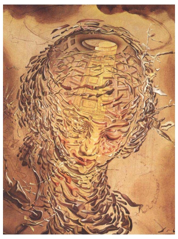
Markov



侍

Markov

Ajustemos la notacion

Sea una variable estocastica Y con un espacio muestral asociado $(y_1, y_2, y_3, \ldots)$

$P_1(y_1, t)$ = densidad de probabilidad de que la variable estocastica tome el valor y_1 a tiempo t

$P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)$ = densidad de probabilidad conjunta de que la variable estocastica tome el valor y_1 a tiempo t_1 y el valor y_2 a tiempo t_2

$P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_n, t_n)$ = densidad de probabilidad conjunta que la variable ...

Las densidades de probabilidad satisfacen

$$P_n \geq 0$$

Pueden ser reducidas

$$\int P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_n, t_n) dy_n = P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_{n-1}, t_{n-1})$$

Ademas son normalizables

$$\int P_1(y_1, t_1) dy_1 = 1$$

Pueden ser continuas o discretas

Los momentos dependientes del tiempo quedan definidos por

$\langle y_1(t_1), y_2(t_2), \ldots, y_n(t_n) \rangle =$
$= \int \ldots \int y_1 y_2 \ldots y_n P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_n, t_n) dy_1 dy_2 \ldots dy_n$
de donde obtenemos informacion respecto de correlaciones a diferentes tiempos.

Proceso estacionario :
$P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_n, t_n) = P_n(y_1, (t_1 + \tau); y_2, (t_2 + \tau); \ldots; y_n, (t_n +$
Para todo n y τ

Entonces en este caso
$P_1(y_1, t_1) = P_1(y_1)$

Sea ahora la probabilidad condicional

$P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) =$ es la densidad de probabilidad condicional de que la variable estocastica Y adopte el valor y_2 a tiempo t_2 si tomo el valor y_1 a tiempo t_1

Esta definida por

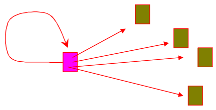
$$P_1(y_1, t_1) P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) = P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)$$

Teniendo en cuenta la propiedad de reduccion

$$\int P_1(y_1, t_1) P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) dy_1 = P_1(y_2, t_2)$$

Ademas $P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)$ tiene la propiedad

$$\int P_1(y_1, t_1) P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)\, dy_2 = \int P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) dy_2$$
$$\int P_1(y_1, t_1) P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)\, dy_2 = P_1(y_1, t_1)$$
$$P_1(y_1, t_1) \int P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)\, dy_2 = P_1(y_1, t_1)$$
$$\Rightarrow$$
$$\int P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)\, dy_2 = 1$$



$$\int P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2)dy_2 = 1$$

pues

$$\int P_1(y_1,t_1)P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2)dy_2 = \int P_2(y_1,t_1;y_2,t_2)dy_2$$

$$P_1(y_1,t_1)\int P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2)dy_2 = P_1(y_1,t_1)$$

Si $P_1(y_1,t_1) \neq 0$ ya esta.

Densidad de probabilidad conjunta

$P_{k/l}(y_1,t_1;y_1,t_1;\ldots;y_k,t_k|y_{k+1},t_{k+1};y_{k+2},t_{k+2};\ldots;y_{k+l},t_{k+l})$

Estas expresiones son relevantes cuando la variable estocastica tiene "memoria"

En particular

$P_{k/1}(y_1,t_1;y_1,t_1;\ldots;y_{n-1},t_{n-1}|y_n,t_n)$

Esto nos lleva a una clasificacion en terminos de la memoria del sistema

---

Proceso de Markov $\Rightarrow$

$P_{k/1}(y_1,t_1;y_1,t_1;\ldots;y_{n-1},t_{n-1}|y_n,t_n) \rightarrow P_{1/1}(y_{n-1},t_{n-1}|y_n,t_n)$

Entonces el estado del sistema a tiempo t solo depende del estado anterior.

Llamaremos a $P_{1/1}(y_{n-1},t_{n-1}|y_n,t_n)$ "la probabilidad de transicion"

El proceso de Markov queda definido por

i) $P_1(y_1,t_1)$

ii) $P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2)$

De este modo

$$P_3(y_1,t_1;y_2,t_2;y_3,t_3) = P_2(y_1,t_1;y_2,t_2)P_{2/1}(y_1,t_1;y_2,t_2|y_3,t_3)$$
$$= P_1(y_1,t_1)\,P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2)P_{1/1}(y_2,t_2|y_3,t_3)$$

Si ahora integramos la ecuacion anterior sobre y_2

$\int P_3(y_1,t_1;y_2,t_2;y_3,t_3)dy_2 = P_2(y_1,t_1;y_3,t_3) =$

por definicion de $P_{1/1}$

$= P_1(y_1,t_1)\ P_{1/1}(y_1,t_1|y_3,t_3)$

pero tambien

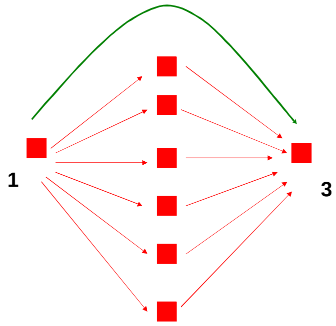
$= \int P_1(y_1,t_1)\ P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2) P_{1/1}(y_2,t_2|y_3,t_3) dy_2 =$

$= P_1(y_1,t_1) \int P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2) P_{1/1}(y_2,t_2|y_3,t_3) dy_2$

de donde con $P_1(y_1,t_1) \neq 0$

$$P_{1/1}(y_1,t_1|y_3,t_3) = \int P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2) P_{1/1}(y_2,t_2|y_3,t_3) dy_2$$

Ecuacion de Chapman-Kolmogorov



Cadenas de Markov

Sea un espcio muestral discreto.

$$Y = (y_1, y_2, y_3, \ldots, y_l)$$

El tiempo se mide en unidades de $\tau \Rightarrow t = s\tau$, con s un entero.

Entonces para un paso desde $t = 0$ a $t = \tau$

$$P_1(y_i,1) = \sum_{j=1}^{l} P_1(y_j,0) P_{1/1}(y_j,0|y_i,1)$$

Toda la informacion respecto de los mecanismos de transicion Aparecen en los $P_{1|1}(y_j,0|y_i,1)$

aparecen en $P_{1/1}(y_i,0|y_j,1)$ probabilidades de transición de un paso.

Sea $Q_{ji} = P_{1/1}(y_j,0|y_i,1)$

Con $\sum_i Q_{ji} = 1$ (Matriz estocástica)

De esta forma $\overrightarrow{P(1)} = \overrightarrow{P(0)}\ \bar{\bar{Q}}$

Donde $\overrightarrow{P(s)}$ es un vector l dimensional correspondiente a la densidad de probabilidad a tiempo s.

Sea el vector $\overrightarrow{P(S)}$ cuyas componentes dan la probabilidad a tiempo $S\tau$

$$\vec{P}(1) = \vec{P}(0)\overline{\overline{Q}}$$

$$\vec{P}(0) = [P_1(y_1,0), P_1(y_2,0), P_1(y_3,0),....]$$

$$\overline{\overline{Q}} = \begin{bmatrix} P_{1/1}(y_1; y_1\,|1) & P_{1/1}(y_1; y_2\,|1) & P_{1/1}(y_1; y_3\,|1) & ... \\ P_{1/1}(y_2; y_1\,|1) & P_{1/1}(y_2; y_2\,|1) & P_{1/1}(y_2; y_3\,|1) & ... \\ P_{1/1}(y_3; y_1\,|1) & P_{1/1}(y_3; y_2\,|1) & P_{1/1}(y_3; y_3\,|1) & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{bmatrix}$$

$$\boxed{\left|\vec{P}(0)\overline{\overline{Q}}\right|_1 = \sum_i P_1\,(y_i,0)P_{1|1}(y_i; y_1\,|1)}$$

$$\boxed{\overrightarrow{P(S)} = \overrightarrow{P(S-1)}\;\overline{\overline{Q}} = \overrightarrow{P(0)}\;\overline{\overline{Q}}^{S}}$$

La Matriz Estocastica sera regular si existe $k \,/\, \overline{\overline{Q}}^{k}$ es positiva
(todos los elementos son >0)

entonces existe S tal que $\longrightarrow$ $\overline{\overline{Q}}^{S} = \overline{\overline{M}}$

de modo que $\longrightarrow$ $\overline{\overline{M}} = \overline{\overline{Q}}\,\overline{\overline{M}}$

luego para $s > S$

$$\boxed{P(s) = P(S) = P(0)\;\overline{\overline{Q}}^{s-S}\overline{\overline{M}} = P(0)\;\overline{\overline{M}}}$$

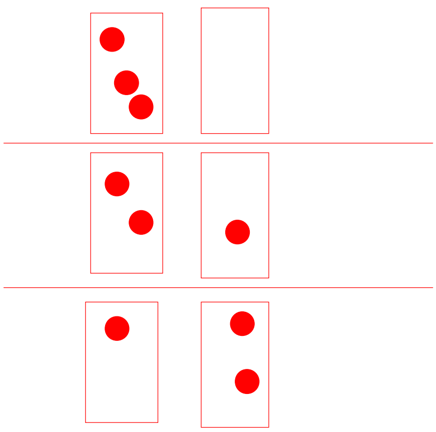
donde

$$\overline{\overline{M}} = \begin{bmatrix} a & b & \dots & n \\ a & b & \dots & n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a & b & \dots & n \end{bmatrix}$$

La solucion de equilibrio sera el punto fijo

$$\boxed{\vec{\mathbf{P}} = \vec{\mathbf{P}}\;\overline{\overline{Q}}}$$

Sea el siguiente proceso
i) dos cajas
ii) 3 bolas rojas y dos blancas
iii) proceso →intercambio una bola
iv) posibles configuraciones



Estados posibles

	1		2		3	
blancas	2	0	1	1	0	2
rojas	0	3	1	2	2	1
	c_1	c_2				

Matriz de transicion

$Q_{11} = 0$

$Q_{12} = 1$ al intercambiar ....

$Q_{13} = 0$

$Q_{21} = 1/2 \cdot 1/3 = 1/6$

$Q_{22} = 1/2 \cdot 1/3 + 1/2 \cdot 2/3 = 1/2$ (blanca-blanca + roja-roja)

$Q_{23} = 1 - 1/2 - 1/6 = 1/3$ (por estocástica)

$Q_{31} = 0$

$Q_{32} = 2/3$ (se elige roja con p=1 y blanca con 2/3)

$Q_{33} = 1/3$

$$\bar{\bar{Q}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1/6 & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 2/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$

$$\bar{\bar{Q}}^{2} = \begin{pmatrix} 1/6 & 1/2 & 1/3 \\ 1/12 & 23/36 & 10/36 \\ 1/9 & 22/36 & 1/3 \end{pmatrix}$$!

se sigue multiplicando...

Q^6			
	0.1007	0.5986	0.3005
	0.0998	0.6004	0.2998
	0.1002	0.5995	0.3002

Tambien se puede tener en cuenta que la solucion de equilibrio es estacionaria ante multiplicacion por Q, luego

$(x,y,z) = (x,y,z)Q \Rightarrow$

$(x,y,z) = (\frac{1}{6}y, [x + \frac{1}{2}y + \frac{2}{3}z], [\frac{1}{3}y + \frac{1}{3}z])$

Por ser estocastica tambien se cumple $x + y + z = 1$

de donde

$x = \frac{1}{6}y$; $y = x + \frac{1}{2}y + \frac{2}{3}z$; $z = \frac{1}{3}y + \frac{1}{3}z$

de donde

$y = 6x$

$z = \frac{3}{2}\frac{1}{3}6x$; $z = 3x$

luego $6x + 3x + x = 1 \Rightarrow x = 1/10$

Entonces la solucion estacionaria es

$$(x,y,z) = (\tfrac{1}{10}, \tfrac{6}{10}, \tfrac{3}{10})$$

Otra forma de ver lo anterior es:

Es interesante ver lo siguiente

Si comenzamos con un vector de estado arbitrario $\vec{P}(0)$ y queremos calcular su evolucion temporal luego de s pasos encontramos que:

$$\vec{P}(s) = \vec{P}(0)\, \bar{\bar{Q}}^{s}$$

Supongamos ahora que para $k < s$ se cumple que $\bar{\bar{Q}}^{k} = \bar{\bar{M}}$ con $\bar{\bar{Q}}\bar{\bar{M}} = \bar{\bar{M}}$ entonces $\bar{\bar{M}}$ es

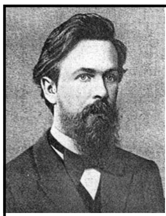
$$\bar{\bar{M}} = \begin{vmatrix} \alpha & \beta & \gamma & \ldots \\ \alpha & \beta & \gamma & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \alpha & \beta & \gamma & \ldots \end{vmatrix}$$

Entonces $\vec{P}(s) = \vec{P}(0)\,\bar{\bar{M}}$ sera tal que

$P_1(s) = \alpha(P_1(0) + P_2(0) + \dots + P_l(0)) \; = \alpha$

y asi sucesivamente, esta es la solucion de equilibrio.

Al ser un vector de probabilidad genuino esta normalizado a 1



Solución General

Solucion General

1) $P_{1/1}(m|n,s)$ densidad de proba condicional
2) $P_1(n) = \sum_m P_1(m) P_{1/1}(m|n,s)$
3) $\sum_n P_{1/1}(m|n,s)$ =1
4) $P_{1/1}(m|n,s) = \sum_k P_{1/1}(m|k,s-1) P_{1/1}(k|n,1)$

Autovalores de Q

$$\boxed{\det|Q - \lambda I| = \mathbf{0}}$$

Q es en general no simetrica

Planteamos autovalores a derecha e izquierda

$$\lambda_i x_{im} = \sum_n x_{in} Q_{nm}$$

$$\lambda_j y_{mj} = \sum_n Q_{mn} y_{nj}$$

Propiedades

1) λ_j no es necesariamente real (no es simétrica)

2) Los autovectores a derecha e izquierda son ortogonales

Ortogonalidad

a) a partir de las ecuaciones planteadas previamente,

$$\lambda_i x_{im} = \sum_n x_{in} Q_{nm} \qquad \lambda_j y_{mj} = \sum_n Q_{mn} y_{nj}$$

multiplicando a la primera por y_{mj} a derecha y la segunda por x_{im} a izquierda y sumando sobre n

a) $$\lambda_i x_{im} y_{mj} = \sum_n x_{in} Q_{nm} y_{mj}$$

b) $$\lambda_i x_{im} y_{mj} = \sum_n x_{im} Q_{mn} y_{nj}$$

de donde sumando c/u sobre m

a) $$\lambda_i \sum_m x_{im} y_{mj} = \sum_{n,m} x_{in} Q_{nm} y_{mj}$$

a) $$\lambda_i \sum_m x_{im} y_{mj} = \sum_{n,m} x_{in} Q_{nm} y_{mj}$$

b) $$\lambda_j \sum_m x_{im} y_{mj} = \sum_{n,m} x_{im} Q_{mn} y_{nj}$$

y restando m.a.m.

$$\boxed{(\lambda_i - \lambda_j) \sum_m x_{im} y_{mj} = 0}$$

como vale $\forall i,j / i \neq j \Rightarrow$

$$\sum_m x_{im} y_{mj} = 0$$

b) Sea

$$\vec{A} = \sum_i a_i \vec{x}_i$$

Desarrollo en términos del autovector

Sea la componente n

$$\boxed{A_n = \sum_i a_i x_{in}}$$

Si ahora multiplicamos A_n por y_{nj} a derecha y sumamos sobre n

$$\boxed{\sum_n A_n y_{nj} = \sum_n \sum_i a_i x_{in} y_{nj} = \sum_i a_i \sum_n x_{in} y_{nj} = a_j}$$

donde usamos el resultado previo

ahora

Entonces

$$A_n = \sum_i a_i x_{in} = \sum_i \left(\sum_k A_k y_{ki} \right) x_{in} = \sum_k A_k \sum_i y_{ki} x_{in}$$

de donde

$\sum y_{ki} x_{in} = \delta(n,k)$, para recuperar $A_n = A_n$

Propiedades de los autovalores

1) $|\lambda_i| \leq 1$

Pues... $$\boxed{\lambda_j y_{mj} = \sum Q_{mn} y_{mj}}$$

tomando modulo a ambos lados

$$|\lambda_j y_{mj}| = \left|\sum Q_{nm} y_{mj}\right| \le \sum Q_{nm} |y_{mj}|$$

de donde si C es el maximo y_{mj}

$$\boxed{|\lambda_j| C \le C \sum_m Q_{nm} \Rightarrow |\lambda_j| \le 1}$$

2) $\lambda = 1$ es siempre autovalor

Tomamos primero los autovectores a "izquierda". Que satisface la siguiente relacion

$$\boxed{\lambda_i x_{im} = \sum_n x_{in} Q_{nm}}$$

Si tiene autovalor 1 debe cumplir

$$\boxed{x_{im} = \sum_n x_{in} Q_{nm}}$$

pero

$$P_1(n) = \sum_m P_1(m) P_{1/1}(m|n,s) = \sum_m P_1(m) Q^S_{mn}$$

tomando $s = 1$

$$\boxed{P_1(n) = \sum_m P_1(m) Q_{mn}}$$

(ojo, los índices están intercambiados)

y ya esta.

Sea ahora el correspondiente problema para el autovector

a "derecha"

$$\lambda_i y_{ni} = \sum Q_{mn} y_{ni}$$

tomando $y = (1, 1, 1, \ldots)$

$$\lambda_i = \sum Q_{mn} = 1$$

Solucion General

$$\boxed{\lambda_i x_{im} = \sum_n x_{in} Q_{nm}}$$

$$\lambda_i y_{ki} x_{im} = \sum_n y_{ki} x_{in} Q_{nm}$$

$$\boxed{\sum_i \lambda_i y_{ki} x_{im} = \sum_i \sum_n y_{ki} x_{in} Q_{nm} = \sum_n \left(\sum_i y_{ki} x_{in} \right) Q_{nm}}$$

Tomando en cuenta las condiciones de ortogonalidad

$$\sum_i y_{ki} x_{im} = \delta_{km} \Rightarrow \sum \lambda_i y_{ki} x_{im} = Q_{km}$$

Dada esta expresion para Q_{km} es inmediato ver que

$$\left(\bar{\bar{Q}}^{s}\right)_{km} = \sum \lambda_i^s y_{ki} x_{im}$$

Sea por ejemplo

$$\sum_i \lambda_i y_{ki} x_{im} = Q_{km}$$

$$\begin{aligned}\sum_m Q_{km} Q_{mn} &= \sum_m \sum_i \lambda_i y_{ki} x_{im} \sum_j \lambda_j y_{mj} x_{jn} \\ &= \sum_j \sum_i \lambda_i \lambda_j y_{ki} \sum_m x_{im} y_{mj} x_{jn} \\ &= \sum_j \sum_i \lambda_i \lambda_j y_{ki} \delta_{ij} x_{jn} \\ &= \sum_i \lambda_i^2 y_{ki} x_{in}\end{aligned}$$

Y así sucesivamente

Entonces

Dada esta expresion para Q_{km} es inmediato ver que

$$\left(\bar{\bar{Q}}^{s}\right)_{km} = \sum \lambda_i^s y_{ki} x_{im}$$

Como las matrices regulares tienen un unico autovalor 1, entonces (lo separo en las suma)

$$P_{1/1}(m|n,s) = y_{m1} x_{1n} + \sum_{j \neq 1} \lambda_j^s y_{mj} x_{jn}$$

<1

En el limite de $s \to \infty$

Usando resultados previos para $\lambda = 1$ (es decir $y_n = 1$ y $x_{1n} = P_1(n)$)

$$\lim_{s \to \infty} P_{1/1}(m|n,s) = P_1(n)$$

Metropolis

Un momento de reflexión :

Que es calcular un valor medio canónico?

Si pudiese generar N Configuraciones del sistema bajo estudio, con N→∞ y que aparezcan con una frecuencia segun

$$p(i) = \frac{\exp(-\beta e(i))}{\sum_i \exp(-\beta e(i))}$$

Si la realización de la Cadena de Markov asociada genera una secuencia de N_M estados $[j_M]_1^{N_M}$ con frecuencias p(i)

Entonces el valor medio será

$$\langle o_i \rangle = \sum_i o(i) p(i) = \frac{1}{N_M} \sum_{j_M} o(j_M)$$

Metodo de Metropolis Monte Carlo

Sistema bajo estudio **Problema general**

Sea un sistema de N moleculas
Confinadas en un volumen V
A la temperatura T
Caracterizado por un H

$$H = \sum \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{\substack{i=1,N \\ i<j}} u_{ij} = T + U$$

Queremos generar
Una cadena de Markov
Con probabilidades constantes de transicion

Los estados seran los puntos en el espacio 3N-dimensional de configuraciones del sistema

Discretizacion (de ser necesario)

Supondremos que subdividimos el volumen V en un numero suficientemente grande de celdas (S) de modo de poder pensar el problema en terminos de cadenas discretas de markov.

El estado del sistema a "paso n" del desarrollo de la cadena viene dado por un entero.

De esta forma $k = 1, 2, \ldots, S$ especifican el estado del sistema

Otras variables relevantes como ser U se denotaran como U_k

Los sucesivos estados que "visitará" el sistema tendrán asociado "un tiempo", sin embargo recordar que no hay "tiempo físico" involucrado en el cálculo.

Que son los "pasos de la cadena"?

Para ISING→ generacion de distintos configuraciones de spines

Para Lennard Jones → distintas configuraciones espaciales (el momento se factoriza)

Propiedades deseadas en la Cadena de Markov

Queremos que cada estado k aparezca en la cadena (asintoticamente) con una frecuencia proporcional al Factor de Boltzmann

$$exp(-\beta U_k)$$

Si esto se logra, el promedio de toda función en el espacio de configuraciones, donde cada ocurrencia de cada estado tiene el mismo peso , convergera al promedio canonico.

Una cadena de Markov viene definida por probabilidades de transicion de 1 paso, que redefinimos por comodidad

$$P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) = p_{12}$$

las p_{jk} seran independientes del tiempo (del paso de la cadena)

Satisfacen $\sum_{k=1}^{S} p_{jk} = 1$, $\forall j$

Propiedades de los estados de las cadenas de Markov

(una posible clasificacion porque hay muchos "nombres")

Sean las probabilidades de *primer pasaje*

$$f_{ij}^{(n)} = P(y_t = s_j, y_{t-1} \neq s_j, \ldots, y_{t-n+1} \neq s_j | y_{t-n} = s_i)$$

i

$$f_{ij}^{(n)} = P(y_t = s_j, y_{t-1} \neq s_j, \ldots, y_{t-n+1} \neq s_j | y_{t-n} = s_j)$$

Que satisfacen

$$f_{ij}^{(1)} = p_{ij}$$

$$f_{ij}^{(n+1)} = p_{ij}^{(n+1)} - \sum_{r=1}^{n} f_{ij}^{(r)} p_{jj}^{(n-r+1)}$$

a) Tiempo medio de recurrencia

$$m_{ij} = \sum_{n=1}^{\infty} n f_{ij}^{(n)}$$

con la condicion $\sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} = 1$

b) Estados recurrentes

i es recurrente si

$$\sum_{n=1}^{\infty} f_{ii}^{(n)} = 1$$

- si $m_{ii} < \infty$ se llaman *positivos*
- si $m_{ii} = \infty$ se llaman *nulos*
- si $p_{ii}^{(n)} \neq 0$ solo para $n = \alpha d$ (con α entero) se llaman *periodicos*
- son *aperiodicos* si $d = 1$

- dados dos estados s_i y s_j , si se cumple

$p_{ij}^{(m)} \neq 0$ y $p_{ji}^{(n)} \neq 0$ $\Rightarrow$

Son mutualmente accesibles y entonces pertenecen a la misma clase

Una cadena cuyos estados pertenecen a la misma clase es *irreducible*

el grafo asociado es conexo

Se cumple que los estados que pertenecen a la misma clase

cumplen una de estas condiciones

son todos no recurrentes

son todos positivos

son todos nulos

Sea una cadena irreducible, finita, con todos sus estados aperiodicos → Cadena ergodica

Para una cadena ergódica

$$\lim_{n\to\infty} p_{jk}^{(n)} = \pi_k \ , \ \forall k$$

el limite existe y es independiente de j.

ademas

$$\pi_k > 0 \ , \ \forall k$$

y se cumple

$$\pi_k = m_{kk}^{-1}$$

y tambien se cumple que $\{\pi_k\}$ es el unico conjunto de numeros que satisface

$$\sum_k \pi_k = 1$$

y

$$\pi_k = \sum_{i=1}^{S} \pi_j p_{jk} \ , \ \forall k$$

Metropolis

Queremos calcular (sistema discreto) [trabajamos en el canónico]

$$\langle f \rangle = \frac{\sum f(s) \exp(-\beta E(s))}{\sum \exp(-\beta E(s))}$$

Como queremos (sabemos) cual es el estado asintótico del sistema (caracterizado por la probabilidad Canónica)

$$\pi(s) = \frac{\exp(-\beta E(s))}{\sum \exp(-\beta E(s))}$$

Esta $\pi(s)$ no se conoce pues necesitamos $\sum \exp(-\beta E(s))$ que en general es desconocida (si la conociesemos ya esta resuelto el problema!)

Debemos construir las probabilidades de transición adecuadas.

Se invierte el problema usual, en vez de obtener la distribución asintótica a partir de las probabilidades de transición ....

A tal fin reemplazamos la última condicion por la (mas fuerte) de reversibilidad microscópica:

$$\pi_k = \sum_{i=1}^{S} \pi_j p_{jk} \quad \Rightarrow \quad \pi_k p_{ki} = \pi_i p_{ik}$$

Pues entonces

$$\sum_i \pi_k p_{ki} = \sum_i \pi_i p_{ik}$$

$$\pi_k \sum_i p_{ki} = \pi_k = \sum_i \pi_i p_{ik}$$

Luego si esta última condición se cumple, junto con la de ergodicidad y la normalización la cadena converge a donde queremos.

Estas ecuaciones no determinan una única p_{jk}

Metropolis et. al. Proponen:

Sea P^* una cadena de Markov simetrica que satisface

$$p^*_{ij} \geq 0 \qquad \sum_j p^*_{ij} = 1 \qquad p^*_{ij} = p^*_{ji}$$

(cadena subyacente seleccionadora de posibles pasos)

Metropolis, Rsenbluth y Teller proponen :

$$\begin{aligned} p_{ij} &= p^*_{ij} && \text{si } \tfrac{\pi_j}{\pi_i} \geq 1 \\ &= p^*_{ij}\tfrac{\pi_j}{\pi_i} && \text{si } \tfrac{\pi_j}{\pi_i} < 1 \end{aligned}$$

(el estado final es mas probable)

Observar que se pueden aceptar transiciones a estados menos probables

Sea

a) $\sum''_j$ la suma sobre todos los $j \neq i$ tales que $\frac{\pi_j}{\pi_i} \geq 1$

b) $\sum'_j$ es la suma sobre j tales que $\frac{\pi_j}{\pi_i} < 1$ o sea a los menos probables.

Sea

$$p_{ii} = 1 - \sum''_j p_{ij} - \sum'_j p_{ij}$$

o sea que no salga de i

entonces usando $\begin{cases} p_{ij} = p^*_{ij} & \text{si } \frac{\pi_j}{\pi_i} \geq 1 \\ \phantom{p_{ij}} = p^*_{ij}\frac{\pi_j}{\pi_i} & \text{si } \frac{\pi_j}{\pi_i} < 1 \end{cases}$

$$p_{ii} = 1 - \sum''_j p_{ij} - \sum'_j p_{ij} \longrightarrow \begin{cases} p_{ii} = 1 - \sum''_j p^*_{ij} - \sum'_j p^*_{ij}\frac{\pi_j}{\pi_i} \\ = 1 - \left[1 - p^*_{ii} - \sum'_j p^*_{ij}\right] - \sum'_j p^*_{ij}\frac{\pi_j}{\pi_i} \end{cases}$$

De donde

$$p_{ii} = p^*_{ii} + \sum_j{}' p^*_{ij}\left(1 - \frac{\pi_j}{\pi_i}\right)$$

Entonces calculamos:

$$\sum_j p_{ij} = \left[p^*_{ii} + \sum_j{}' p^*_{ij}\left(1 - \frac{\pi_j}{\pi_i}\right)\right] + \left[\sum_j{}' p^*_{ij}\left(\frac{\pi_j}{\pi_i}\right)\right] + \left[\sum_j{}'' p^*_{ij}\right]$$

repitiendo

$$\sum_j p_{ij} = \left[p_{ii}^* + \sum_j^{\prime} p_{ij}^* (1 - \cancel{\frac{\pi_j}{\pi_i}}) \right] + \left[\sum_j^{\prime} p_{ij}^* (\cancel{\frac{\pi_j}{\pi_i}}) \right] + \left[\sum_j^{\prime\prime} p_{ij}^* \right]$$

que es

$\sum_j^{\prime} p_{ij}$ = [proba de no salir de i] + [proba de ir a uno menos probable ...

que cumple entonces:

$$\boxed{\sum_j p_{ij} = p_{ii}^* + \sum_j^{\prime} p_{ij}^* + \sum_j^{\prime\prime} p_{ij}^* = 1}$$

y por lo tanto es una matriz estocastica

Estudiamos ahora la microreversibilidad de la cadena

1) Sea $\pi_i = \pi_j$

Entonces $p_{ij} = p_{ij}^* = p_{ji}^* = p_{ji}$, luego

$$\boxed{\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}}$$

2) Sea $\pi_i > \pi_j$

Usando Metropolis

$p_{ij} = p_{ij}^* \frac{\pi_j}{\pi_i} = p_{ji}^* \frac{\pi_j}{\pi_i} = p_{ji} \frac{\pi_j}{\pi_i}$, entonces

$$\boxed{\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}}$$

3) Sea $\pi_i < \pi_j$, se demuestra del mismo modo

Entonces como $\sum_j p_{ij} = 1$, resulta

$$\sum_i \pi_i p_{ij} = \sum_i \pi_j p_{ji} = \pi_j \sum_i p_{ji} = \pi_j$$

Para el caso de la distribucion de Boltzmann

$$\boxed{\frac{\pi_j}{\pi_i} = \frac{\frac{\exp(-\beta E(s_j))}{\sum \exp(-\beta E(s))}}{\frac{\exp(-\beta E(s_i))}{\sum \exp(-\beta E(s))}} = \frac{\exp(-\beta E(s_j))}{\exp(-\beta E(s_i))}}$$

y por lo tanto eliminamos $\sum \exp(-\beta E(s))$.

!

Finalmente:

$$\boxed{p_{ij}^* \geq 0 \qquad \sum_j p_{ij}^* = 1 \qquad p_{ij}^* = p_{ji}^*}$$

Metropolis, Rsenbluth y Teller proponen :

$$\boxed{\begin{aligned} p_{ij} &= p_{ij}^* & \text{si } \frac{\pi_j}{\pi_i} \geq 1 \\ &= p_{ij}^* \frac{\pi_j}{\pi_i} & \text{si } \frac{\pi_j}{\pi_i} < 1 \end{aligned}}$$

Con

$$\boxed{\frac{\pi_j}{\pi_i} = \frac{\frac{\exp(-\beta E(s_j))}{\sum \exp(-\beta E(s))}}{\frac{\exp(-\beta E(s_i))}{\sum \exp(-\beta E(s))}} = \frac{\exp(-\beta E(s_j))}{\exp(-\beta E(s_i))}}$$

Cuestiones varias:

a) Los valores medios se construyen promediando sobre configuraciones no correlacionadas

b) Cuan grandes son las fluctuaciones

c) Análisis de las correlaciones entre estados

d) Ruptura de situaciones no ergodicas (sorensen-wang)

e) Extensión a otros ensembles

Condiciones Periodicas de Contorno

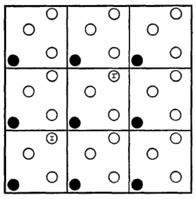


FIG. 1. The periodic boundary condition in two dimensions. The central square represents the fundamental Monte Carlo cell, the others are replicas of it. One of the molecules in the fundamental cell and its eight images are shown as solid circles.

Cuidado!!!

ATENCIÓN !

Available online at www.sciencedirect.com
ScienceDirect
Nuclear Physics A 923 (2014) 31–50
NUCLEAR PHYSICS A
www.elsevier.com/locate/nuclphysa

Simulations of cold nuclear matter at sub-saturation densities

P.A. Giménez Molinelli [a], J.I. Nichols [a], J.A. López [b], C.O. Dorso [a]

[a] Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires and IFIBA, CONICET, Ciudad Universitaria, Buenos Aires 1428, Argentina
[b] Department of Physics, University of Texas at El Paso, El Paso, TX 79968, USA

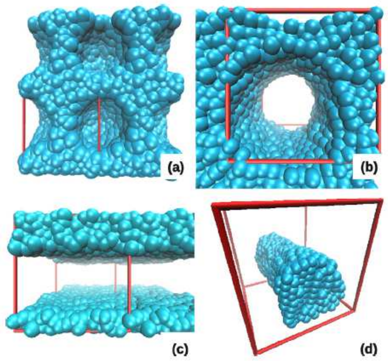


Fig. 11. (Color online.) Structures obtained with a Lennard-Jones potential.

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right].$$

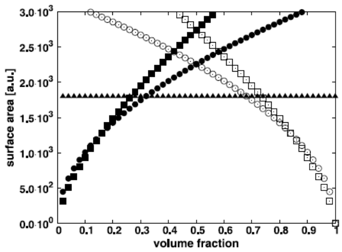


Fig. 13. Surface area of various simple shapes as a function of volume fraction for a cell of $L = 30$. The shapes are: spherical drop (full squares), cylindrical rod (full circles), slab (full triangles), cylindrical bubble (empty circles) and spherical bubble (empty squares).

$$S_{sphere} = 4\pi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \times u^{\frac{2}{3}} \times L^2,$$
$$S_{rod} = 2(\pi)^{\frac{1}{3}} \times u^{\frac{1}{3}} \times L^2,$$
$$S_{slab} = 2 \times L^2.$$

$$V_{np}(r) = V_r\left[\exp(-\mu_r r)/r - \exp(-\mu_r r_c)/r_c\right] - V_a\left[\exp(-\mu_a r)/r - \exp(-\mu_a r_c)/r_c\right],$$
$$V_{nn}(r) = V_0\left[\exp(-\mu_0 r)/r - \exp(-\mu_0 r_c)/r_c\right],$$

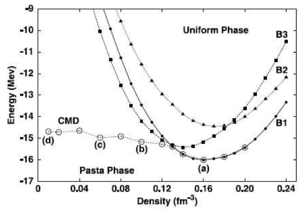
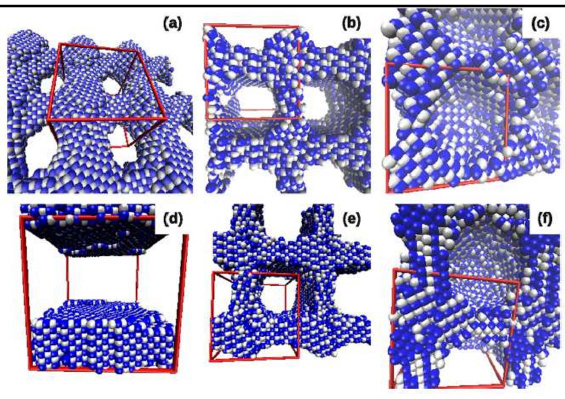


Fig. 1. Binding energy per nucleon for systems obtained with the Pandharipande medium potential with simple cubic (B1), body centered cubic (B2) and diamond (B3) crystal lattices, and using molecular dynamics (CMD) at $T = 0.001$ MeV (CMD). The structures corresponding to the four labeled points ((a) through (d)) are shown in Fig. 2. Notice that around saturation density the CMD results agree with those of the simple cubic lattice.



. 14. (Color online.) Comparison of structures for the Pandharipande medium potential with $A = 1728$ (top r
l $A = 4096$ (bottom row) for densities $\rho = 0.04$ fm^{-3} (panels (a) and (d)), $\rho = 0.08$ fm^{-3} (panels (b) and (e))
= 0.1 fm^{-3} (panels (c) and (f)).

Condiciones periódicas de contorno no aseguran simulación de sistema infinito

Sin embargo , con coulomb...

Physics
spotlighting exceptional research

Home | About | Browse | APS Journals

Synopsis: Italian Delicacies Served Up in a Neutron Star Crust

C. O. Dorso *et al.*, Phys. Rev. C (2012)

Topological characterization of neutron star crusts
C. O. Dorso, P. A. Giménez Molinelli, and J. A. López
Phys. Rev. C **86**, 055805 (2012)
Published November 29, 2012

The matter in the outermost layer, or "crust," of a neutron star (the remnant of a supernova) is believed to host a variety of phases in which dense regions of nucleons are filled with voids of lower density. The presence of the phases, euphemistically referred to as "nuclear pasta" because of their resemblance to the shapes of lasagna, gnocchi, and spaghetti, may affect the emission of neutrinos, the primary mechanism by which the neutron star cools. In *Physical Review C*, Claudio Dorso of the University of Buenos Aires, Argentina, and colleagues report that a set of topological and geometric descriptors can accurately identify each pasta phase predicted by dynamical simulations, a labeling scheme that could be used to directly map the shape of a pasta phase to its effect on neutrino emission and neutron star cooling.

Dorso *et al.* classify a particular pasta phase by defining its volume, area, mean curvature, and its Euler characteristic—a number that represents the phase's topology. Although pasta phases have long been studied theoretically, the authors' calculations are some of the first to use a classical molecular dynamics model that is consistent with low- to medium-energy nuclear reactions. Moreover, they make no initial assumptions about the phase structure, which should help clarify the balance of forces and parameters that lead to the formation of each phase. – *Joseph Kapusta*

$$
\left\{
\begin{aligned}
V_{np}(r) &= V_r\big[\exp(-\mu_r r)/r - \exp(-\mu_r r_c)/r_c\big] \\
&\quad - V_a\big[\exp(-\mu_a r)/r - \exp(-\mu_a r_c)/r_c\big], \\
V_{nn}(r) &= V_0\big[\exp(-\mu_0 r)/r - \exp(-\mu_0 r_c)/r_c\big],
\end{aligned}
\right.
$$

$$
\left\{ \; V_C^{(Scr)}(r) = \frac{e^2}{r}\exp(-r/\lambda), \right.
$$

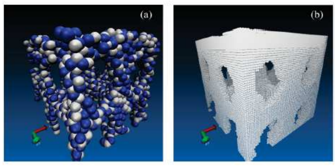
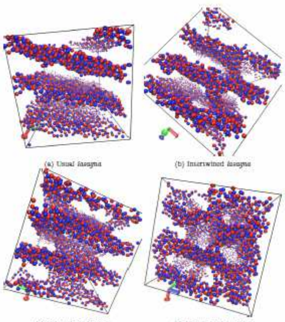


FIG. 8. (Color online) Sample transformation of a nuclear structure to a corresponding polyhedron. The structure corresponds to a case with $x = 0.5$, $\rho = 0.33\ \mathrm{fm}^{-3}$, and $T = 0.1$ MeV.



(a) Usual *lasagna* (b) Intertwined *lasagna*

(c) Intertwined *lasagna* (d) Unusual pasta shape

FIG. 9: Spatial distribution for $\rho = 0.05\,\mathrm{fm}^{-3}$ for different initial conditions. We see that we have the usual *lasagna*, but also intertwined *lasagnas* and other structures that don't resemble usual pasta. Despite being different from the usual pasta phases, these shapes have a peak for low momentum in the structure factor.

Beyond Nuclear Pasta: Phase Transitions and Neutrino Opacity of Non-Traditional Pasta

P. N. Alcain, P. A. Giménez Molinelli and C. O. Dorso
Departamento de Física, FCEyN, UBA and IFIBA, Conicet, Pabellón 1, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina and IFIBA-CONICET

(Dated: June 9, 2014)

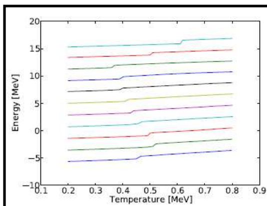


FIG. 1: Energy as a function of temperature for different densities. We see that there is a discontinuity in the range of $T_l = 0.35\,\mathrm{MeV}$ to $T_h = 0.65\,\mathrm{MeV}$, depending on the density, a signal of a first-order phase transition. In the figure, densities range from $\rho = 0.03\,\mathrm{fm}^{-3}$ and $\rho = 0.13\,\mathrm{fm}^{-3}$, increasing $\Delta\rho = 0.01\,\mathrm{fm}^{-3}$ upwards.

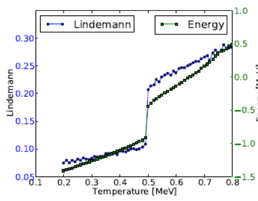


FIG. 2: Lindemann coefficient and energy as a function of temperature for a chosen density, $\rho = 0.05\,\mathrm{fm}^{-3}$. The sudden change in their value is a signal of a solid-liquid phase transition. We can see that both discontinuities are at the same temperature

$$
\Delta_L = \frac{\sqrt{\sum_i \langle \Delta r_i^2 / N \rangle}}{a}
$$

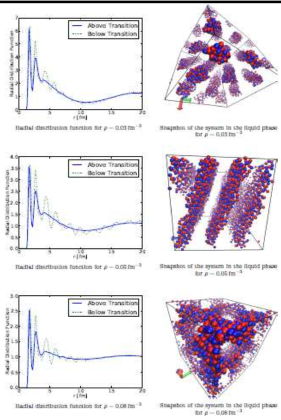


FIG. 3: Radial distribution function for different densities, both below and above the transition temperature, and snapshots of the system in the liquid phase. Although the first peaks of the distribution are in the same position for both temperatures, the following peaks, which exhibit a long-range order typical of solids, are only present below the transition temperature.

Un calculito con MMC

(mi primer calculito de MMC)

Volume 188, number 3 PHYSICS LETTERS B 16 April 1987

CLASSICAL SIMULATION OF THE FERMI GAS

Claudio DORSO, Sergio DUARTE [1] and Jørgen RANDRUP

Nuclear Science Division, Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, CA 94720, USA

El potencial de Pauli

Métrica en Γ space

$$s_{ij}^2 = p_{ij}^2/p_0^2 + q_{ij}^2/q_0^2 \,,$$

$$\begin{aligned} V(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) &= V_0 (2\pi p_0^2)^{-D/2} \mathrm{e}^{-p^2/2p_0^2} (2\pi q_0^2)^{-D/2} \mathrm{e}^{-q^2/2q_0^2} h^D \\ &= V_0 (\hbar/p_0 q_0)^D \mathrm{e}^{-s^2/2} \,. \end{aligned} \tag{11}$$

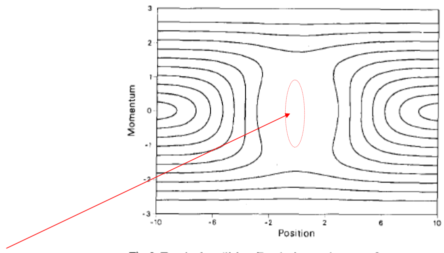


Fig. 2. Two-body collision. For the interesting part of phase space, the figure shows the trajectories of two particles as they approach each other head-on from a large distance, interact via our standard Pauli potential [the gaussian form (11) with the parameters given in (26)], and ultimately reseparate. The position is in units of fm and the momentum is in units of $\mathrm{MeV} \times 10^{-22}$ s/fm.

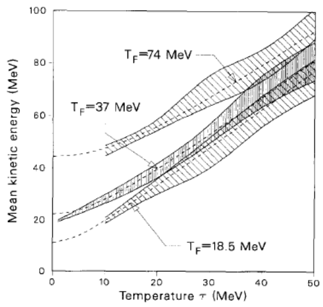


Fig. 3. Mean kinetic energy. The figure shows the mean kinetic energy as a function of the temperature, for three different densities characterized by the Fermi kinetic energies $T_F = 18.5$, 37, 74 MeV. The dashed curves are the exact Fermi-gas values. The results obtained from the Metropolis calculation with our standard Pauli potential (11) are shown as shaded bands, whose widths correspond to the associated statistical error.

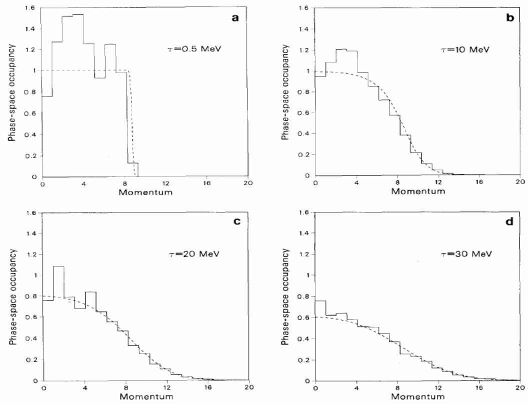


Fig. 4. Phase-space occupancy. The figure displays the phase-space occupancy $f^{(1)}$ as a function of the magnitude of the momentum (in units of MeV$\times 10^{-22}$ s/fm), for four different values of the temperature. The dashed curves are the exact Fermi-gas values, while the histograms are calculated with our standard Pauli potential (11).

Metropolis Monte Carlos - Ising

Para estudiar el Ising recordamos que el Hamiltoniano de este sistema es

$$H = -\epsilon \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

Podemos calcular

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

$$C = \frac{1}{kT^2}\left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2\right)$$

Del mismo modo para la suceptibilidad

Recordemos que

Microcanonico $\Rightarrow$ sistemas con una energia dada
Canonico$\Rightarrow$ sistemas con muchas energias
como fluctua la energia en Canonico?

$$U = \langle H \rangle = \frac{\int dpdq H e^{-\beta H}}{\int dpdq e^{-\beta H}}$$

$$0 = \frac{\int dpdq (U-H) e^{-\beta H}}{\int dpdq e^{-\beta H}} = \int dpdq (U-H) e^{-\beta H} e^{\beta A}$$

o sea $\langle U - H \rangle = 0$, trabajando con la derivada $\frac{\partial}{\partial \beta}$

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} + \int dpdq(U-H)e^{-\beta(H-A)}\left[-[H(p,q)-A(V,T)] + \beta\frac{\partial A}{\partial \beta}|_V\right] = 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} + \int dpdq(U-H)e^{-\beta(H-A)}\left[-H(p,q)+A(V,T)-T\frac{\partial A}{\partial T}\right] = 0$$

pero $A(V,T) - T\frac{\partial A}{\partial T} = U$

$$\boxed{\frac{\partial U}{\partial \beta} + \int dpdq(U-H)^2 e^{-\beta(H-A)} = 0 = \frac{\partial U}{\partial \beta} + \langle (U-H)^2 \rangle =}$$

donde $\langle (U-H)^2 \rangle = \langle U^2 \rangle - 2U\langle H \rangle + \langle H^2 \rangle = -\langle H \rangle^2 + \langle H^2 \rangle$

luego $-\langle H \rangle^2 + \langle H^2 \rangle = \frac{\partial U}{\partial \beta} = kT^2\frac{\partial U}{\partial T}$; con $\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial U}{\partial T}|_V$

$$\boxed{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = kT^2 C_V}$$

$\langle H \rangle \propto N$, $C_V \propto N \Rightarrow \langle H^2 \rangle/N^2 - \langle H \rangle^2/N^2 = kT^2 C_V/N^2 = kT^2\frac{C_V}{N}\frac{1}{N}$

$$\boxed{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 = kT^2 c_V \frac{1}{N}}$$

O sea que

$$\boxed{\boxed{C = \frac{1}{kT^2}\left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2\right)}}$$

Del mismo modo para la suceptibilidad

$$\boxed{\boxed{\chi = \lim_{H\to 0}\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H}}}$$

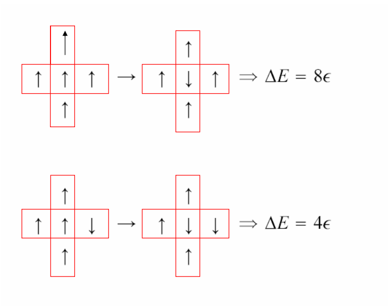
$$\chi = \lim_{H\to 0}\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H}$$

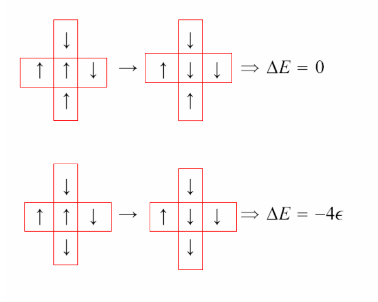
$$\boxed{\chi = \frac{1}{kT}\left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2\right)}$$

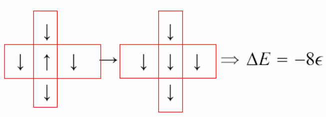
En el caso de MMC las probas de transicion estan dadas por

$$\boxed{p_{ij} = \exp(-\beta\Delta E)}$$

Si pensamos en "single spin flip" las posibilidades son las siguientes







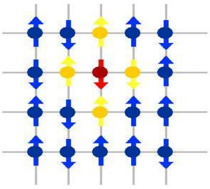
Luego conociendo estos casos tengo todas las probabilidades de MMC

Condiciones periódicas de contorno

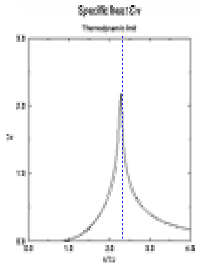
	+	+	+	-	-	+	
-	-	-	+	-	-	-	-
-	+	+	-	-	+	-	+
-	+	+	+	+	-	-	+
+	+	-	-	+	-	+	+
+	+	-	-	+	-	+	+
+	+	+	+	-	-	+	+
	-	-	+	-	-	-	

$$C = (\Delta E)^2 / k_B T^2 , \;\; \chi = (\Delta M)^2 / k_B T$$

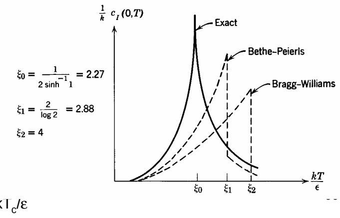
$$(\Delta E)^2 \equiv \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 , \;\; (\Delta M)^2 \equiv \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$$

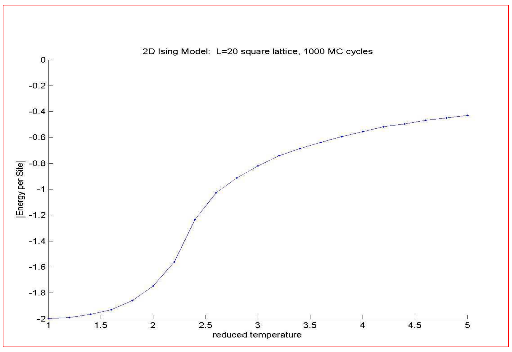


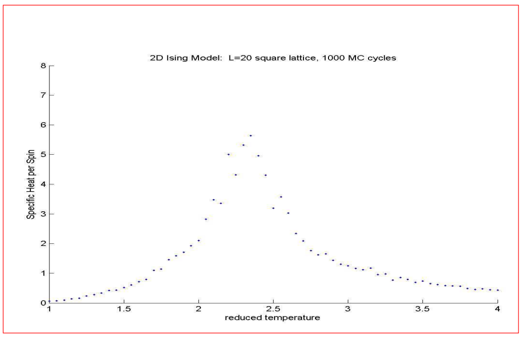
	Onsager	*Bethe – Peierls*	*Bragg – Williams*
kT_c/ε	2.27	2.88	4
	div. logaritmica	pico	pico



kT_c/ε







Realización practica:

Dimensión tamaño de la red

Acoplamiento en unidades de kT (ε📫kT)

Termalizacion pasos que no se consideran

Subcadenas

Muestras

Pasos intermedios

Las cadenas se componen de K subcadenas
en las que se toman N muestras
Separadas M pasos

Total de pasos K*N*M

1 paso es intentar invertir TODOS los spines de la red

PHYSICAL REVIEW VOLUME 184, NUMBER 1 5 AUGUST 1969

Phase Transitions of the Lennard-Jones System*

Jean-Pierre Hansen and Loup Verlet
Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies, 91-Orsay, France†

(Received 19 February 1969)

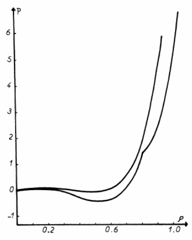


FIG. 1. Reduced pressure versus reduced density for the Lennard-Jones "homogenized" fluid (upper curve) and the corresponding cell-model (lower curve) at the reduced temperature $T=1.15$. Both isotherms exhibit a van der Waals loop and the cell-model isotherm exhibits an angular point around the reduced density $\rho=0.83$.

So as to obtain a faster convergence in the coexistence region, we force the system into an artificial single-phase state. In order to do so, we divide the volume into ν cubic cells of equal size and we require the number of particles in each cell to vary only between $\langle n\rangle-\delta n$ and $\langle n\rangle+\delta n$. Here $\langle n\rangle=864/\nu$ is the average number of particles per cell and δn is a fixed number. Practically this constraint is realized in the following manner: At each Monte Carlo move, we ask if the particle under consideration tries to move outside of its cell. Should it do so, the move is prevented if it violates the constraint. The constraint parameters ν and δn are at our disposal. They must be chosen in such a way as to prevent the phase separation as well as possible without affecting the thermodynamical properties of the system in the physical, one-phase region.

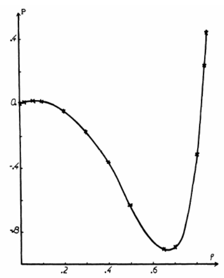


FIG. 2. Reduced pressure versus reduced density for the "homogenized" fluid at the reduced temperature $T=0.75$.

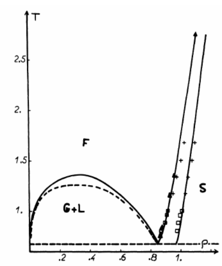


FIG. 3. Coexistence curve for the Lennard-Jones system (temperatures and densities in reduced units). The solid line gives our theoretical results. The broken line gives the experimental argon liquid-gas coexistence line taken from Michels *et al.*[17,22] The circles are experimental argon melting data taken from van Witzenburg and Stryland,[20] the crosses are experimental melting data taken from Crawford and Daniels.[21] The triangles indicate the crystallization densities according to the "law" stating that crystallisation occurs whenever $S(k_0)$ reaches the value 2.85.

peratures ($T=0.75$) the transition density for the

PHYSICAL REVIEW VOLUME 165, NUMBER 1 5 JANUARY 1968

Computer "Experiments" on Classical Fluids. II. Equilibrium Correlation Functions*

LOUP VERLET†
Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, New York, New York

(Received 21 July 1967)

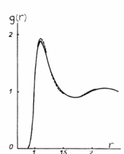


FIG. 1. The pair distribution function $g(r)$ as a function of r for $T=1.46$ and $\rho=0.4$. Solid line: results obtained both from molecular dynamics and from the PY II equation. Dashed line: PY equation.

[10] L. Verlet and D. Levesque, Physica (to be published).

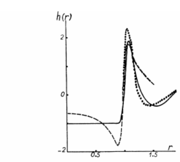


FIG. 2. Correlation function $h(r)=g(r)-1$ as a function of r for $T=0.88$ and $\rho=0.85$. ——: molecular dynamics. ······: PY equation - - -: $h_1(r)$ as given by Eq. (31).

[11] M. Coppersmith and R. Brout, J. Chem. Phys. **130**, 2539 (1963); P. C. Hemmer, J. Math. Phys. **5**, 75 (1964); J. L. Lebowitz, G. Stell, and S. Baer, *ibid.* **6**, 1282 (1965).

PHYSICAL REVIEW VOLUME 159, NUMBER 1 5 JULY 1967

Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules*

LOUP VERLET†
Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, Ne

(Received 30 January 1967)

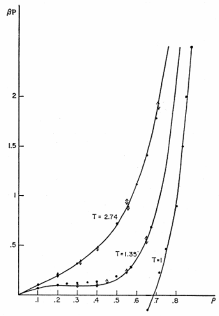


FIG. 2. For the isotherms $T=2.74$, $T=1.35$, and $T=1$, βp is represented as a function of ρ. The low-density parts of the curves were obtained with the help of the PY and PY II equations (Ref. 13). The arrows show the results of Monte Carlo calculations (Refs. 1, 13). The dots are the experimental results in argon (Refs. 10–12).

Efecto aumentar el numero de pasos en MMC

Sea $W(\alpha, n)$ la probabilidad con que la configuracion α aparece en el paso n de la simulacion de Monte Carlo

Sea p_α la probabilidad termodinamica de la configuracion α

La diferencia entre ambas es $D_n = \sum_\alpha |W(\alpha, n) - p_\alpha|$

De donde

$$D_{n+1} = \sum_\alpha |W(\alpha, n+1) - p_\alpha|$$

.

usando que $W(\alpha, n+1) = \sum_{\alpha'} W(\alpha', n) p_{\alpha'\alpha}$

$$D_{n+1} = \sum_\alpha \left| \sum_{\alpha'} W(\alpha', n) p_{\alpha'\alpha} - p_\alpha \right|$$

.

usando que $\sum_{\alpha'} p_\alpha p_{\alpha\alpha'} = p_\alpha \sum_{\alpha'} p_{\alpha\alpha'} = p_\alpha$

$$D_{n+1} = \sum_\alpha \left| \sum_{\alpha'} [W(\alpha', n) p_{\alpha'\alpha} - p_\alpha p_{\alpha\alpha'}] \right|$$

.

Luego

$$D_{n+1} = \sum_\alpha \left| \sum_{\alpha'} [W(\alpha', n) - p_\alpha] p_{\alpha'\alpha} \right|$$

.

De donde

$$D_{n+1} \le \sum_{\alpha\alpha'} |W(\alpha', n) - p_{\alpha'}| p_{\alpha'\alpha}$$

.

$$D_{n+1} \le \sum_{\alpha\alpha'} |W(\alpha', n) - p_{\alpha'}| p_{\alpha'\alpha}$$

$$D_{n+1} \le \sum_{\alpha'} |W(\alpha', n) - p_{\alpha'}|$$

$$D_{n+1} \le D_n$$

Correlaciones

Al generar la configuracion a paso $n+1$ haciendo un cierto numero de cambios sobre la configuracion a paso n es probable que las mismas resulten altamente correlacionadas

Una forma de decidir a que paso puedo realizar una medicion de una cierta variable X sin que la misma este contaminada por la nombrada correlacion es mediante el calculo de la funcion de autocorrelacion

$$\boxed{C_{XX}(k) = \frac{\langle X_{\alpha_j} X_{\alpha_{j+k}} \rangle - \langle X_{\alpha_j} \rangle^2}{\langle X^2_{\alpha_j} \rangle - \langle X_{\alpha_j} \rangle^2}}$$

donde X_{α_j} es el valor de X en la configuracion α_j a paso j y esta difinido tal que $C_{XX}(0) = 1$

Los valores medios se calculan a lo largo de una dada trayectoria en el espacio de las configuraciones

$$\boxed{\langle X_{\alpha_j} X_{\alpha_{j+k}} \rangle = \frac{1}{k} \sum_{k'=1}^{k} X_{\alpha_j} X_{\alpha_{j+k'}}}$$

Camino aleatorio y la ecuacion de difusion

Sea un camino aleatorio unidimensional

$$P_1(n_2 l, s\tau) = \sum_{n_1} P_1(n_1 l, (s-1)\tau) P_{1/1}(n_1 l, (s-1)\tau | n_2 l, s\tau)$$

como tenemos que las probabilidades de salto a derecha e izquierda son iguales (involucran un salto de longitud l)

Donde debe estar para que se pueda dar el salto?

$$\boxed{P_{1/1}(n_1 l, (s-1)\tau | n_2 l, s\tau) = \tfrac{1}{2}\delta(n_2 - (n_1 + 1)) + \tfrac{1}{2}\delta(n_2 - (n_1 - 1)}$$

Con lo cual quedara:

$$\boxed{P_1(nl, s\tau) = \tfrac{1}{2} P_1((n-1)l, (s-1)\tau) + \tfrac{1}{2} P_1((n+1)l, (s-1)\tau)}$$

Restando de ambos lados div. Por τ

Lo cual puede ser reescrito como:

$$\frac{P_1(nl,s\tau) - P_1(nl,(s-1)\tau)}{\tau} =$$

$$= \frac{P_1((n-1)l,(s-1)\tau) + P_1((n+1)l,(s-1)\tau) - 2P_1(nl,(s-1)\tau)}{2\tau}$$

$$= \frac{l^2}{2\tau} \left[\frac{P_1((n-1)l,(s-1)\tau) + P_1((n+1)l,(s-1)\tau) - 2P_1(nl,(s-1)\tau)}{l^2} \right]$$

Mult. y div por l²

Tomemos en cuenta que:

Sea ahora una funcion $f(x)$; $f(x) = f_0 + x f' + \frac{x^2}{2!} f'' + \ldots$

Desarrollamos alrededor de 0

en $x = 0 \pm h$

$f(\pm h) = f_0 \pm h f' + \frac{h^2}{2!} f'' \pm \frac{h^3}{3!} f''' \ldots$

$$f(\pm h) = f_0 \pm hf' + \frac{h^2}{2!}f'' \pm \frac{h^3}{3!}f''' \ldots$$

Si ahora hacemos $f(h) - f(-h)$ obtenendremos

$$\left[\Rightarrow f(h) - f(-h) = 2hf' + 2\frac{h^3}{3!}f'''\right]$$

$$f' = \frac{f(h)-f(-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f''' + O(h^4)$$

Del mismo modo podemos hacer $f(h) + f(-h)$ para obtener

$$f(h) - 2f(0) + f(-h) = h^2 f'' + O(h^4)$$

de donde $\boxed{f'' \sim \frac{f(h)-2f(0)+f(-h)}{h^2}}$

O sea que la expresion encontrada enteriormente es una derivada segunda y una primera.

$$\frac{P_1(nl,s\tau) - P_1(nl,(s-1)\tau)}{\tau} =$$

$$= \frac{l^2}{2\tau}\left[\frac{P_1((n-1)l,(s-1)\tau) + P_1((n+1)l,(s-1)\tau) - 2P_1(nl,(s-1)\tau)}{l^2}\right]$$

Sea ahora $x = nl$; $t = s\tau$; $D = l^2/2\tau$, reescribimos

$$\boxed{\frac{\partial P_1(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 P_1(x,t)}{\partial x^2}}$$

Esto se llama ecuacion de Fokker-Planck

Sea la condicion inicial $P_1(x,0) = \delta(x)$ (Dirac)

Sea $P_1(k,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx P_1(x,t)\, e^{ikx}$ (Fourier)

la Ecuacion de FP queda

$$\frac{\partial P_1(k,t)}{\partial t} = -Dk^2 P_1(k,t)$$

Que se resuelve para dar

$$P_1(k,t) = Ae^{-Dk^2 t}$$

con A=1 por normalizacion

Entonces

$$P_1(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-Dk^2 t} e^{-ikx} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt}$$

Que ya lo conocemos

Ecuacion Maestra

Queremos calcular la ecuacion de evolucion temporal para la densidad de probabilidad de un cuerpo

$$\boxed{\frac{dP_1(y,t)}{dt} = \lim_{\tau \to 0} \frac{P_1(y,t+\tau) - P_1(y,t)}{\tau}}$$

Recordemos que

$$\boxed{P_1(y_2,t_2) = \int P_1(y_1,t_1) P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_2)\, dy_1}$$

En la que aparecen las probabilidades de transicion.

a tiempo $t_2 = t_1 + \tau$, adopta la forma

$$P_1(y_2,t_1+\tau) = \int P_1(y_1,t_1)P_{1/1}(y_1,t_1|y_2,t_1+\tau)dy_1$$

y llamamos $t_1 \rightarrow t$

(t,t+ τ)

(t,t)

$$\boxed{\text{Al reescribir la derivada} \quad \frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \lim_{\tau\rightarrow 0}\left[\frac{\int P_1(y_1,t)P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau)dy_1 - \int P_1(y_1,t)P_{1/1}(y_1,t|y_2,t)dy_1}{\tau}\right]}$$

o sea

$$\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \lim_{\tau\rightarrow 0}\frac{\int P_1(y_1,t)[P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau)-P_{1/1}(y_1,t|y_2,t)]dy_1}{\tau}$$

$$\boxed{\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \int P_1(y_1,t)\left\{\lim_{\tau\rightarrow 0}\frac{[P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau)-P_{1/1}(y_1,t|y_2,t)]}{\tau}\right\}dy_1}$$

El termino a estudiar es

$$\boxed{\lim_{\tau\rightarrow 0}\frac{[P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau)-P_{1/1}(y_1,t|y_2,t)]}{\tau}}$$

para lo cual expandimos $P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau)$ con la condicion de contorno que se debe conservar la normalizacion $\int P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau)dy_2 = 1$

El desarrollo resultante es

$$\boxed{P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau) \approx P_{1/1}(y_1,t|y_2,t) + \tau W_t(y_1,y_2) - \tau\int dy W_t(y_1,y)\delta(y_1-y_2)}$$

Donde

1) $W_t(y_1,y_2) = \frac{\partial P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau)}{\partial t}$ es la proba de transicion por unidad de tiempo

2) $P_{1/1}(y_1,t|y_2,t) = \delta(y_1-y_2)$

3) $-\tau\int dy W_t(y_1,y)\delta(y_1-y_2)$ es el termino que asegura la conservacion de la norma.

$$\boxed{\text{Esto puede ser reescrito} \quad P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau) \approx \left[1-\tau\int dy W_t(y_1,y)\right]\delta(y_1-y_2) + \tau W_t(y_1,y_2)}$$

i) $\tau\int dy W_t(y_1,y)$ es la proba de transicion de y_1 a cualesquiera otro estado en tiempo τ

ii) entonces $\left[1-\tau\int dy W_t(y_1,y)\right]$ es la proba de que no haga esas transiciones en tiempo τ

iii) $\tau W_t(y_1,y_2)$ es la proba de hacer la transicion $y_1 \rightarrow y_2$ en el tiempo $t_1 \rightarrow t_1+\tau$

Cuando reemplazamos esto en la ecuacion original

$$\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \lim_{\tau\to 0}\frac{\int P_1(y_1,t)[P_{1/1}(y_1,t|y_2,t+\tau)-P_{1/1}(y_1,t|y_2,t)]dy_1}{\tau}$$

$$\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \lim_{\tau\to 0}\frac{\int P_1(y_1,t)\left[\left[1-\tau\int dyW_t(y_1,y)\right]\delta(y_1-y_2)+\tau W_t(y_1,y_2)-\delta(y_1-y_2)\right]dy_1}{\tau}$$

$$\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \lim_{\tau\to 0}\frac{\int P_1(y_1,t)\left[-\cancel{\tau}\int dyW_t(y_1,y)\delta(y_1-y_2)+\cancel{\tau}W_t(y_1,y_2)\right]dy_1}{\cancel{\tau}}$$

$$\boxed{\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \int P_1(y_1,t)\left[-\int dyW_t(y_1,y)\delta(y_1-y_2)+W_t(y_1,y_2)\right]dy_1}$$

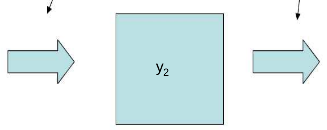
$$\boxed{\begin{aligned}\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} &= \int P_1(y_1,t)W_t(y_1,y_2)dy_1\\ &\quad -\int dy\int P_1(y_1,t)W_t(y_1,y)\delta(y_1-y_2)dy_1\end{aligned}}$$

Finalmente

$$\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \int P_1(y_1,t)W_t(y_1,y_2)dy_1 - \int dyP_1(y_2,t)W_t(y_2,y)$$

$$\boxed{\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \int P_1(y_1,t)W_t(y_1,y_2)dy_1 - P_1(y_2,t)\int dyW_t(y_2,y)}$$

$$\frac{dP_1(y_2,t)}{dt} = \underbrace{\int P_1(y_1,t)W_t(y_1,y_2)dy_1}_{\text{ganancia}} - \underbrace{P_1(y_2,t)\int dyW_t(y_2,y)}_{\text{perdida}}$$



Algo sobre La ecuación Maestra

Adoptamos la siguiente notacion

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_m\{W_{m,n}p_m(t) - W_{nm}p_n(t)\}$$

$$\sum_m W_{nm}p_n(t) = p_n(t)\sum_m W_{nm} = p_n(t)$$

Sea

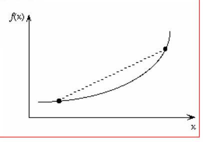
$$\boxed{\overline{W}_{nm} = W_{nm} - \delta_{nm}\sum_m W_{nm}}$$

De esta forma $\boxed{\dot{p}_n(t) = \sum_m \overline{W}_{nm}p_m(t)}$

Suponemos que existe la solucion p_n^e (solucion) de equilibrio estacionaria con $p_n^e > 0$

Sea una funcion convexa arbitraria $f(x)$

con $0 \le x < \infty$; $f(x) \ge 0$; $f''(x) > 0$



Sea ahora la cantidad H

$$H(t) = \sum_n p_n^e f\left(\frac{p_n(t)}{p_n^e}\right) = \sum_n p_n^e f(x_n)$$

Se ve que $H(t) \ge 0$

$$\frac{dH(t)}{dt} = \sum_{nm} f'(x_n)(W_{m,n} p_m(t) - W_{nm} p_n(t))$$

usando que los indices son mudos

$$= \sum_{nm} \underbrace{W_{m,n} p_m^e \left(x_n f'(x_n) - x_m f'(x_m)\right)}$$

Sea ahora una secuencia de numeros α_n

$$\sum_{nm} W_{m,n} p_m^e (\alpha_n - \alpha_m) = 0$$

pues

$$\sum_{nm} W_{m,n} p_m^e \alpha_n = \sum_n \alpha_n \sum_m W_{m,n} p_m^e = \sum_n \alpha_n p_n^e$$

y lo mismo para m y asi se verifica

(índices mudos)

Sean ahora los numeros $\alpha_n = f(x_n) - x_n f'(x_n)$

Entonces

$$\sum_{nm} W_{m,n} p_m^e \left(\left(f(x_n) - x_n f'(x_n)\right) - \left(f(x_m) - x_m f'(x_m)\right)\right) = 0$$

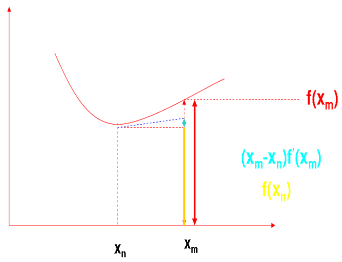
Sumando miembro a miembro con

$$\sum_{nm} W_{m,n} p_m^e \left(x_m f'(x_n) - x_m f'(x_m)\right) = \frac{dH(t)}{dt}$$

para obtener

$$\sum_{nm} W_{m,n} p_m^e \left(f(x_n) + (x_n - x_m) f'(x_n) - f(x_m)\right) = \frac{dH(t)}{dt}$$

$$\sum_{nm} W_{m,n} p_m^e \left(f(x_n) + (x_n - x_m) f'(x_n) - f(x_m)\right) = \frac{dH(t)}{dt}$$



se ve que $\frac{dH(t)}{dt} \le 0 \Rightarrow$ siempre decrece