

侍

Slowing down



Metropolis Monte Carlos - Ising

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

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

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 susceptibilidad

Entonces ***la gran mayoría de los estados tienen la misma energía.***

O sea que

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

Del mismo modo para la susceptibilidad

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

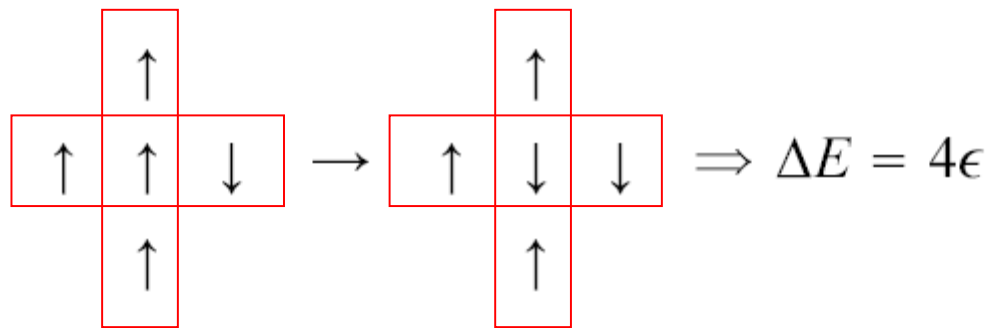
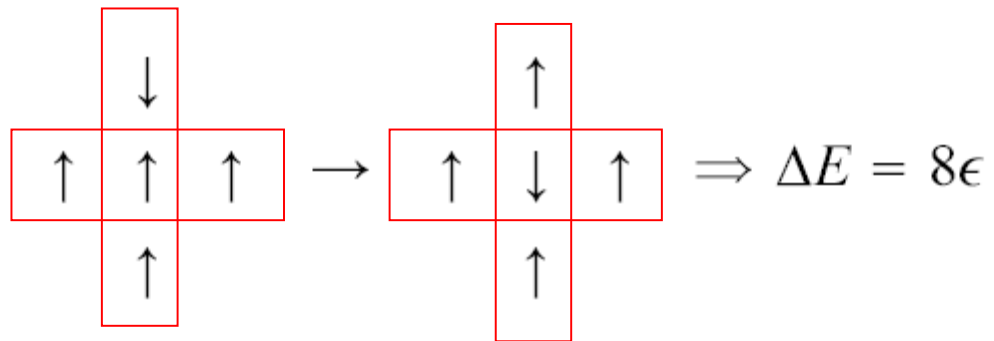
$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H}$$

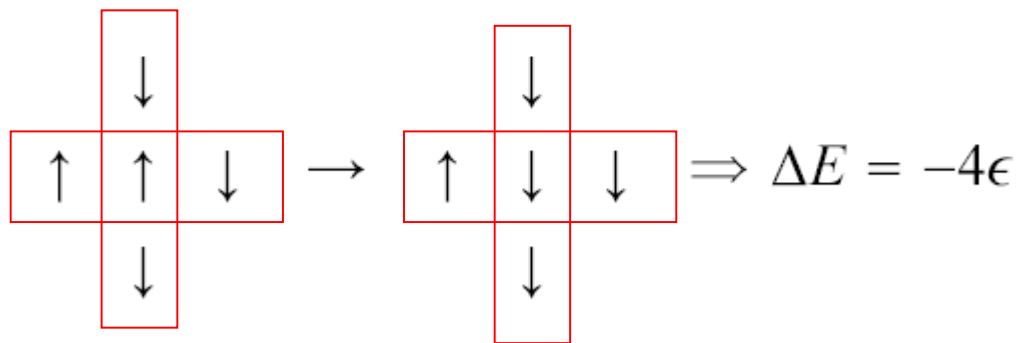
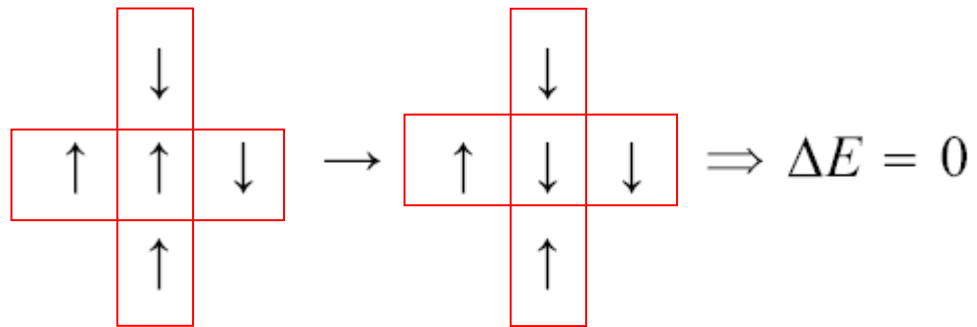
$$\chi = \frac{1}{kT} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right)$$

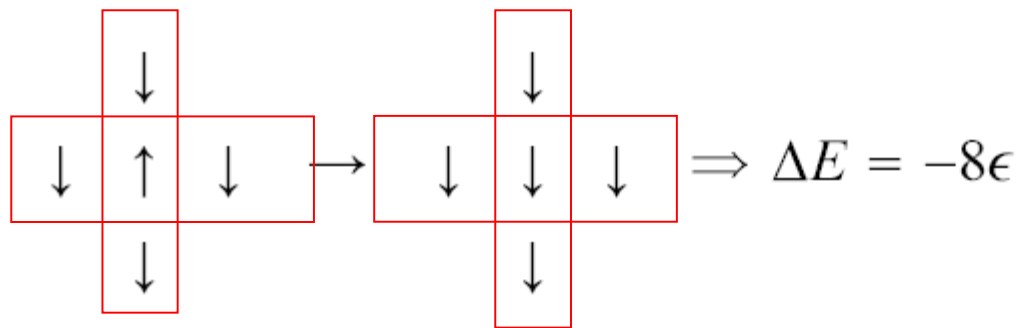
En el caso de MMC las probas de transición están dadas por

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

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







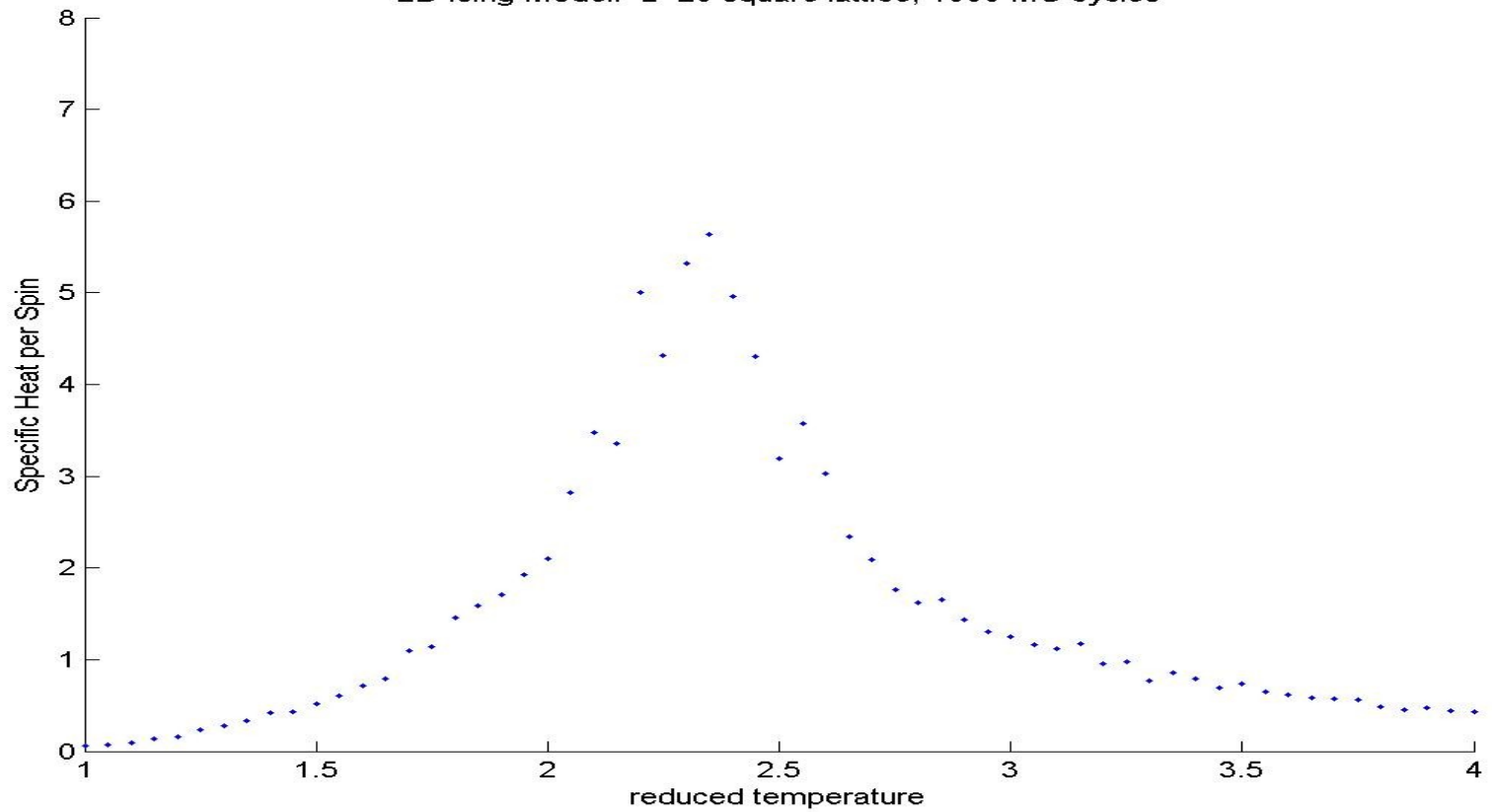
Luego conociendo estos casos tengo todas las probabilidades de MMC

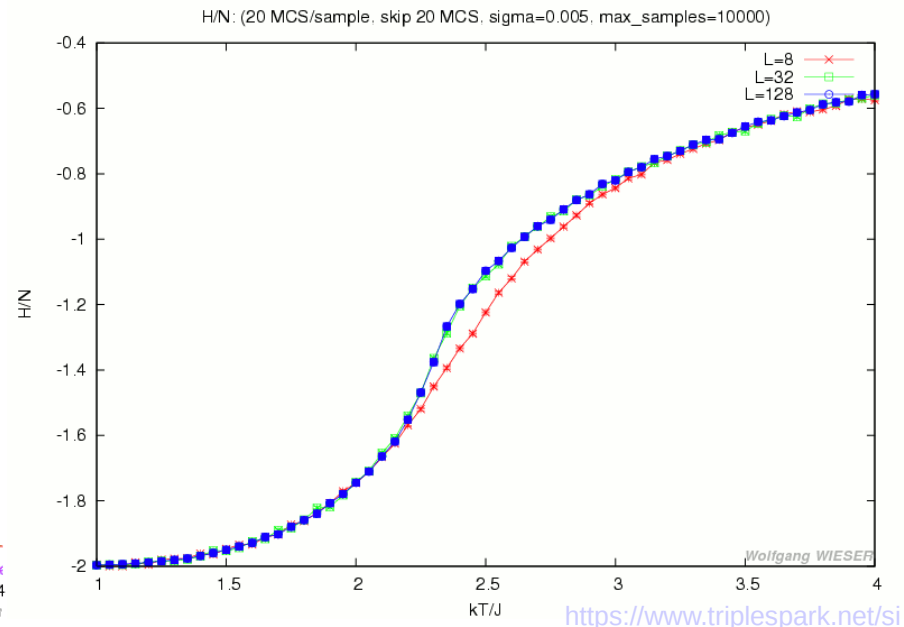
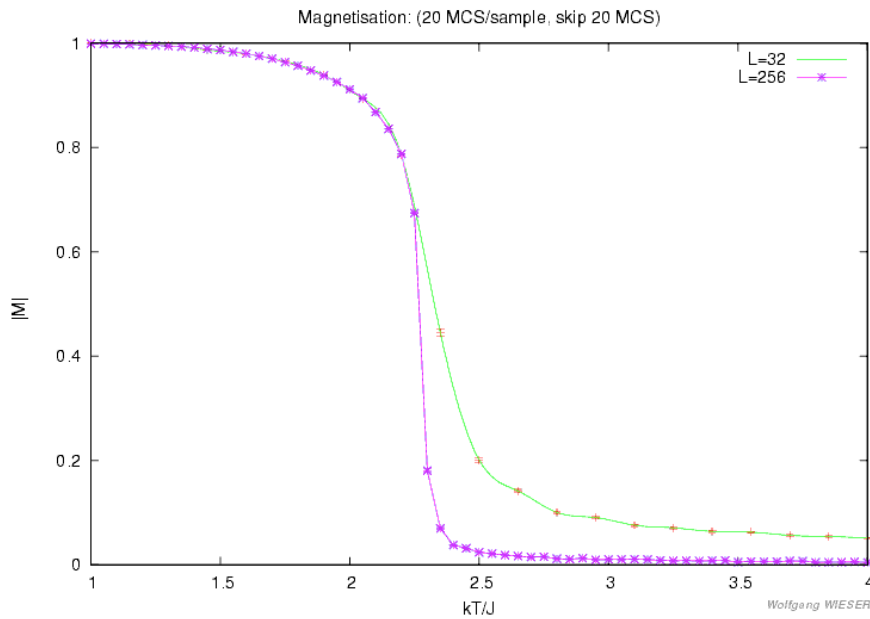
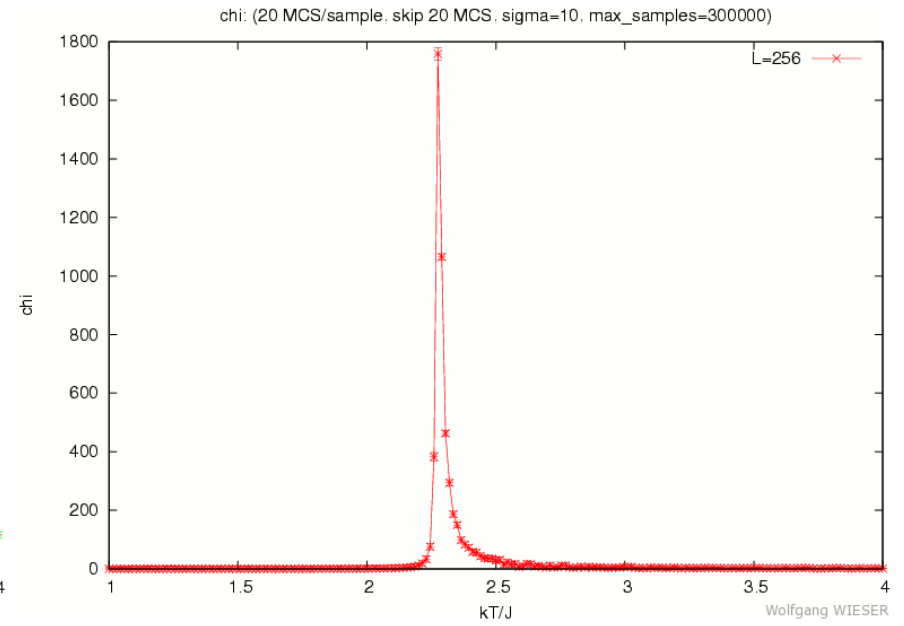
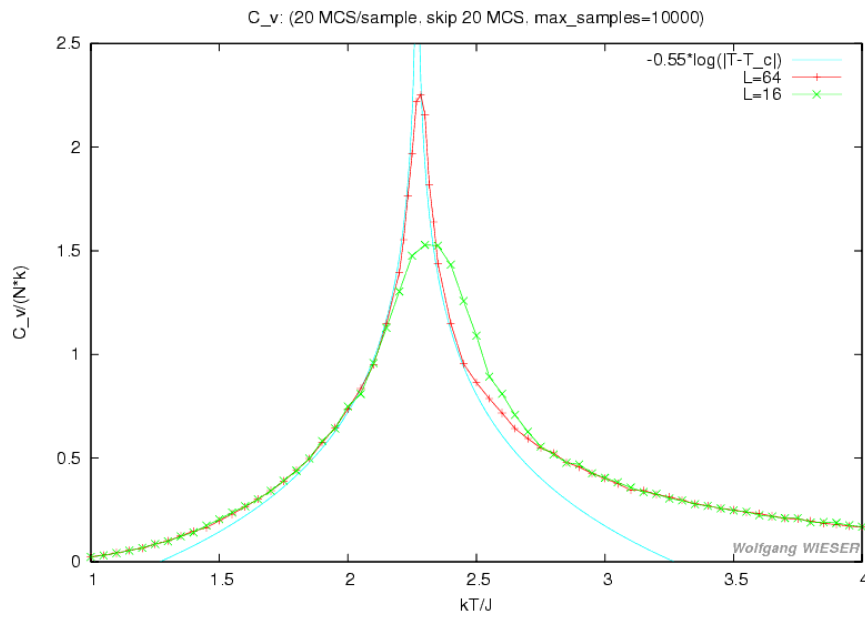
Condiciones periódicas de contorno



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

2D Ising Model: L=20 square lattice, 1000 MC cycles





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

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

$$\sum_{\alpha \alpha'} a(\alpha') b(\alpha, \alpha') \rightarrow \sum_{\alpha'} a(\alpha') \sum_{\alpha} b(\alpha, \alpha')$$

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

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

Correlaciones

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

Una forma de decidir a que paso puedo realizar una medición de una cierta variable X sin que la misma este contaminada por la nombrada correlación es mediante el cálculo de la función de autocorrelación

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

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

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

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

Respecto del ensemble Canónico

Suponemos que el Hamiltoniano del sistema es:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j} v_{ij}$$

Donde \mathbf{p}_i es el momento de la i ésima partícula.

Supondremos el término de interacción más sencillo:

$$v_{ij} = v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

Planteamos el sistema canonico

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \int d^{3N}p d^{3N}r \exp(-\beta \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}) \exp(-\beta \sum_{i<j} v_{ij})$$

Las integrales se factorizan

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int d^{3N}p \exp(-\beta \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}) \int d^{3N}r \exp(-\beta \sum_{i<j} v_{ij})$$

y la integral sobre los momentos se hace inmediatamente

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N!\lambda^{3N}} \int d^{3N}r \exp(-\beta \sum_{i<j} v_{ij})$$

donde como siempre

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}}$$

Sea la integral configuracional

$$Z_N(V, T) = \int \dots \int d^3r_1 \dots d^3r_N \exp(-\beta \sum_{i < j} v_{ij})$$

liquidos

Funciones Distribucion

Cual es la probabilidad de que, dado un sistema de N particulas a volumen V y temperatura T , la particula 1 este en dr en derredor de r_1 , la 2 en dr_2 respecto de $r_2 \dots$

$$P^{(N)}(r_1, r_2, r_3, \dots) dr_1 dr_2 dr_3 \dots = \frac{\exp(-\beta U_N) dr_1 \dots dr_N}{Z_N}$$

Donde Z_N es la integral configuracional.

Sea ahora $n < N$, la proyeccion de los anterior da

$$P^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \frac{\int \dots \int \exp(-\beta U_N) dr_{n+1} \dots dr_N}{Z_N}$$

Si consideramos que las partículas son indistinguibles, la proba de que una partícula este en dr_1 de r_1 .

$$\rho^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \frac{N!}{(N-n)!} P^{(n)}(r_1, \dots, r_n)$$

La $\rho^{(i)}$ mas simple es la $\rho^{(1)}$ que es la proba de encontrar una partícula en r_1

$$\frac{1}{V} \int \rho^{(1)}(r) dr = \frac{N}{V} = \rho = \text{densidad}$$

Definimos ahora la funcion de correlacion $g^{(n)}(r_1, \dots, r_n)$ tal que

$$\rho^{(n)} = \rho^n g^{(n)}$$

Con $\rho^n = [\rho^{(1)}]^n$

De donde

$$g^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \frac{V^n}{N^n} \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\int \dots \int \exp(-\beta U_N) dr_{n+1} \dots dr_N}{Z_N}$$

O sea que $g^{(n)} = \frac{\rho^{(n)}}{\rho^n} = \frac{\rho^{(n)}}{\left(\frac{N}{V}\right)^n}$

$$g^{(n)} = \frac{\rho^{(n)}}{\left(\frac{N}{V}\right)^n}$$

Comenzamos el análisis de la $g^{(2)}(r_1, r_2)$

(Se mide experimentalmente con gran precisión por ejemplo por scattering de rayos x).

Llamaremos $g^{(2)}(r_1, r_2) \equiv g(r) \equiv g(r_{12})$ (\Rightarrow válido para potenciales esféricos)

En este caso $\rho^{(2)} = \rho^2 g(r)$ que me da la probabilidad de que dada una partícula en una cierta posición tenga otra a una dada distancia para toda posición.

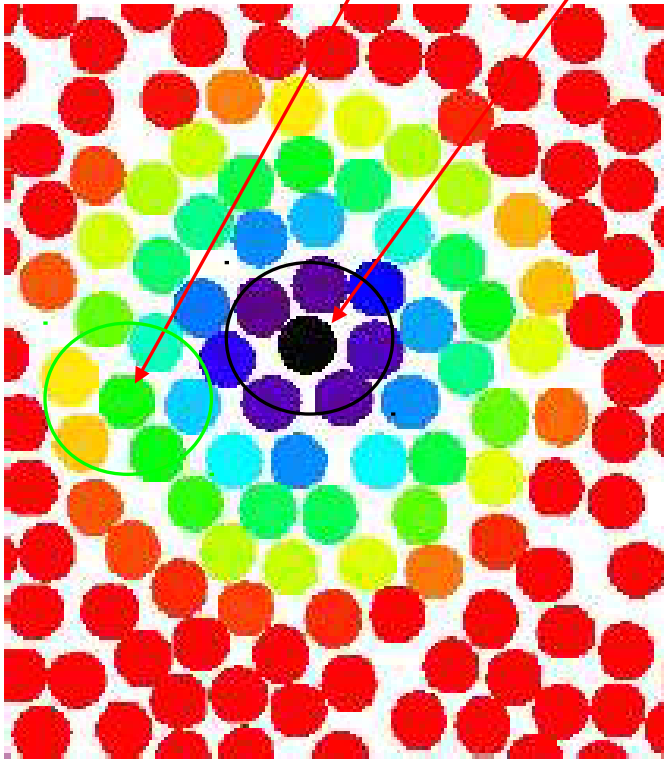
Supongamos que ahora coloco una partícula en el origen y estudio la probabilidad de encontrar otra a distancia r

$$\int \rho g(r) 4\pi r^2 dr = N - 1 \rightarrow N$$

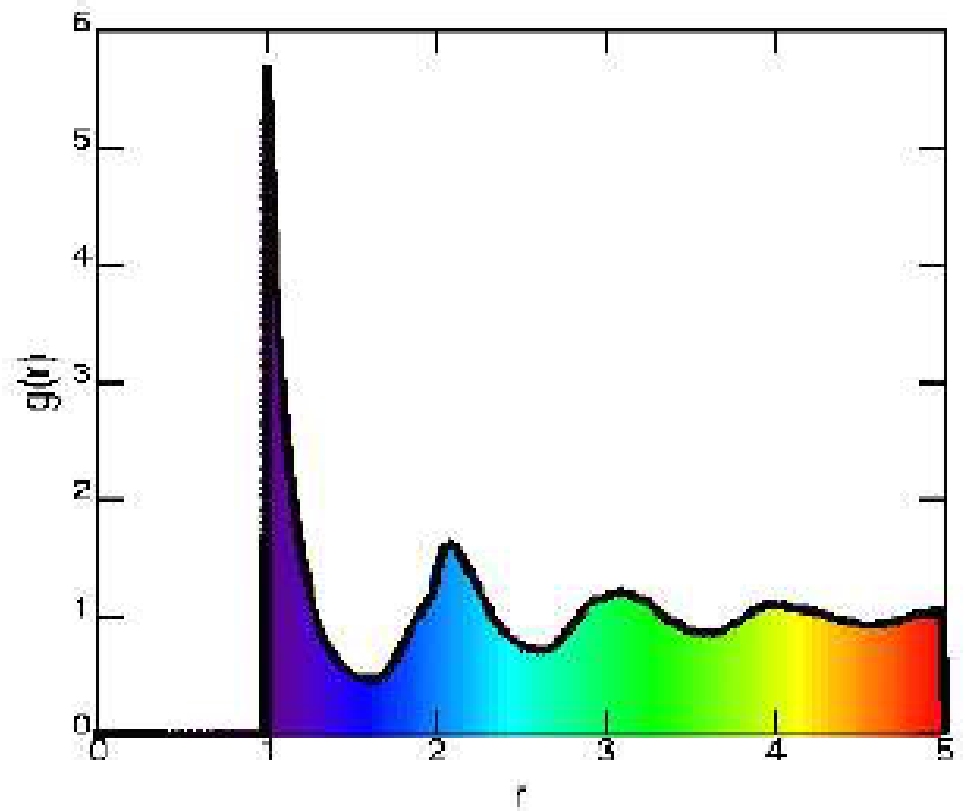
a) $g(r) \rightarrow 0$ con $r \rightarrow 0$, pues siempre hay repulsión " ∞ "

b) $g(r) \rightarrow 1$ con $r \rightarrow \infty$, pues el efecto de la partícula en el origen se borra y el sistema debería verse homogéneo a largas distancias

Si paso de la negra a esta verde (por ejemplo), nada cambia



Una configuracion



promedio sobre configuraciones

Relacion entre $g(r)$ y la termodinamica

a) La energia en funcion de $g(r)$

$$Q_N = \frac{Z_N}{N! \lambda^{3N}} \quad H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + U(x_1, y_1, \dots)$$
$$A = \frac{\ln Q_N}{(-\beta)}$$

Si suponemos un potencial de interaccion de dos cuerpos

$$U(x_1, y_1, \dots) = \sum_{i < j, i \neq j} u(|r_i - r_j|) = \sum_{i < j, i \neq j} u(r_{ij}) = \sum_{i < j, i \neq j} u_{ij}$$

$$E = \int \dots \int dpdq H \exp(-\beta H) / \int \dots \int dpdq \exp(-\beta H)$$
$$= \int \dots \int dpdq \left[\sum \frac{p_i^2}{2m} + U(x_1, y_1, \dots) \right] \exp(-\beta H) / \int \dots \int dpdq \exp(-\beta H)$$

Relacion entre $g(r)$ y la termodinamica

a) La energia en funcion de $g(r)$

$$Q_N = \frac{Z_N}{N! \lambda^{3N}} \quad H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + U(x_1, y_1, \dots)$$
$$A = \frac{\ln Q_N}{(-\beta)}$$

Si suponemos un potencial de interaccion de dos cuerpos

$$U(x_1, y_1, \dots) = \sum_{i < j, i \neq j} u(|r_i - r_j|) = \sum_{i < j, i \neq j} u(r_{ij}) = \sum_{i < j, i \neq j} u_{ij}$$

$$E = \int \dots \int dpdq H \exp(-\beta H) / \int \dots \int dpdq \exp(-\beta H)$$
$$= \int \dots \int dpdq \left[\sum \frac{p_i^2}{2m} + U(x_1, y_1, \dots) \right] \exp(-\beta H) / \int \dots \int dpdq \exp(-\beta H)$$

$$E = \frac{3}{2}NkT + kT^2 \left[\frac{\partial \log Z_N}{\partial T} \right]_{N,V} = \frac{3}{2}NkT + \mathbf{U}$$

$$\text{con } \mathbf{U} = \left[\int \dots \int U \exp(-\beta U) \right] / Z_N$$

$$\hat{U} = u_{12} + u_{13} + \dots$$

Como es la energia media de interaccion \mathbf{U} ?

$$\mathbf{U} = \frac{N(N-1)}{2} \frac{1}{Z_N} \int \dots \int \exp(-\beta U) \mathbf{u}_{12} d^3 r_1 d^3 r_2 \dots d^3 r_N$$

$$\mathbf{U} = \frac{N(N-1)}{2} \int \int \mathbf{u}_{12} d^3 r_1 d^3 r_2 \left\{ \frac{\int \dots \int \exp(-\beta U) d^3 r_3 \dots d^3 r_N}{Z_N} \right\}$$

Pero

$$\rho^{(2)}(r_1, r_2) = \frac{N!}{(N-2)!} \frac{\int \dots \int \exp(-\beta U_N) dr_{2+1} \dots dr_N}{Z_N}$$

$$g^{(n)} = \frac{\rho^{(n)}}{\left(\frac{N}{V}\right)^n}$$

$$\left\{ \frac{\int \dots \int \exp(-\beta U) d^3 r_3 \dots d^3 r_N}{Z_N} \right\} = \rho^{(2)}(r_1, r_2) \frac{(N-2)!}{N!} = \rho^{(2)}(r_1, r_2) \frac{1}{N(N-1)}$$

Entonces

$$U = \frac{1}{2} \iint u_{ij} d^3 r_1 d^3 r_2 \rho^{(2)}(r_1, r_2) = \frac{N^2}{2V} \int 4\pi r^2 u(r) d^3 r g^{(2)}(r)$$

De donde

$$\frac{E}{NkT} = \frac{3}{2} + \frac{\rho}{2kT} \int_0^\infty 4\pi r^2 u(r) d^3 r g^{(2)}(r, \rho, T)$$

que da el termino de equiparticion + la energia de interaccion de una particula con todas las demas y sumado sobre todas las particulas

b) Calculo de la presion

$$P = -\left(\frac{\partial A}{\partial V}\right) = kT\left(\frac{\partial \log Q_N}{\partial V}\right) = kT\left(\frac{\partial \log Z_N}{\partial V}\right)$$

Debemos hacer explicita la dependencia en V

Recordemos que

$$Z_N = \int_0^{V^{1/3}} \dots \int_0^{V^{1/3}} \exp(-\beta U) dx_1 dy_1 \dots dz_N$$

entonces escribimos :

$$x_i = V^{1/3} x'_i \Rightarrow dx_i = V^{1/3} dx'_i$$

De esta forma

$$Z_N = V^N \int_0^1 \dots \int_0^1 \exp(-\beta U) dx'_1 dy'_1 \dots dz'_N$$

Los terminos que aparecen en U dependen de la distancia relativa →

$$r_{ij} = V^{1/3} r'_{ij}, \text{ donde } r'_{ij} = \left[(x'_i - x'_j)^2 + (y'_i - y'_j)^2 + (z'_i - z'_j)^2 \right]^{1/2}$$

De donde escribimos

$$\frac{\partial}{\partial V} Z_N = \left\{ NV^{N-1} \int_0^1 \dots \int_0^1 \exp(-\beta U) dx'_1 dy'_1 \dots dz'_N \right\} - \left\{ V^N \frac{1}{kT} \int_0^1 \dots \int_0^1 \exp(-\beta U) \frac{\partial U}{\partial V} dx'_1 dy'_1 \dots dz'_N \right\}$$

Observamos el termino $\frac{\partial U}{\partial V}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial V} &= \sum_{i < j} \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial V} = \sum_{i < j} \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial V} = \sum_{i < j} \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\partial V^{1/3} r'_{ij}}{\partial V} = \\ &= \sum_{i < j} \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{1}{3} \frac{1}{V^{2/3}} r'_{ij} = \sum_{i < j} \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{1}{3} \frac{1}{V} V^{1/3} r'_{ij} = \frac{1}{3V} \sum_{i < j} \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{ij}} r'_{ij} \end{aligned}$$

Reemplazando

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial V} Z_N &= \left\{ NV^{N-1} \int_0^1 \dots \int_0^1 \exp(-\beta U) dx'_1 dy'_1 \dots dz'_N \right\} - \\ &\quad \left\{ \frac{V^N}{3V} \frac{1}{kT} \int_0^1 \dots \int_0^1 \exp(-\beta U) \left(\sum \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{ij}} r'_{ij} \right) dx'_1 dy'_1 \dots dz'_N \right\} \end{aligned}$$

Ahora retrotransformamos (?!)

$$\frac{\partial \log Z_N}{\partial V} = \frac{1}{Z_N} \left\{ \frac{N}{V} \int \dots \int \exp(-\beta U) dx_1 \dots dz_N \right\} - \left\{ \frac{1}{3VkT} \int \dots \int \exp(-\beta U) \left(\sum \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{ij}} r_{ij} \right) dx_1 \dots dz_N \right\}$$

→

$$\frac{\partial \log Z_N}{\partial V} = \frac{N}{V} - \left\{ \frac{N(N-1)}{6VkT} \iint \frac{\partial u_{12}}{\partial r_{12}} r_{12} dr_1 dr_2 \int \dots \int \frac{\exp(-\beta U)}{Z_N} dr_3 \dots dr_N \right\}$$

$$\frac{\partial \log Z_N}{\partial V} = \frac{N}{V} - \left\{ \frac{N(N-1)}{6VkT} \iint \frac{\partial u_{12}}{\partial r_{12}} r_{12} dr_1 dr_2 \frac{\rho^{(2)}}{N(N-1)} \right\}$$

$$\frac{\partial \log Z_N}{\partial V} = \frac{N}{V} - \left\{ \frac{N^2}{6V^2kT} \iint 4\pi u'(r) r^3 g^{(2)}(r) dr \right\}$$

$$g^{(n)} = \frac{\rho^{(n)}}{\left(\frac{N}{V}\right)^n}$$

$$\rho^{(2)}(r_1, r_2) = \frac{N!}{(N-2)!} \frac{\int \dots \int \exp(-\beta U_N) dr_{2+1} \dots dr_N}{Z_N}$$

de donde

$$\frac{P}{kT} = \rho + \frac{\rho^2}{6kT} \int_V 4\pi r^3 u'(r) g(r) dr$$

Esto se llama la ecuacion de la presion

Resulta claro entonces que como estamos calculando propiedades dinamicas que dependen a lo sumo de operadores de 2 cuerpos bastara con conocer la $g^{(2)}$.

Que Ocorre para las magnitudes no dinamicas sino termodinamicas!

Calculo del potencial quimico μ

$$U(x_1, y_1, \dots) = \sum_{2 \leq j \leq N} \zeta u(r_{1j}) + \sum_{2 \leq i < j \leq N} u(r_{ij})$$

Si $\zeta = 1$ la particula 1 interactua en un pie de igualdad con el resto del sistema

Si $\zeta = 0$ la particula 1 no interactua

Tomamos en cuenta ahora que $\mu = \left(\frac{\partial A}{\partial N} \right)_{V,T}$ entonces

$$\mu = A(N, V, T) - A(N-1, V, T)$$

Escribimos $-\frac{A}{kT} = \log Z_N - \log N! - 3N \log \lambda$ de donde

$$-\frac{\mu}{kT} = \log \frac{Z_N}{Z_{N-1}} - \log N - \log \lambda^3$$

observar que se puede escribir

$$\frac{Z_N}{VZ_{N-1}} = \frac{1}{V} \int \frac{\exp[-\beta U(q^{N-1})] \exp[-\beta U(q^N, q^{N-1})] dq^N}{\int \exp[-\beta U(q^{N-1})] dq^{N-1}} =$$

$$= \frac{1}{V} \int \langle \exp(-\beta U(q^N, q^{N-1})) \rangle_{N-1} dq_N$$

Esto da lugar al llamado “particle insertion method”

Ergodicidad?

Que pasa si nuestro sistema esta atrapado en ciertos minimos de energia?

Ver : Mountain & Physica A 210 (1994) 453

El Algoritmo de Swensen-Wang

Se ha encontrado que el ritmo de decorrelacion en sistemas de spines es como:

$$\tau = \xi^z$$

donde ξ es la distancia de correlacion y z es el "coeficiente dinamico"

Para un Metropolis de 1 spin se encuentra que $z \sim 2$

Es se puede remediar usando el algoritmo de Swensen Wang PRL
58(1987)86

Sea el Hamiltoniano de referencia el de Ising

Sean dos spines tomados al azar y escribimos el Hamiltoniano del sistema sin esos dos spines

$$H_{lm} = \sum_{(i,j) \neq (l,m)} J_{ij} S_i S_j$$

L y m no aparecen
en la suma

Sea ahora las funciones de particion cuando $s_l \neq s_m$ y cuando son forzados a ser iguales

y

$$Z_{lm}^{iguales} = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta H_{lm}) \delta_{s_l, s_m}$$

$$Z_{lm}^{distintos} = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta H_{lm}) (1 - \delta_{s_l, s_m})$$

$$H_{lm} = \sum_{(i,j) \neq (l,m)} J_{ij} s_i s_j$$

Es decir quedan excluidos los terminos asociados a los dos spines en consideracion.

De este modo si pensamos en el caso general (el par libre)

$$Z_{lm}^{ind} = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta H_{lm}) = Z_{lm}^{iguales} + Z_{lm}^{distintos}$$

$$Z_{lm}^{ind} = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta H_{lm}) = Z_{lm}^{iguales} + Z_{lm}^{distintos}$$

Que puede ser reescrito como:

$$Z = e^{-2\beta j} Z_{lm}^{iguales} + e^{2\beta j} Z_{lm}^{distintos}$$

Es decir multiplicamos por los terminos que faltan

$$\begin{aligned} Z &= e^{-2\beta J} Z_{lm}^{iguales} + e^{2\beta J} Z_{lm}^{distintos} - \\ &= e^{-2\beta J} Z_{lm}^{iguales} + e^{2\beta J} [Z_{lm}^{ind} - Z_{lm}^{iguales}] \end{aligned}$$

$$Z = e^{-2\beta j} [(1 - e^{4\beta j}) Z_{lm}^{iguales} + e^{4\beta j} Z_{lm}^{indep}]$$

De donde, Z se escribe como los spines (l, m) estan fijos iguales con proba $(1 - e^{4\beta J})$ y "libres" con proba $e^{4\beta J}$.

Si se repite el proceso para todos los spines, se pasa de un problema de links entre nodos o sea una percolacion.

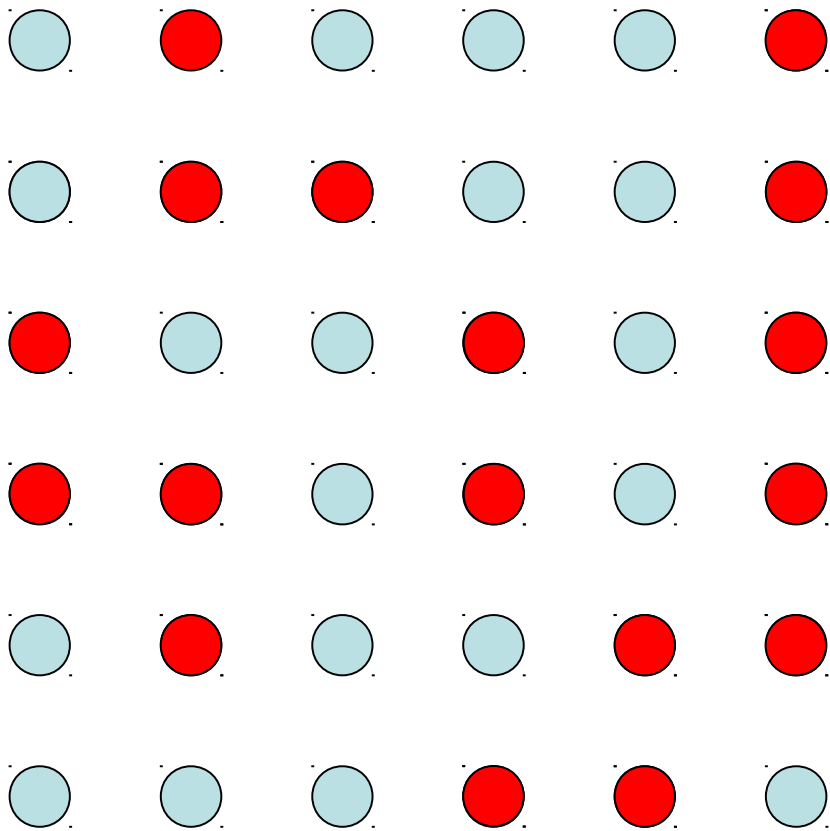
El algoritmo que generaron la siguiente aproximacion:

- i) tomar todos los spines iguales y unirlos por un link
- ii) conservar los links con proba $(1 - e^{4\beta J})$ y romperlos con proba $e^{4\beta J}$.
- iii) reorientar los clusters resultantes al azar
- iv) reconstruir la red de spines.

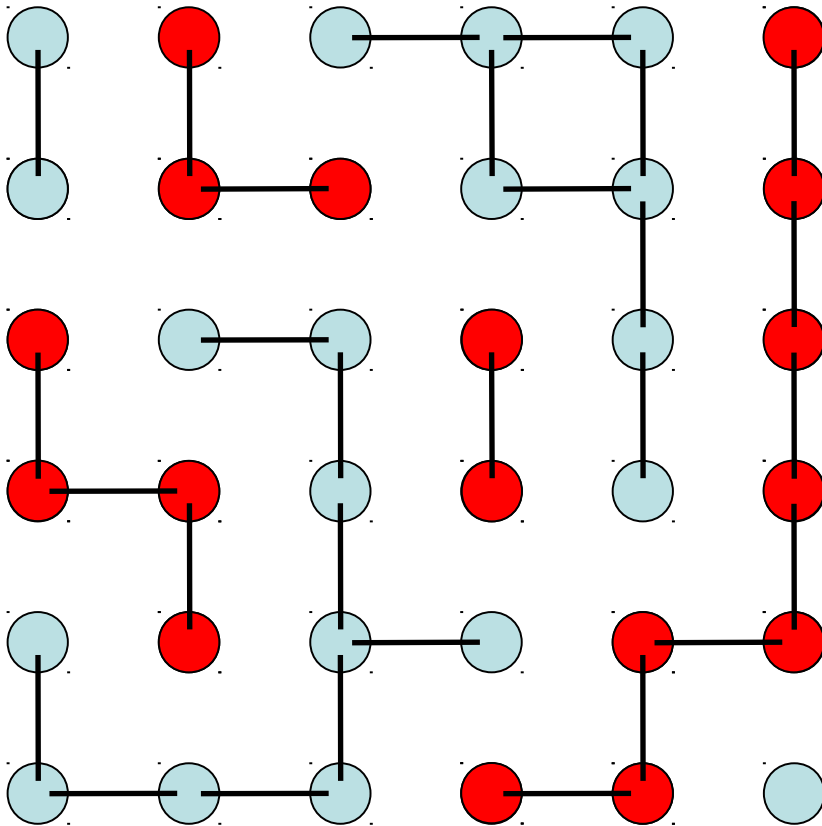
Se ve que se satisfacen las condiciones de la cadena de Markov

- a) todo estado es accesible desde cualesquiera otro por la proba de romper los bonds
- b) se satisface microreversibilidad.

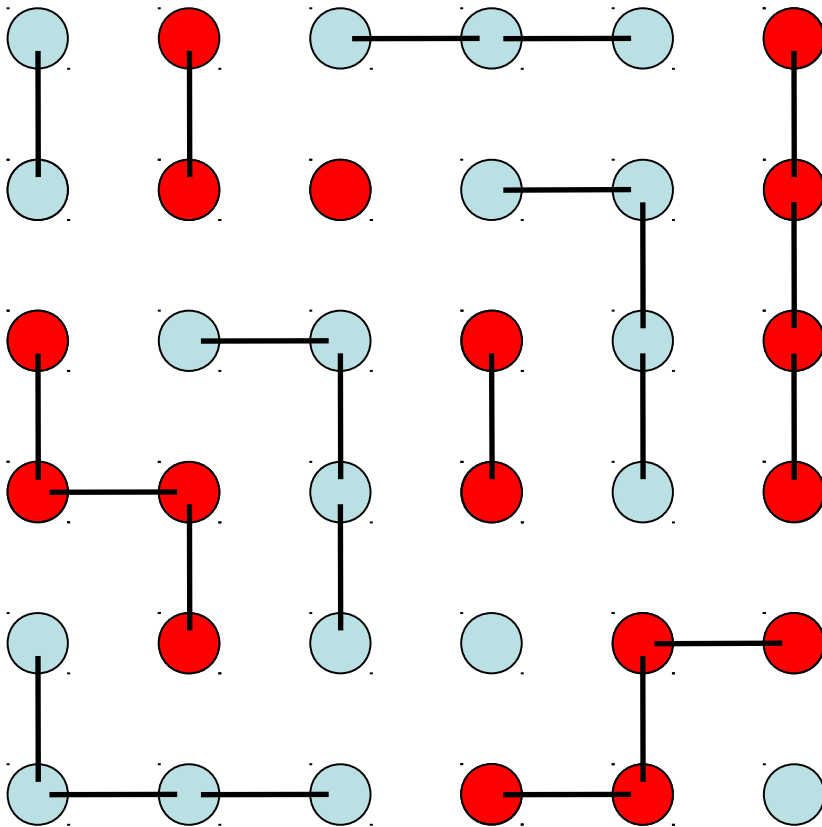
Con esto $z = 0.35$



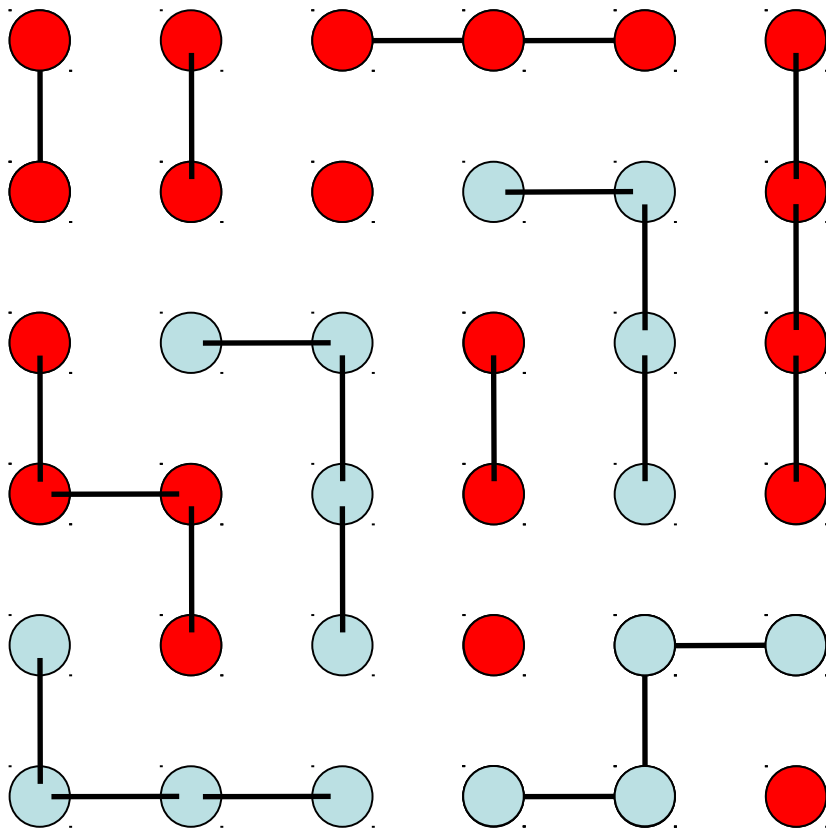
Configuracion de spines



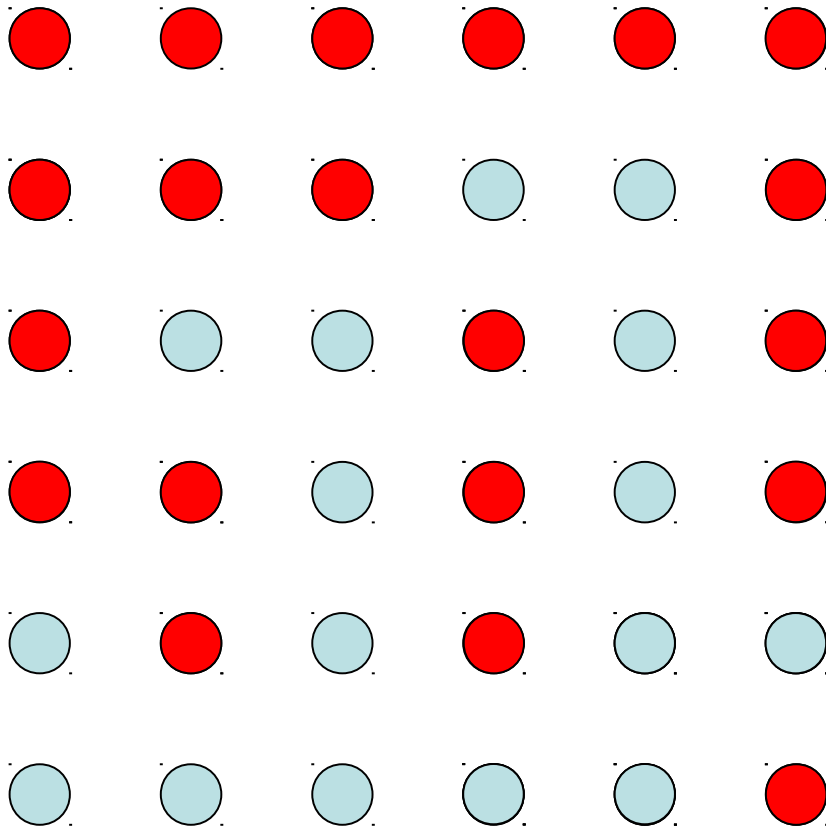
Dibujamos links entre Vecinos inmediatos



Removemos links
con la proba
adecuada



Orientamos clusters
Al azar



Reconstruimos los spines