Ising y la simulación de Monte Carlo

Lectura: R. K. Pathria & P. D. Beale, Cap. 16., W. Krauth Cap. 1, The Internet

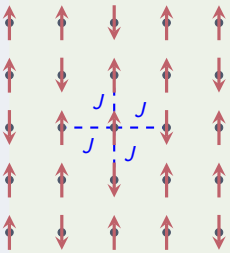
» Modelo de Ising

Modelo insignia para transiciones de fase continuas (e.g., orden/desorden).

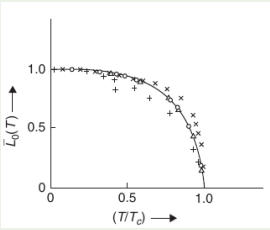
1D

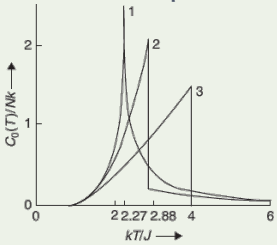
Tiene solución exacta (sencilla) pero no magnetización espontánea.

2D



Aun cuando tiene solución exacta, las aproximaciones más sencillas predicen correctamente magnetización espontánea.





» Solución exacta: ensamble canónico

$$Z_c = \sum_{\substack{\text{estados } n \\ L \times L \text{ espines}}} e^{-\beta E_n}$$

$$U = \frac{1}{Z_c} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} \qquad U = \sum_n E_n p_n$$

con la probabilidad canónica

$$p_n = \frac{1}{Z_c} e^{-\beta E_n} \to \langle O \rangle = \sum_n p_n O_n$$

pero, en 2D, son $\mathcal{N} = 2^{L \times L}$ estados.

$\mathcal{N} \simeq 16, 2 \times 10^{43}, 5 \times 10^{145}, 2 \times 10^{308}$ para $L = 2, 12, 22, 32$.

» Métodos de Monte Carlo: Ideas generales

- Evolución: secuencia de números aleatorios.
- Problemas: Mecánica estadística, cuántica, etc.
- Cómputo: Tiempo y memorias limitados.
- Errores: estadísticos y de los otros.

» Juegos populares en Mónaco

Cálculo con 4000 tiros		
Corrida	N_{adentro}	Estimación de π
1	3156	3.156
2	3150	3.150
3	3127	3.127
4	3171	3.171
5	3148	3.148

» Muestreo por importancia (Importance sampling)

Las configuraciones de un sistema se generan de acuerdo a una distribución, de manera que los valores de expectación son promedios aritméticos de las mediciones en esas configuraciones.
Si quiero calcular

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^{L} A(x)P(x) \qquad \text{con } P(x) \text{ una distribución arbitraria}$$

Si tomo M valores, $x_1, \cdots, x_M$ en el dominio $[-L : L]$, comparemos elecciones:

Muestreo al azar uniforme

$$\langle A \rangle \simeq \frac{2L}{M} \sum_{i=1}^{M} P(x_i)A(x_i)$$

Si $P(x)$ está picada en una región pequeña, tengo muchas fluctuaciones estadísticas (mucho error).

Muestreo por importancia

Si elijo los x_i según una distribución $W(x)$

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \frac{P(x_i)}{W(x_i)} A(x_i)$$

Eligiendo simplemente, $W(x) = P(x)$

$$\langle A \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} A(x_i) \qquad \sigma_P^2[A] = \int \left(A(x) - \langle A \rangle \right)^2 P(x)\, dx$$

Y entonces,

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle_M \pm \frac{\sigma_P[A]}{\sqrt{M^*}}$$

$M^* < M$ ya que no todas las M muestras son estadisticamente independientes. En mecánica estadística P sabemos que está picada exponencialmente, ya que $P \propto e^{-\beta E}$

La aplicación del muestreo por importancia es fundamental

» Cadenas de Markov, y balance detallado

Para nuestro sistema cada estado $\alpha = \{s_i\}$ y para un sistema a T

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} P(\alpha) A(\alpha), \qquad \text{con} \quad P(\alpha) = \frac{1}{Z} e^{-E(\alpha)/k_B T}$$

En una simulación uno inicia con algún α_0 y genera una secuencia (cadena...) $\alpha_1, \alpha_2 \cdots$ distribuidos según P (esperablemente).

$$N_1(\alpha_i) = N_0(\alpha_i) + \sum_{j \neq i} \left[N_0(\alpha_j) P(\alpha_j \to \alpha_i) - N_0(\alpha_i)\, P(\alpha_i \to \alpha_j) \right]$$

$$\sum_{j \neq i} P(\alpha_j) P(\alpha_j \to \alpha_i) = \sum_{j \neq i} P(\alpha_i)\, P(\alpha_i \to \alpha_j)$$

Uno la resuelve, pidiendo término a término (Balance detallado),

$$\boxed{\frac{P(\alpha_i \to \alpha_j)}{P(\alpha_j \to \alpha_i)} = \frac{P(\alpha_j)}{P(\alpha_i)}}$$

» Metropolis et al.

En general, uno no considera todos los cambios posibles en los estados α, sino que descompone

$$P(\alpha_i \to \alpha_j) = P^{\text{intentar}}(\alpha_i \to \alpha_j) P^{\text{aceptar}}(\alpha_i \to \alpha_j)$$

donde P^{intentar} es simétrica ($p_{ij}^{\text{intentar}} = p_{ji}^{\text{intentar}}$).

Metropolis/Rosembluth/Rosembluth/Teller

$$P^{\text{aceptar}}(\alpha_i \to \alpha_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } P(\alpha_j) \geq P(\alpha_i) \\ \dfrac{P(\alpha_j)}{P(\alpha_i)} & \text{si } P(\alpha_j) < P(\alpha_i) \end{cases} \qquad (\text{para} \quad \alpha_i \neq \alpha_j)$$

Si $\alpha_i = \alpha_j$, lo elegimos por normalización.

¿Sirve así?

» Era Markov

Veamos que las probabilidades de transición cumplen con lo necesario.

Estocástica

$$\sum_j P(\alpha_i \to \alpha_j) = 1$$

Esto es por construcción, $P(\alpha_i \to \alpha_i) = 1 - \sum_{j \neq i} P(\alpha_i \to \alpha_j)$.

Reversible - Balance detallado

$$P(\alpha_i)P(\alpha_i \to \alpha_j) = P(\alpha_j)P(\alpha_j \to \alpha_i)$$

Si $P(\alpha_i) > P(\alpha_j)$,

$$P(\alpha_i)P(\alpha_i \to \alpha_j) = P(\alpha_i)P^I_{ij}P^A_{ij} = \cancel{P(\alpha_i)}P^I_{ij}\frac{P(\alpha_j)}{\cancel{P(\alpha_i)}} = P(\alpha_j)P^I_{ji} \times \overset{P^A_{ji}}{\nearrow 1} = P(\alpha_j)P^I_{ji}P^A_{ji} = P(\alpha_j)P(\alpha_j \to \alpha_i)$$

Si $P(\alpha_i) < P(\alpha_j)$,

$$P(\alpha_i)P(\alpha_i \to \alpha_j) = P(\alpha_i)P^I_{ij}P^A_{ij} = P(\alpha_i)P^I_{ij} \times \overset{\frac{P(\alpha_j)}{P(\alpha_j)}}{\nearrow 1} = P(\alpha_j)P^I_{ji}\frac{P(\alpha_i)}{P(\alpha_j)} = P(\alpha_j)P^I_{ji}P^A_{ji} = P(\alpha_j)P(\alpha_j \to \alpha_i)$$

Regular/Ergódica

$$\sum_i P(\alpha_i)P(\alpha_i \to \alpha_j) = P(\alpha_j)$$

Usando balance detallado,

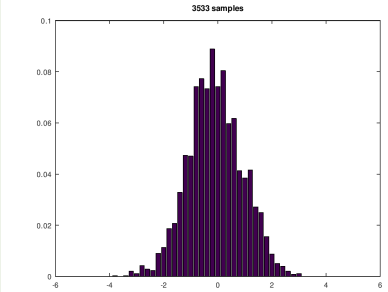
$$\sum_i P(\alpha_i)P(\alpha_i \to \alpha_j) = \sum_i P(\alpha_j)P(\alpha_j \to \alpha_i)$$

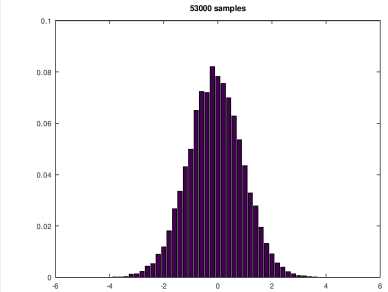
$$= P(\alpha_j) \sum_i P(\alpha_j \to \alpha_i) \quad 1$$

» El algoritmo de metropolis

- Elijo un estado inicial x para la cadena.
- Ciclo
  - Genero un estado distinto de la cadena x'
  - Calculo $a = \min\left(1, \frac{P(x')}{P(x)}\right)$
  - Acepto el cambio con probabilidad a.
  - Guardo x' si acepté, sino repito x.

Ejemplo: Distribución Gaussiana

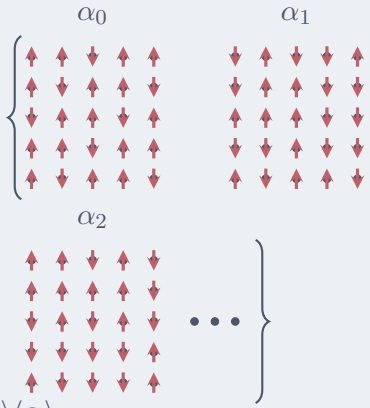




» El caso de Ising

Tenemos la energía

$$E = \mu_0 B \sum_i s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad \Rightarrow \quad P(\alpha) \propto e^{-\beta E(\alpha)}$$



Medimos

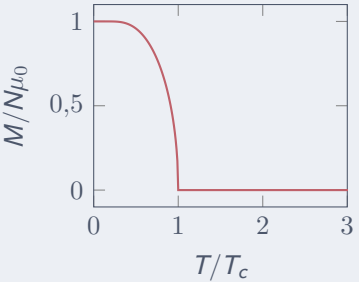
$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_\alpha m e^{-\beta E}, \quad m = M/N, \quad \langle m \rangle = \frac{1}{N_\alpha} \sum_\alpha m_\alpha$$

$$\chi = \frac{d\langle m \rangle}{dB} = \beta \frac{1}{N} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right)$$

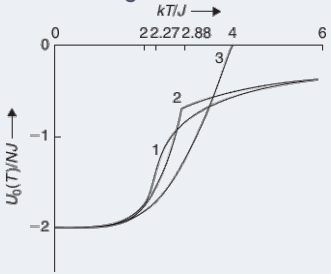
$$C = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T}\bigg|_N = \beta \frac{1}{NT} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) \qquad g(r_i - r_j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

Extraemos exponentes críticos: $m \propto (T_c - T)^\beta$, $C \propto |T - T_c|^\alpha$, $\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}$, $\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$.

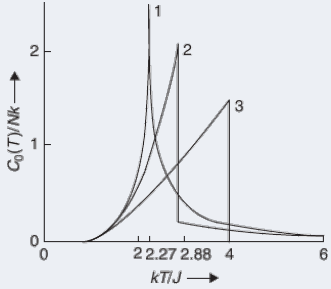
Magnetización



Energía Interna



Calor específico



» Autocorrelación

Pero, cuan estadísticamente independientes son las configuraciones que genera el algoritmo,

$$A_Q(\tau) = \frac{\langle Q_k\, Q_{k+\tau}\rangle - \langle Q_k\rangle^2}{\langle Q_k^2\rangle - \langle Q_k\rangle^2}$$

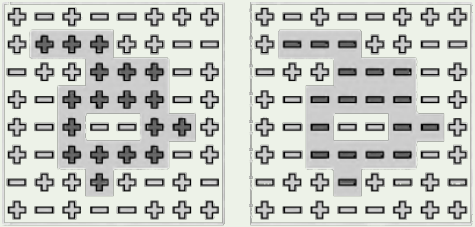
Si son independientes,

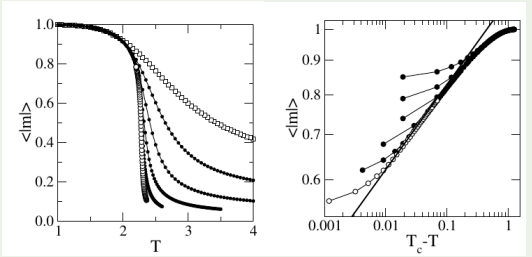
$$A_Q(\tau) \longrightarrow e^{-\tau/\Theta}$$

» Tópicos (más) avanzados.

Algoritmos por racimos

Cerca del punto crítico, los tiempos de autocorrelación se hacen cada vez más largos.



Escaleo de tamaño finito

La longitud de correlación no puede crecer más allá del tamaño del sistema.