sim (T_c - T)^\beta$	$T < T_c, B = 0$
γ	$\langle \chi \rangle \sim T - T_c ^{-\gamma}$	$B = 0$

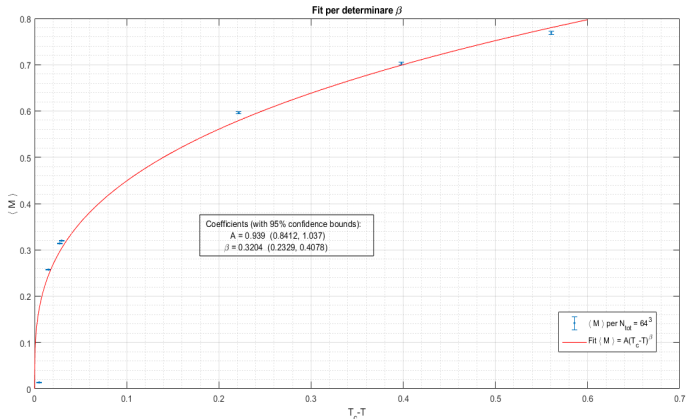
Per il modello di Ising in 3D, gli esponenti critici non sono noti con precisione, ma vengono determinati attraverso diverse tecniche, tra cui la simulazione MonteCarlo. I valori ottenuti sono $\alpha \approx 0,12$, $\beta \approx 0,31$ e $\gamma \approx 1,25$. Si prova a determinare il valore degli esponenti critici, utilizzando i dati ottenuti per $N_{tot} = 64^3$.

Per determinare α si fitta il calore specifico medio per spin vicino alla $T_c = 4,5116$ in funzione di $T - T_c$ per $T > T_c$:



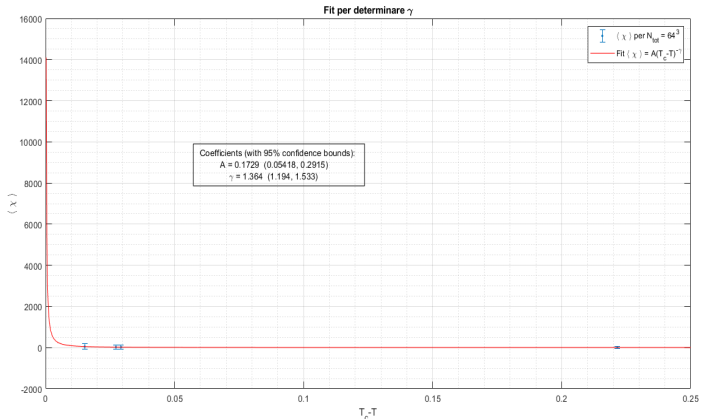
Si ottiene $\alpha = (0,15 \pm 0,04)$ che è consistente con il valore tabulato.

Per determinare β si fitta la magnetizzazione media per spin vicino alla T_c in funzione di $T_c - T$ per $T < T_c$:



Si ottiene $\beta = (0,32 \pm 0,09)$ che è consistente con il valore tabulato.

Per determinare γ si fitta la suscettività media per spin vicino alla T_c in funzione di $T_c - T$ per $T < T_c$:



Si ottiene $\gamma = (1,36 \pm 0,17)$ che è consistente con il valore tabulato.

Dal calcolo degli esponenti α , β e γ , attraverso delle leggi di scala, si possono determinare altri esponenti critici come ν , l'esponente legato alla lunghezza di correlazione ξ :

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$$

La relazione tra gli esponenti critici, chiamata legge di Josephson, è

$$\nu d = 2 - \alpha$$

dove $d = 3$ è la dimensione del reticolo, da cui ricaviamo, utilizzando il valore di α ottenuto dal fit

$$\nu = \frac{2 - \alpha}{d} = 0,6163$$

dunque $\nu = (0,6163 \pm 0,015)$ che è consistente con il valore tabulato di 0,6299.

ν lega anche l'andamento della T_c trovata attraverso la simulazione, alla dimensione del reticolo L .

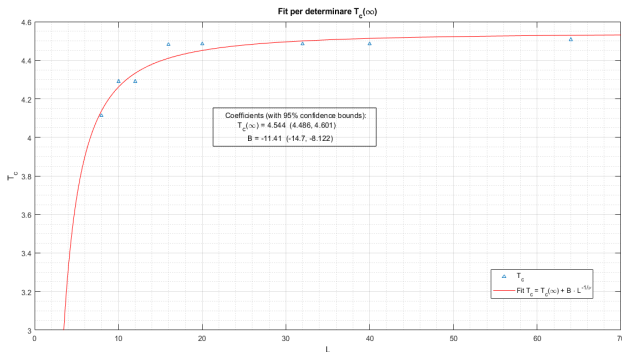
Si ha che

$$T_c(L) = a + b \cdot L^{-1/\nu}$$

e, mandando $L \rightarrow \infty$, si ottiene che $a = T_c(\infty)$, cioè la temperatura critica del sistema di dimensione infinita.

Aumentando le dimensioni del reticolo, la β_c viene determinata con maggiore precisione, dunque quando $L = \infty$, si determina la β_c corretta. Questo metodo, chiamato "finite-size scaling", permette di estrapolare un valore più corretto della β_c , facendo simulazioni con un numero finito di spin.

Utilizzando $T_c = \frac{1}{\beta_c}$, L e $\nu = 0,6299$ come tabulato si ottiene:



ed un valore di $T_c(\infty) = (4,544 \pm 0,057)$. Dunque il valore di $\beta_c(\infty)$ è

$$\beta_c(\infty) = (0,2201 \pm 0,0125)$$

con $\delta\beta_c = \beta_c^2\delta T_c$. Il valore trovato è pienamente consistente e molto vicino a quello tabulato.

Il problema dell'autocorrelazione

Uno dei problemi principali del Monte Carlo dinamico è quello dell'autocorrelazione. Come si legge sulle lezioni di Sokal, infatti, gli stati successivi X_0, X_1, \dots della catena di Markov sono correlati tra di loro, dunque la varianza delle quantità stimate attraverso la simulazione, potrebbe essere molto più elevata che in un Monte Carlo con campioni indipendenti.

Risulta dunque importante stimare l'autocorrelazione per il nostro modello, in modo da avere una stima degli errori statistici e dunque un algoritmo affidabile.

La funzione di autocorrelazione è definita come

$$c(t) = \langle f(X_s)f(X_{s+t}) \rangle - \langle f \rangle^2$$

ed è, in generale, una funzione che decresce esponenzialmente con il tempo, cioè

$$c(t) = c_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Stimando il valore di τ , per diversi valori di β , si può avere un'idea del valore da assegnare al parametro *skip* del programma. Esso, infatti, definisce ogni quante evoluzioni del sistema, si deve tenere conto della configurazione assunta dagli spin. Se $skip < \tau$, allora andiamo a tenere conto di configurazioni che non sono indipendenti tra loro, ma correlate e questo influisce sulla stima degli errori. Non considerare l'autocorrelazione, infatti, porta ad un sottostima dell'errore statistico, che scala come $\frac{1}{\sqrt{n}}$ dove n è il numero di configurazioni statisticamente indipendenti. Se n viene sovrastimato, l'errore viene sottostimato.

Ci si propone dunque di dare una stima per τ , il tempo medio in cui l'autocorrelazione riscalda di un fattore $\frac{1}{e}$, nel caso della magnetizzazione, e di trovare un valore adeguato per *skip*.

Si fissa la dimensione del reticolo $N_{tot} = 16^3$ e si calcola l'autocorrelazione, usando la trasformata di Fourier, per diversi valori di β . La prima parte di $c(t)$, $\langle f(X_s)f(X_{s+t}) \rangle$ può essere definita come una convoluzione e, grazie al teorema di Wiener–Khinchine, secondo il quale

$$\mathcal{F} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(x)f^*(x + \tau)dx \right] = |\mathcal{F}[f(x)]|^2$$

si può calcolare come una trasformata, cioè $\langle f(X_s)f(X_{s+t}) \rangle$ è l'antitrasformata del modulo quadro della trasformata di f .

```

c = fft(averageM(k,:)); %correlazione,
%k definisce valore di \beta a cui la stiamo calcolando
ac = ifft(c.*conj(c)); %autocorrelazione
ac = ac - (mean(averageM(k,:))^2);
ac = (ac)./ac(1); %normalizzo l'autocorrelazione

```

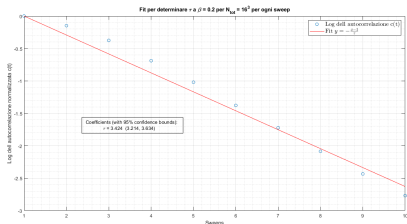
Si grafica l'autocorrelazione ottenuta in funzione del numero di $\text{sweeps} = 10^5$. Si fanno dei fit in scala logaritmica $\log(c(t)) = y = -\frac{x-1}{\tau}$, tramite i quali si determina τ . Si riportano i grafici con i fit per quattro diversi valori di β , presi in modo da coprire un range di temperature interessanti:

$$\beta = 0,2 \ll \beta_c$$

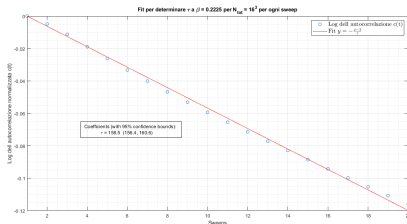
$$\beta = 0,2205: \text{ è } \lesssim \text{ alla } \beta_c;$$

$$\beta = 0,2225: \text{ è } \approx \text{ la } \beta_c \text{ per } N_{\text{tot}} = 16^3;$$

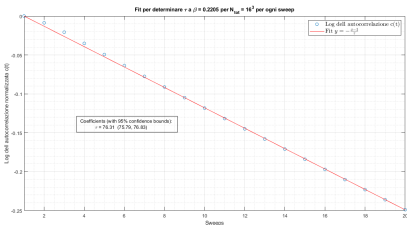
$$\beta = 0,2231 = \beta_c$$



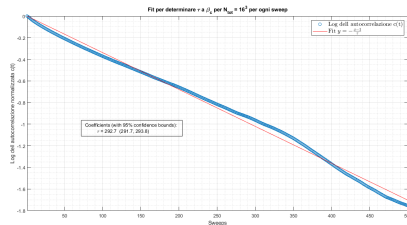
Autocorrelazione per $\beta = 0,2$
 $\tau = 3,424$



Autocorrelazione per $\beta = 0,2225$
 $\tau = 158,5$

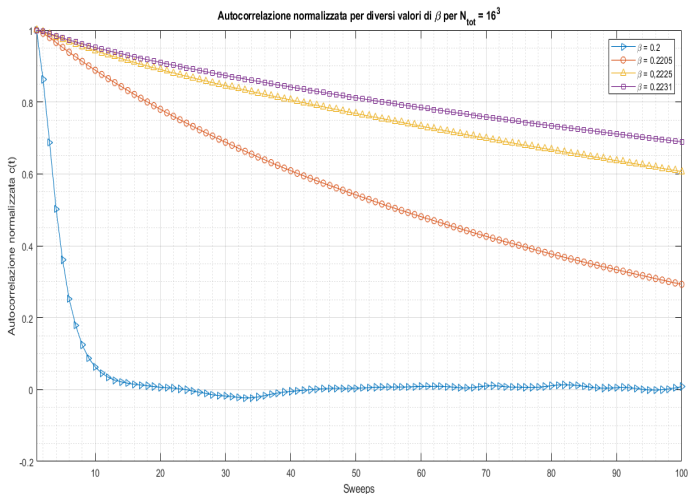


Autocorrelazione per $\beta = 0,2205$
 $\tau = 76,31$



Autocorrelazione per $\beta = 0,2231$
 $\tau = 292,7$

Osserviamo che l'autocorrelazione, per $\beta \ll \beta_c$ decresce molto velocemente e si annulla già dopo 10 sweeps, mentre per valori vicini alla β_c , la decrescita è molto più lenta.



Questo fenomeno, che interessa le transizioni di fase vicino al punto critico è detto "rallentamento critico" (critical slowing down), ed esprime il fatto che, vicino a β_c , sia molto più difficile generare dei campioni che siano tra loro indipendenti. Infatti, vicino alla β_c , si tendono a formare domini di spin allineati molto stabili e le configurazioni generate non sono indipendenti tra loro.

Il fatto di far evolvere più spin alla volta, agendo sui sottoreticoli contemporaneamente, diminuisce il valore di τ , ma esistono algoritmi più efficaci che modificano interi clusters ad ogni *sweep*.

A questo punto, possiamo dunque scegliere ragionevolmente come valore di *skip* un numero $> \tau_{max} = 300$: per le nostre simulazioni abbiamo utilizzato come valore di *skip* 500. Per essere certi che le configurazioni che andiamo a considerare siano tra loro indipendenti e che la stima degli errori sia corretta, bisogna calcolare τ su queste, cioè su ogni *sweep/skip*.

L'errore sulle quantità risulta essere calcolato come la deviazione standard della media, utilizzando $\frac{sweeps}{skip}$ come il numero di elementi indipendenti su cui viene effettuata la media.

Nel programma:

```
%Magnetizzazione media per spin
```

```
Magn(k) = mean(averageM)/(8*N*N*N); %media, diviso per  
%il numero totale di spin
```

```
errMagn(k) = std(averageM)/(8*N*N*N); %deviazione  
%standard, divisa per il numero totale di spin
```

```
dM = errMagn./sqrt(sweeps/skip); %deviazione standard  
%della media
```

e similmente anche per le altre quantità.

Andando a valutare τ sulle configurazioni che consideriamo indipendenti cioè $sweeps/skip$, per i diversi valori di N_{tot} , è possibile verificare che la stima degli errori sia corretta.

Nel caso in cui $\tau \gg 1$, è necessario andare a rivalutare gli errori, che sono stati sottostimati. Infatti, invece che dividere per $\sqrt{\frac{sweeps}{skip}}$ bisogna dividere per $\sqrt{\frac{sweeps}{skip \cdot \tau}}$, che è una miglior stima del numero di configurazioni indipendenti.

Vengono effettuati i fit, quando possibile in scala logaritmica, per l'autocorrelazione della magnetizzazione calcolata alla β_c per diversi valori di N_{tot} .

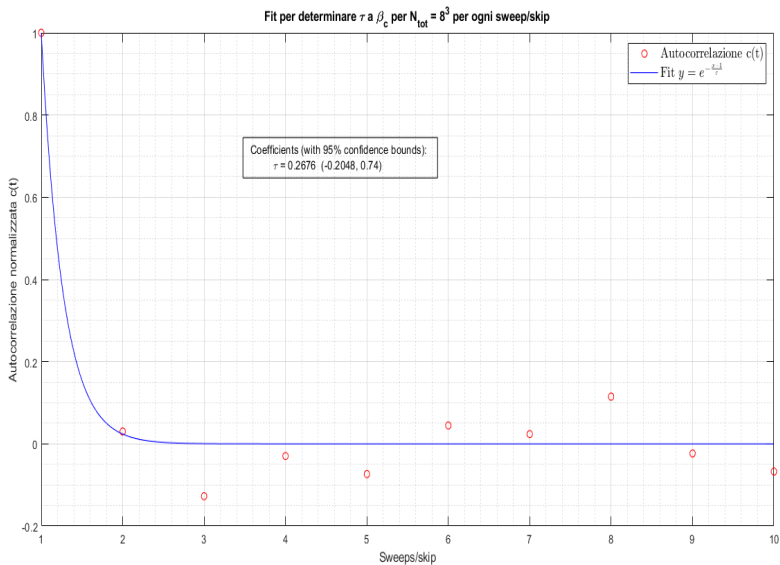


Figura: Autocorrelazione alla β_c per $N_{tot} = 8^3$: $\tau = 0,2676$

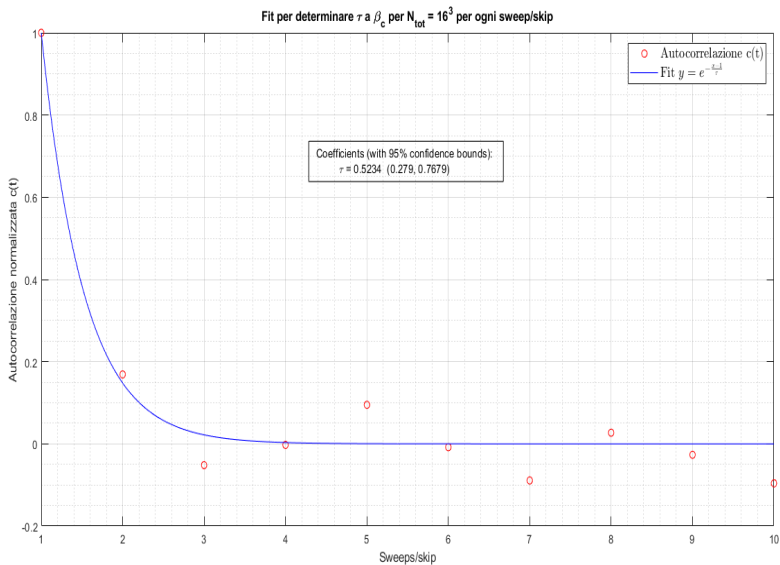


Figura: Autocorrelazione alla β_c per $N_{tot} = 16^3$: $\tau = 0,5234$

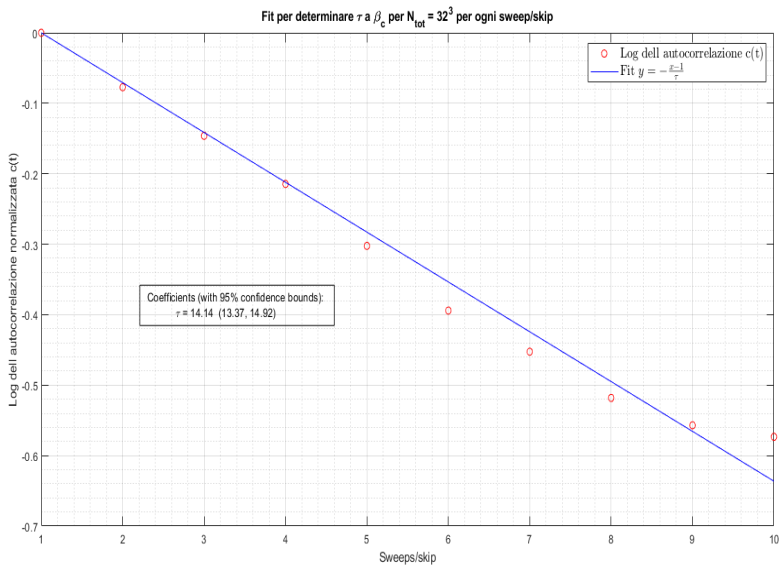


Figura: Autocorrelazione alla β_c per $N_{tot} = 32^3$: $\tau = 14.14$

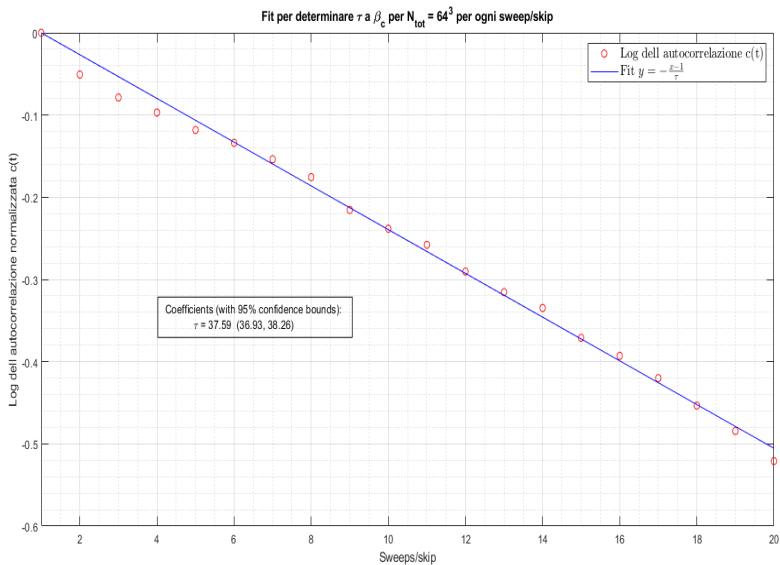


Figura: Autocorrelazione alla β_c per $N_{tot} = 64^3$: $\tau = 37.59$

Nel caso di $N_{tot} = 8^3$ e 16^3 , τ risulta $\ll 1$, dunque il valore di skip utilizzato è ragionevole e gli errori sono stimati correttamente. Infatti, possiamo dire che, dopo un passo, l'autocorrelazione sia diminuita di un fattore $\frac{1}{e^2} \approx 0,135$ nel caso $N_{tot} = 16^3$.

Per $N_{tot} = 32^3$ e 64^3 , invece, i valori di τ sono $\gg 1$ e l'autocorrelazione non è trascurabile, nonostante siano stati saltati dei passi nell'evoluzione del sistema.

Invece di fare un'altra simulazione, aumentando il numero di *sweeps* e di *skip*, che andrebbe ad aumentare il tempo di calcolo, si vanno a riscalarare gli errori, moltiplicando per $\sqrt{\tau}$.

Infatti:

$$\begin{aligned}\sigma_{\bar{x}} &= \frac{\sigma}{\sqrt{\frac{sweeps}{skip \cdot \tau}}} = \frac{\sigma}{\sqrt{\frac{sweeps}{skip}}} \sqrt{\frac{sweeps}{skip}} \frac{1}{\sqrt{\frac{sweeps}{skip \cdot \tau}}} = \\ &= \frac{\sigma}{\sqrt{\frac{sweeps}{skip}}} \sqrt{\tau} = \sigma_{calcolato} \sqrt{\tau}\end{aligned}$$

Nel caso di $N_{tot} = 32^3$ si ha che

$$\tau = 14,14 \rightarrow \sqrt{\tau} = 3,76$$

dunque gli errori risultano essere ≈ 4 volte più grandi di quanto avevamo calcolato in precedenza, mentre per $N_{tot} = 64^3$

$$\tau = 37,59 \rightarrow \sqrt{\tau} = 6,13$$

e gli errori sono 6 volte più grandi.

Risulta dunque, in questi due casi, molto importante tenere conto dell'autocorrelazione.

I plot che abbiamo messo nelle figure precedenti hanno gli errori corretti, stimati dopo aver calcolato τ e tenendo conto dell'autocorrelazione.

In conclusione, abbiamo ricavato la β_c per il modello di Ising in 3 dimensioni e gli esponenti critici delle quantità interessanti del sistema, di cui ne abbiamo visualizzato e studiato l'andamento. Abbiamo calcolato l'autocorrelazione del sistema e fatto una stima più precisa degli errori tenendo conto di τ .