Ανάλυση Δεδομένων Monte Carlo του 2D-Ising προτύπου με τη μέθοδο Multiple Histogram

Δημήτριος Μπαχτής

Αρχές Στατιστικής Φυσικής

Ρυθμός μετάβασης: $R(\mu \to \nu)$

Βάρη: $w_\mu(t)$

Δεσπόζουσα εξίσωση: $$\frac{dw_\mu(t)}{dt} = \sum_\nu \Big(w_\nu(t) R(\nu \to \mu) - w_\mu(t) R(\mu \to \nu) \Big)$$

$$\sum_\mu w_\mu(t) = 1$$

Αναμενόμενη τιμή: $$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu w_\mu(t)$$

Συστήματα σε Ισορροπία

Πιθανότητες κατάληψης ισορροπίας: $$p_\mu = \lim_{t\to\infty} w_\mu(t) \qquad \sum_\mu p_\mu = 1$$

Gibbs(1902): $$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}$$

Συνάρτηση Επιμερισμού: $$Z = \sum_\mu e^{-E_\mu/\kappa T} = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu}$$

Αναμενόμενη τιμή: $$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu p_\mu = \frac{1}{Z} \sum_\mu Q_\mu e^{-\beta E_\mu}$$

Συστήματα σε Ισορροπία

Εσωτερική ενέργεια: $$\langle E \rangle = \frac{1}{Z}\sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial \beta}\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta},$$

Ειδική Θερμότητα: $$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T}\frac{\partial U}{\partial \beta} = (-\kappa\beta^2)(-\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}) = \kappa\beta^2\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$$

$$C = T\frac{\partial S}{\partial T} = -\beta\frac{\partial S}{\partial \beta}$$

Εντροπία: $$S = -\kappa\beta\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} + \kappa \log Z$$

Ελεύθερη ενέργεια: $$F = U - TS = -\kappa T \log Z$$

Διακυμάνσεις και Αποκρίσεις

Διακυμάνσεις της εσωτερικής ενέργειας:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z}\sum_\mu E_\mu^2 e^{-\beta E_\mu} = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2}{\partial \beta^2}\sum_\mu e^{-\beta E_\mu} = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z}\sum_\mu E_\mu e^{-\beta E_\mu} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial \beta}\sum_\mu e^{-\beta E_\mu} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta},$$

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - (-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}) = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2},$$

Άρα η ειδική θερμότητα(θεωρημα γραμμικής απόκρισης): $C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \kappa \beta^2 (\Delta E)^2$

Διακυμάνσεις και Αποκρίσεις

Εξωτερικές Επιδράσεις της μορφής –XY:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\beta Z} \sum_{\mu} X_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial}{\partial Y} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$$

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial log Z}{\partial Y} = -\frac{\partial F}{\partial Y}$$

$$-\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F}{\partial Y^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial Y} = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$$

Επιδεκτικότητα: $$\chi = \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial Y}$$

Διακυμάνσεις και Αποκρίσεις

Για την περίπτωση της μαγνήτισης:

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2}$$

$$(\Delta M)^2 = \frac{1}{\beta^2} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial B} \right)^2 \right) = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B}$$

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

Αρχές Monte Carlo Στατιστικής Φυσικής

Εκτιμητής Παρατηρήσιμης Ποσοτητας:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_\mu Q_\mu e^{-\beta E_\mu}}{\sum_\mu e^{-\beta E_\mu}} \quad , \quad Q_\mu = \frac{\sum_{i=1}^{M} Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^{M} p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}$$

Δειγματοληψία με Κριτήριο Σημαντικότητας

$$Q_\mu = \frac{\sum_{i=1}^{M} Q_{\mu_i} (e^{-\beta E_{\mu_i}})^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^{M} (e^{-\beta E_{\mu_j}})^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} Q_{\mu_i}$$

Αρχές Monte Carlo Στατιστικής Φυσικής

- Διαδικασίες Markov
  1. Συνθήκη της Εργοδικότητας
  2. Συνθήκη της Λεπτομερούς Ισορροπίας:

$$\sum_\nu p_\mu P(\mu \to \nu) = \sum_\nu p_\nu P(\nu \to \mu),$$

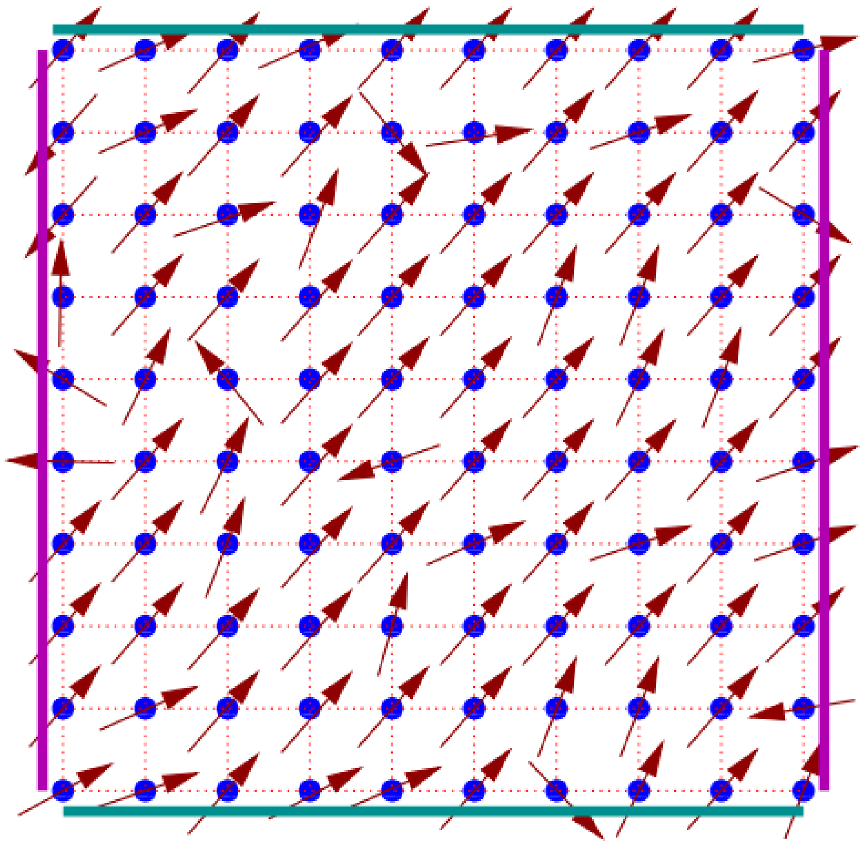
$$p_\mu = \sum_\nu p_\nu P(\nu \to \mu)$$

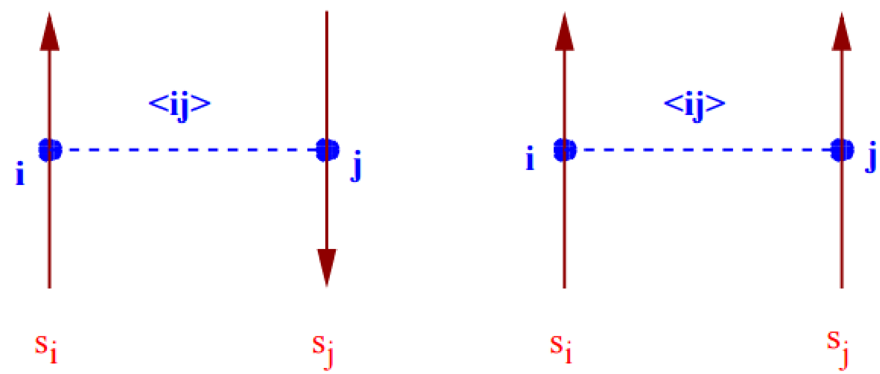
$$\frac{P(\mu \to \nu)}{P(\nu \to \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

- Λόγοι Αποδοχής:

$$P(\mu \to \nu) = g(\mu \to \nu) A(\mu \to \nu)$$

Το πρότυπο Ising σε 2D





Το πρότυπο Ising σε 2D

Χαμιλτονιανή:

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

Συνάρτηση Επιμερισμού:

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta H[\{s_i\}]} = \sum_{\{s_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \beta B \sum_i s_i}$$

Μετάβαση Φάσης:

$$T_c = \frac{2}{log(1+\sqrt{2})}$$

$$\beta_c = \frac{1}{2} \log(1+\sqrt{2}) \sim 0.4406867935 \dots$$

Αλγόριθμος Metropolis

Πιθανότητα Επιλογής: $$g(\mu \to \nu) = \frac{1}{N}$$

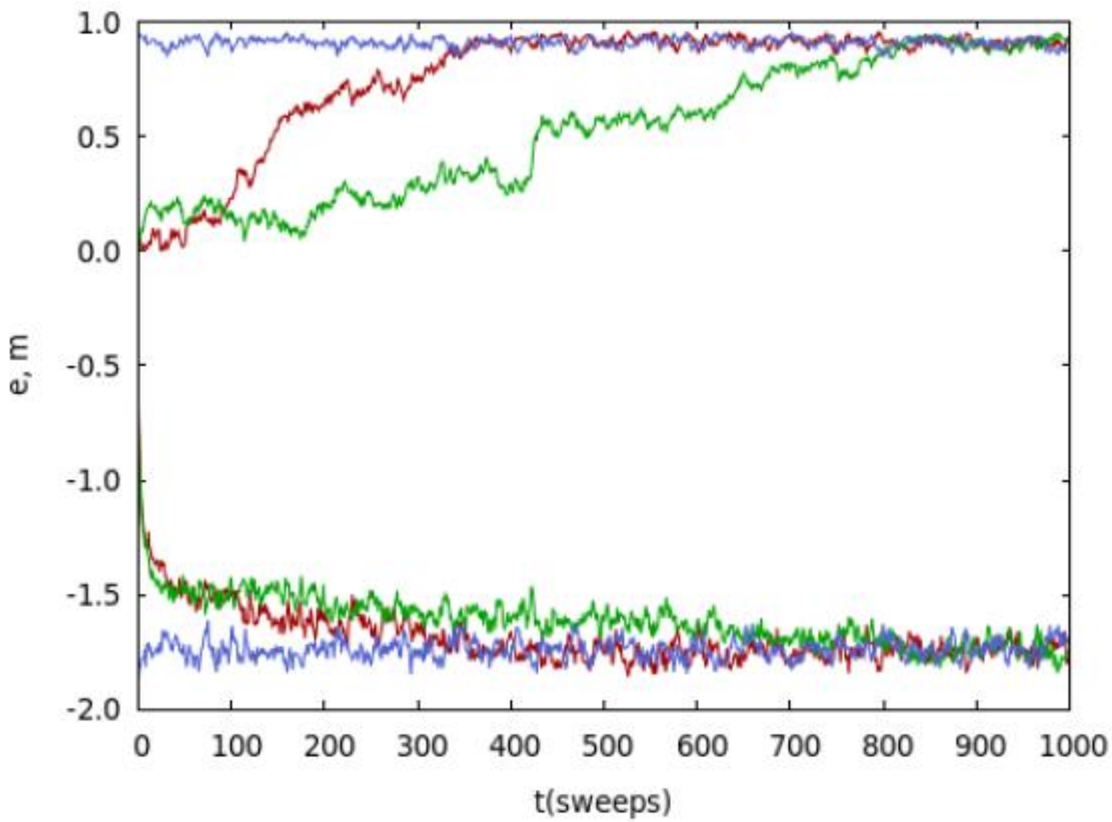
Συνθήκη Λεπτομερούς Ισορροπίας:

$$\frac{P(\mu \to \nu)}{P(\nu \to \mu)} = \frac{g(\mu \to \nu)A(\mu \to \nu)}{g(\nu \to \mu)A(\nu \to \mu)} = \frac{A(\mu \to \nu)}{A(\nu \to \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

Επιλέγουμε τους λόγους αποδοχής ως(Αλγόριθμος Metropolis):

$$A(\mu \to \nu) = \begin{cases} \exp(-\beta(E_\nu - E_\mu)), & \text{αν } E_\nu - E_\mu > 0. \\ 1, & \text{σε κάθε άλλη περίπτωση.} \end{cases}$$

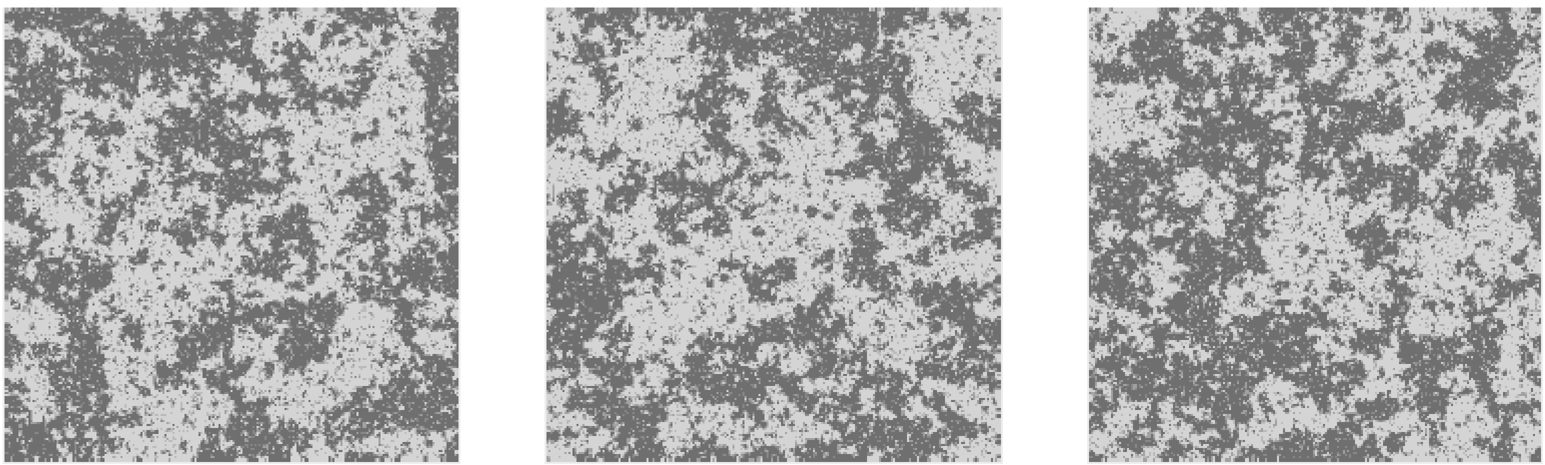
Διαδικασία Εύρεσης Θερμικής Ισορροπίας



Στατιστικά Ανεξάρτητες Μετρήσεις

Συνάρτηση αυτοσυσχετισμού: $\chi(t) \sim e^{-t/\tau}$

Ανεξάρτητες Μετρήσεις: $n = \dfrac{t_{max}}{2\tau}$



Σχήμα 3.2: Διατάξεις των σπιν για το πρότυπο Ising με $L = 400$ μετά από 5000, 20000, 40000 βήματα αντίστοιχα με τον αλγόριθμο Metropolis.

Κρίσιμοι Εκθέτες

Ανηγμένη θερμοκρασία: $t = \frac{T - T_c}{T_c}$

Μήκος συσχετισμού: $\xi \sim |t|^{-\nu}$

Αποκλισεις: $\chi \sim |t|^{-\gamma}$

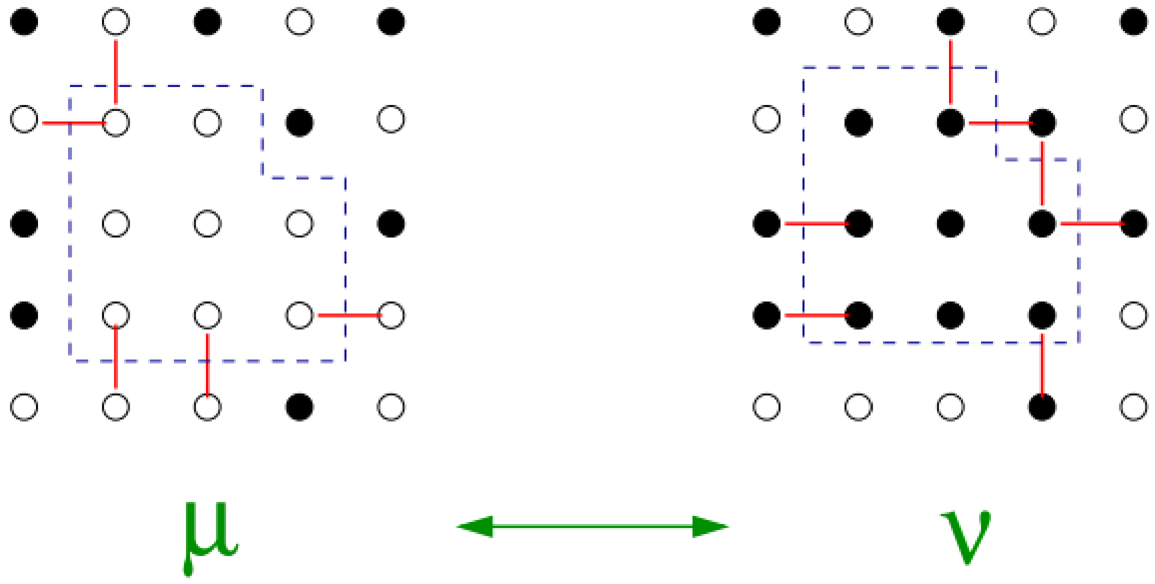
$c \sim |t|^{-\alpha}$

Χρονος αυτοσυσχετισμού: $\tau \sim |t|^{-z\nu}$

Απο τις παραπάνω σχέσεις προκύπτει: $\tau \sim \xi^z$

Για πεπερασμένο μέγεθος L: $\tau \sim L^z$

Ο αλγόριθμος Wolff



Ο αλγόριθμος Wolff

Συνθήκη Λεπτομερούς Ισορροπίας

$$\frac{g(\mu \to \nu)A(\mu \to \nu)}{g(\nu \to \mu)A(\nu \to \mu)} = (1 - P_{add})^{\mu-\nu} \frac{A(\mu \to \nu)}{A(\nu \to \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

Μεταβολή Ενέργειας

$$E_\nu - E\mu = 2J(m-n)$$

Συνθήκη για τους λόγους αποδοχής:

$$\frac{A(\mu \to \nu)}{A(\nu \to \mu)} = [e^{2\beta J}(1 - P_{add})]^{n-m}$$

Τελική επιλογή:

$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$$

Σύγκριση Αλγορίθμων

Χρόνος συσχετισμού αλγορίθμου Wolff: $\tau = \tau_{steps} \frac{\langle n \rangle}{L^d}$

Για ένα σύστημα μεγέθους 100Χ100 στη κρίσιμη θερμοκρασία:

Αλγόριθμος Wolff: $\tau = 2.80 \pm 0.03$

Αλγόριθμος Metropolis: $\tau = 2570 \pm 330$

Εκτιμήσεις Σφαλμάτων

Η μέθοδος Blocking:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n}(m_i - \overline{m})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{1}{n-1}(\overline{m^2} - \overline{m}^2)}$$

Η μέθοδος Bootstrap:

$$\sigma = \sqrt{\overline{c^2} - \overline{c}^2}$$

Η μέθοδος Single Histogram

Εκτιμητής Παρατηρήσιμης Ποσότητας: $$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^{M} Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^{M} p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}$$

Για μια διαφορετική θερμοκρασία η οποία βρίσκεται κοντά στην αρχικη με:

$$p_{\mu_i} = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta_0 E_{\mu_i}}$$

Ο εκτιμητής θα γίνει: $$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^{M} Q_{\mu_i} e^{-(\beta-\beta_0) E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^{M} e^{-(\beta-\beta_0) E_{\mu_j}}}$$

Η μέθοδος Single Histogram

Χρησιμοποιώντας ιστογράμματα:

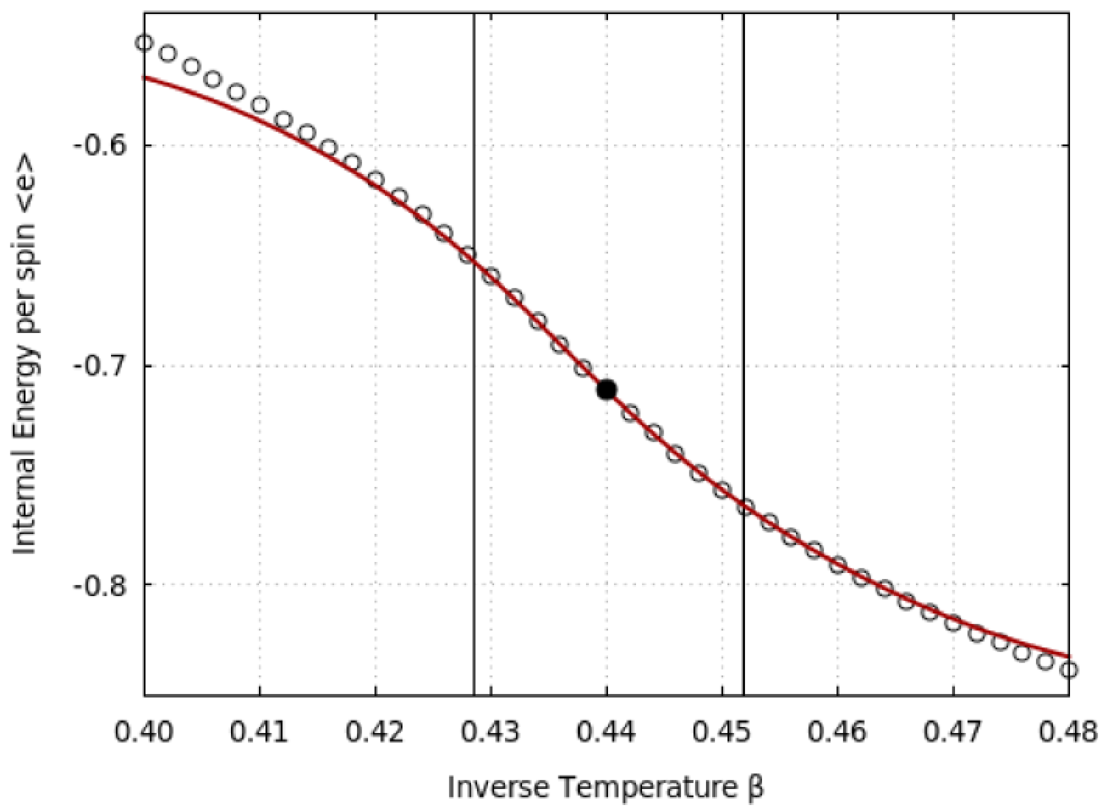
$$Q_M = \frac{\sum_{E,Q} Q N(E,Q) e^{-(\beta-\beta_0)E}}{\sum_{E,Q} N(E,Q) e^{-(\beta-\beta_0)E}}$$

Επιτρεπτή απόσταση επέκτασης:

$$\left[\frac{\Delta T}{T_0}\right]^2 = \frac{1}{C(T_0)}$$

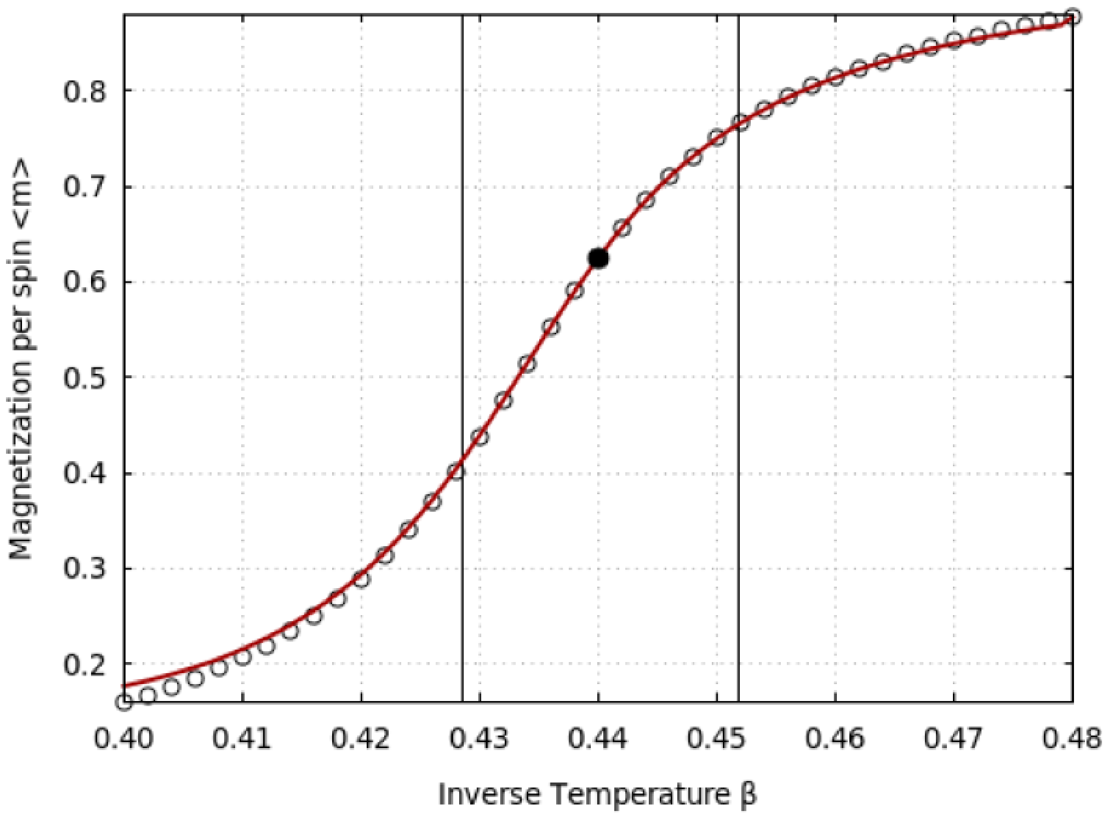
Η μέθοδος Single Histogram

Διάγραμμα της εσωτερικής ενέργειας ανά σπιν $\langle e \rangle$ συναρτήσει της θερμοκρασίας β για $L = 40$



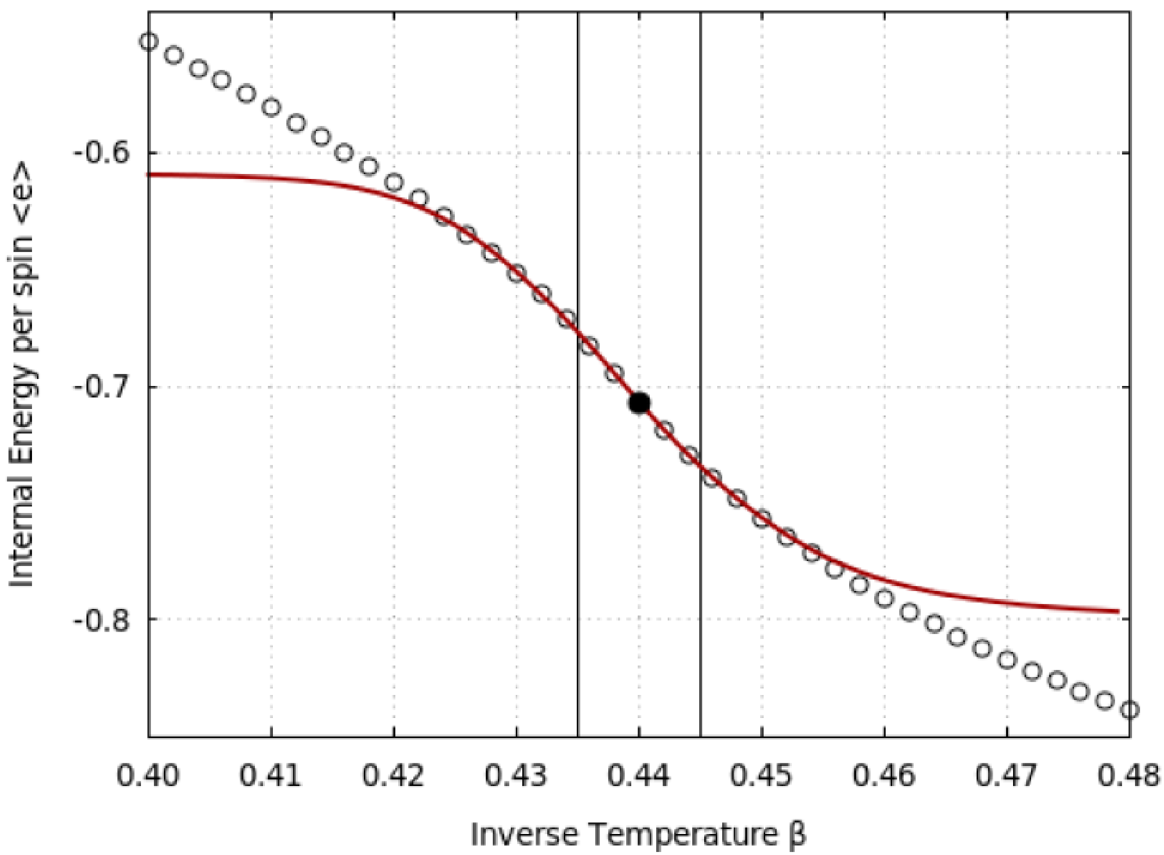
Η μέθοδος Single Histogram

Διάγραμμα της μαγνήτισης ανά σπιν $\langle m \rangle$ συναρτήσει της θερμοκρασίας β για $L = 40$



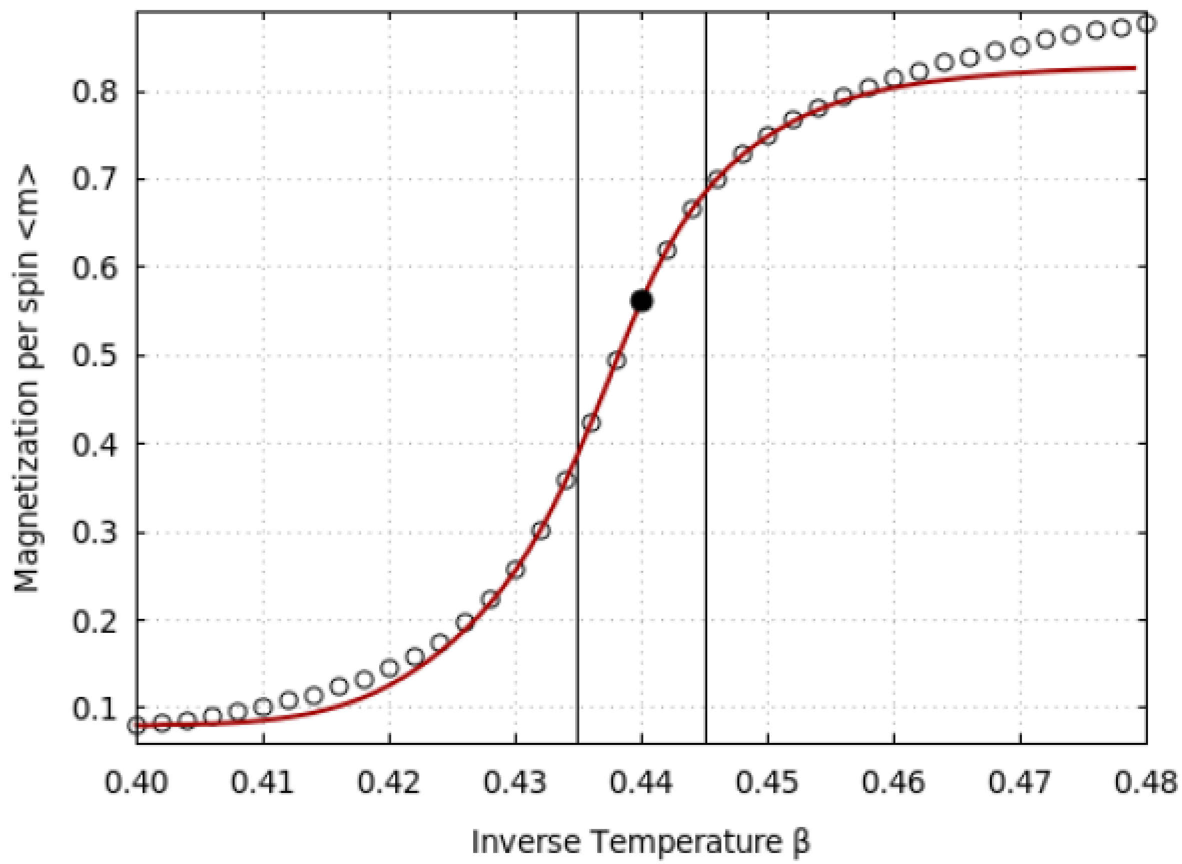
Η μέθοδος Single Histogram

Διάγραμμα της εσωτερικής ενέργειας ανά σπιν $\langle e \rangle$ συναρτήσει της β για $L = 80$



Η μέθοδος Single Histogram

Διάγραμμα της μαγνήτισης ανά σπιν $\langle m \rangle$ συναρτήσει της β για $L = 80$



Η μέθοδος Multiple Histogram

Πιθανότητα παραγωγής καταστασης με ενέργεια Ε:

$$p(E) = \rho(E)\frac{e^{-\beta E}}{Z}$$

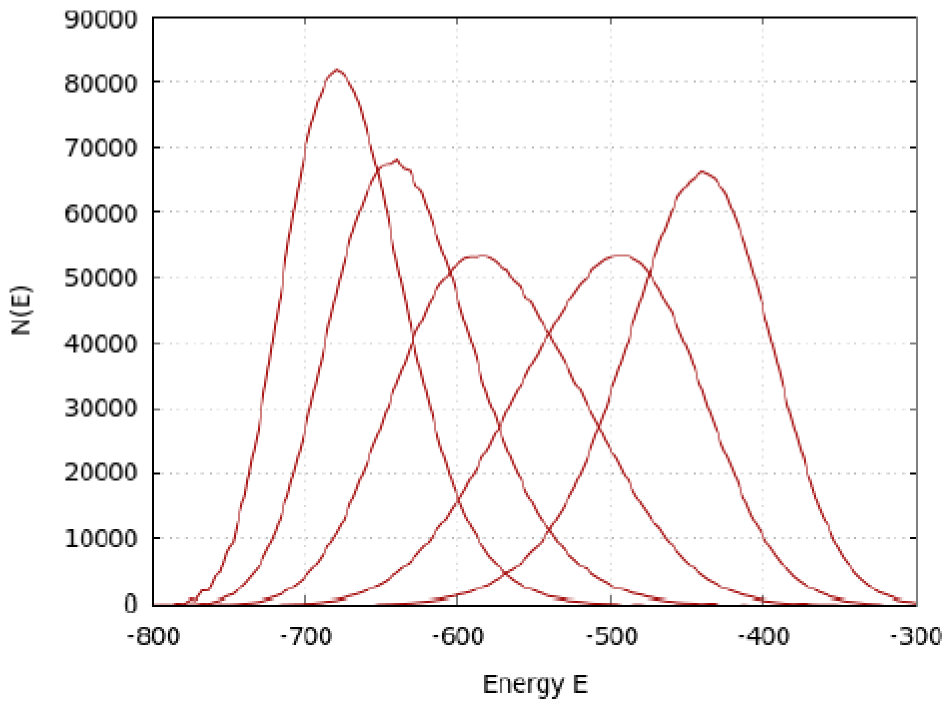
Εκτίμηση της πιθανότητας:

$$p(E) = \frac{N(E)}{n}$$

Εκτίμηση της πυκνότητας καταστάσεων:

$$\rho_i(E) = \frac{N_i(E)}{n_i}\frac{Z_i}{e^{-\beta_i E}}$$

Η μέθοδος Multiple Histogram



Σχήμα 5.3: Ιστογράμματα $N(E)$ των ενεργειών για το δισδιάστατο πρότυπο Ising σε πλέγμα $N = L * L = 20 * 20 = 400$ για θερμοκρασίες(από δεξιά προς αριστερά) $\beta = 0.40, 0.42, 0.44, 0.46, 0.48$. Είναι εμφανής η αλληλεπικάλυψη των ιστογραμμάτων η οποία αποτελεί απαραίτητη προϋπόθεση για την εξαγωγή σωστών αποτελεσμάτων με τη μέθοδο multiple histogram.

Η μέθοδος Multiple Histogram

Εκτίμηση της πυκνότητας καταστάσεων:

$$\rho(E) = \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{-\beta_j E}}$$

Η συνάρτηση επιμερισμού των αρχικών προσομοιώσεων:

$$Z_k = \sum_E \rho(E) e^{-\beta_k E} = \sum_E \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{(\beta_k - \beta_j)E}}$$

Η συνάρτηση επιμερισμού για ενδιάμεση θερμοκρασία:

$$Z(\beta) = \sum_E \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{(\beta - \beta_j)E}}$$

Η μέθοδος Multiple Histogram

Εκτιμητές Παρατηρήσιμων Ποσοτήτων

Με ιστογράμματα:

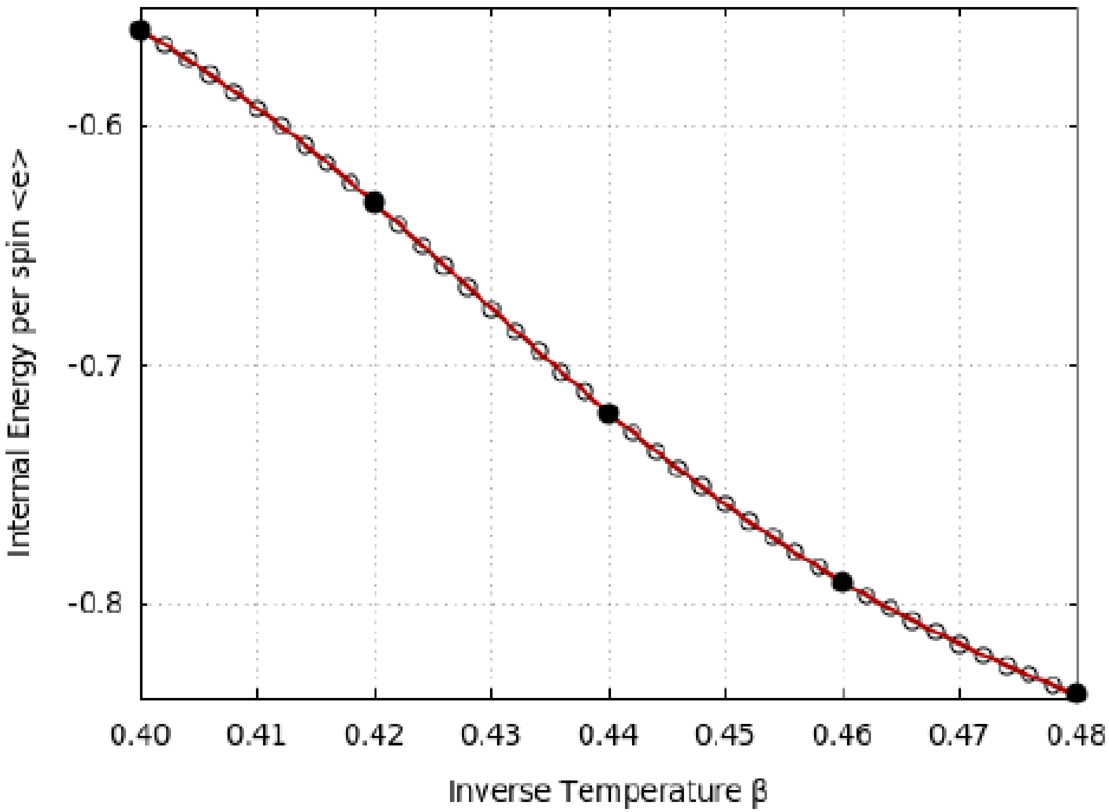
$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_E Q \frac{\sum_i N_i(E,Q)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{(\beta-\beta_j)E}}$$

Με αναλυτικό υπολογισμό:

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{i,s} \frac{Q_{is}}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{(\beta-\beta_j)E_{is}}}$$

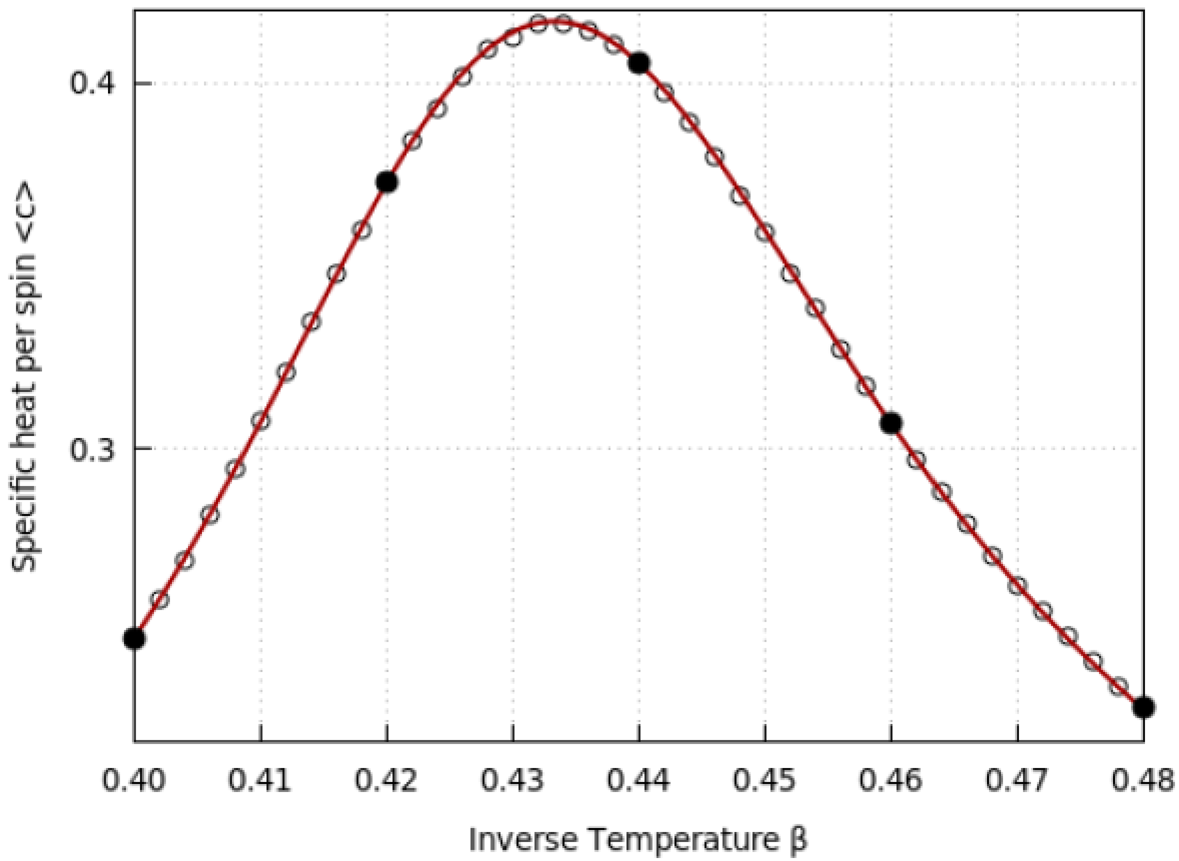
Η μέθοδος Multiple Histogram

Διάγραμμα της εσωτερικής ενέργειας ανά σπιν $\langle e \rangle$ συναρτήσει της β για $L = 20$



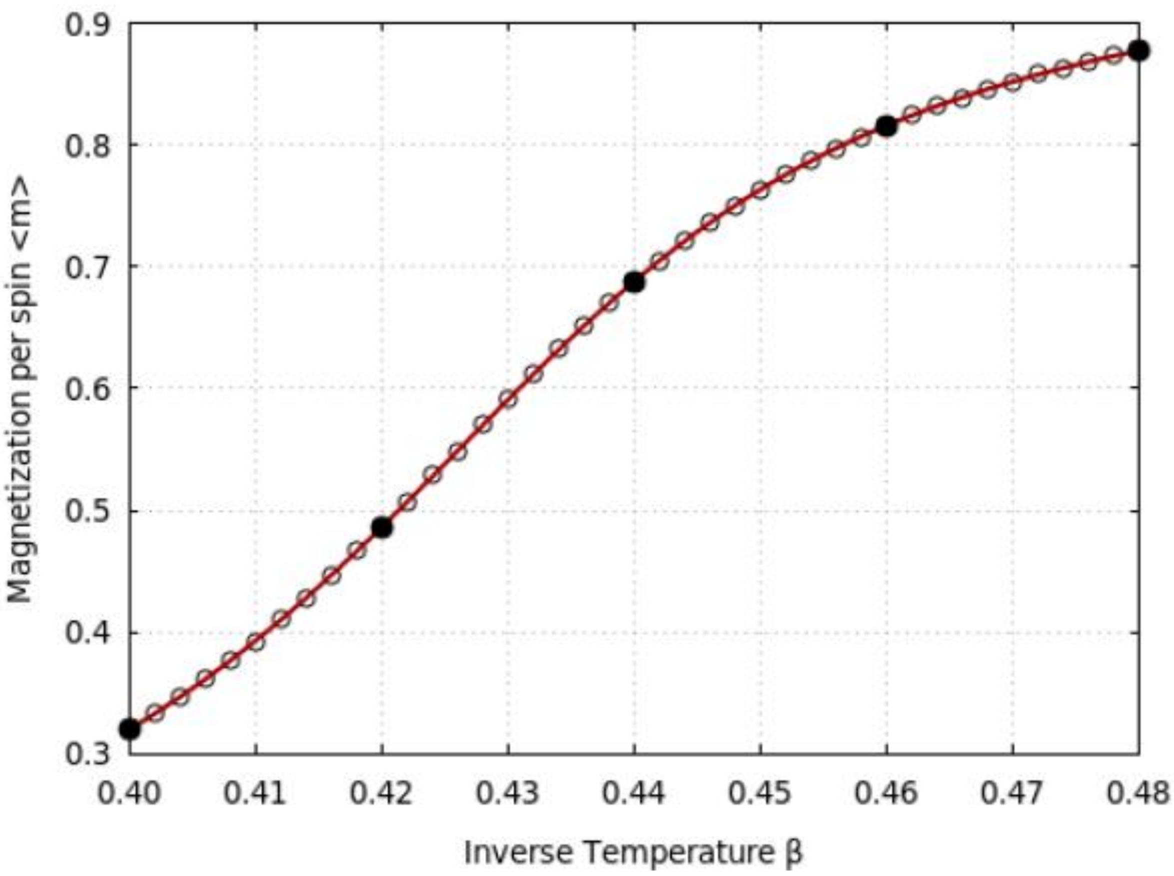
Η μέθοδος Multiple Histogram

Διάγραμμα της ειδικής θερμότητας c συναρτήσει της β για $L = 20$



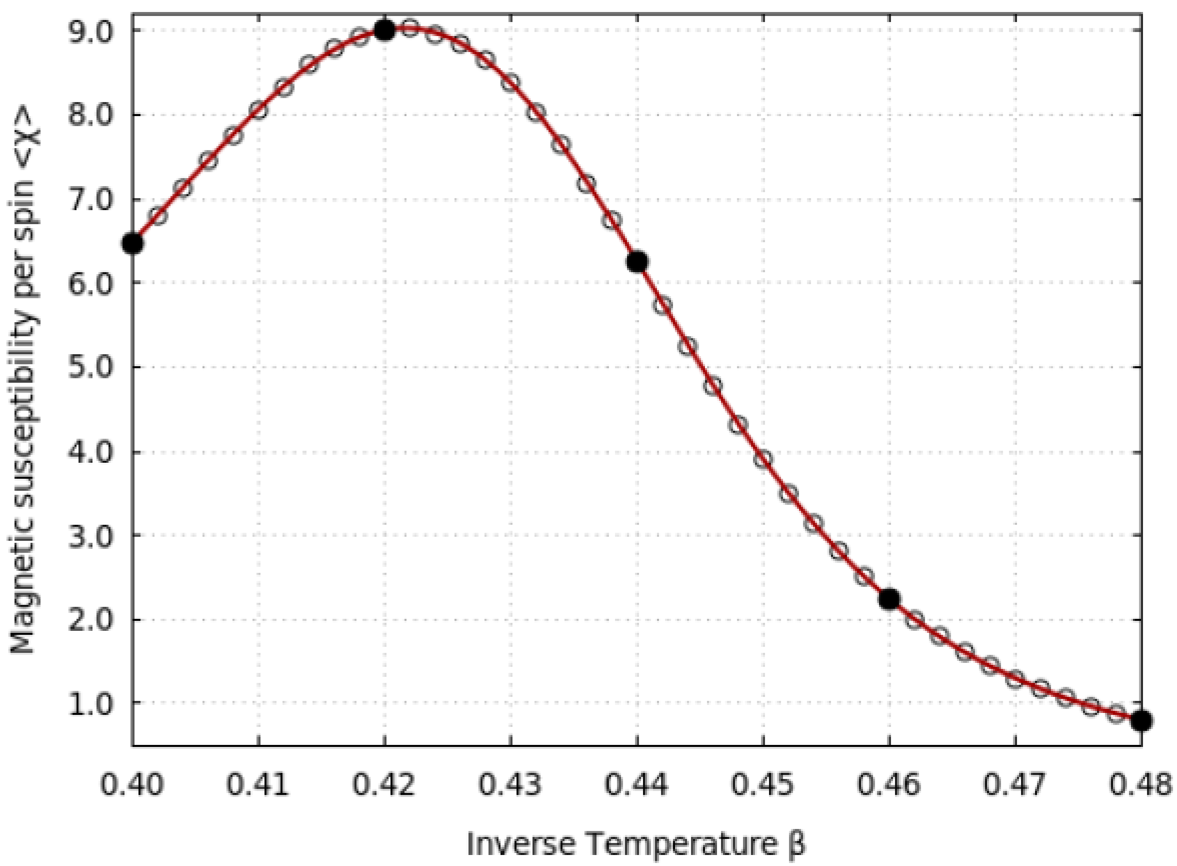
Η μέθοδος Multiple Histogram

Διάγραμμα της μαγνήτισης ανά σπιν $\langle m \rangle$ συναρτήσει της β για $L = 20$



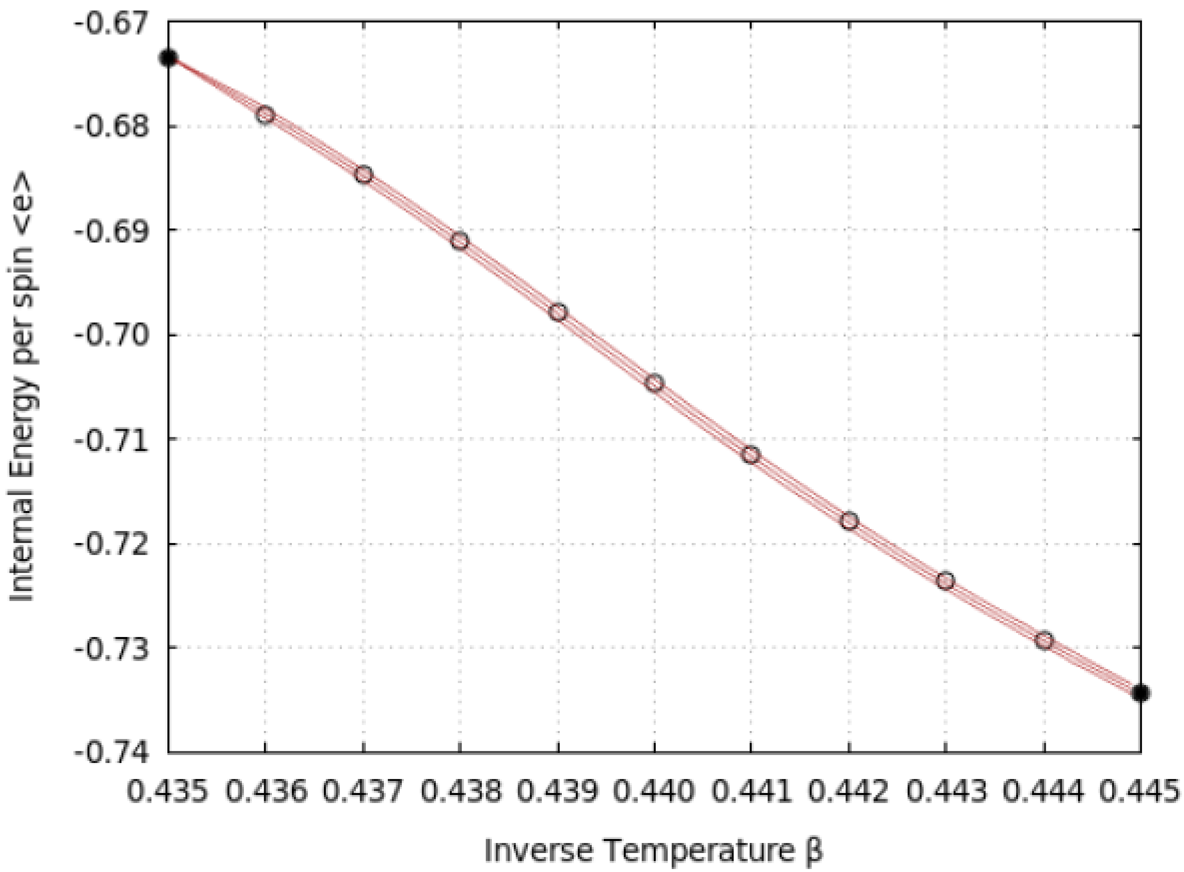
Η μέθοδος Multiple Histogram

Διάγραμμα της μαγνητικής επιδεκτικότητας χ συναρτήσει της β για $L = 20$



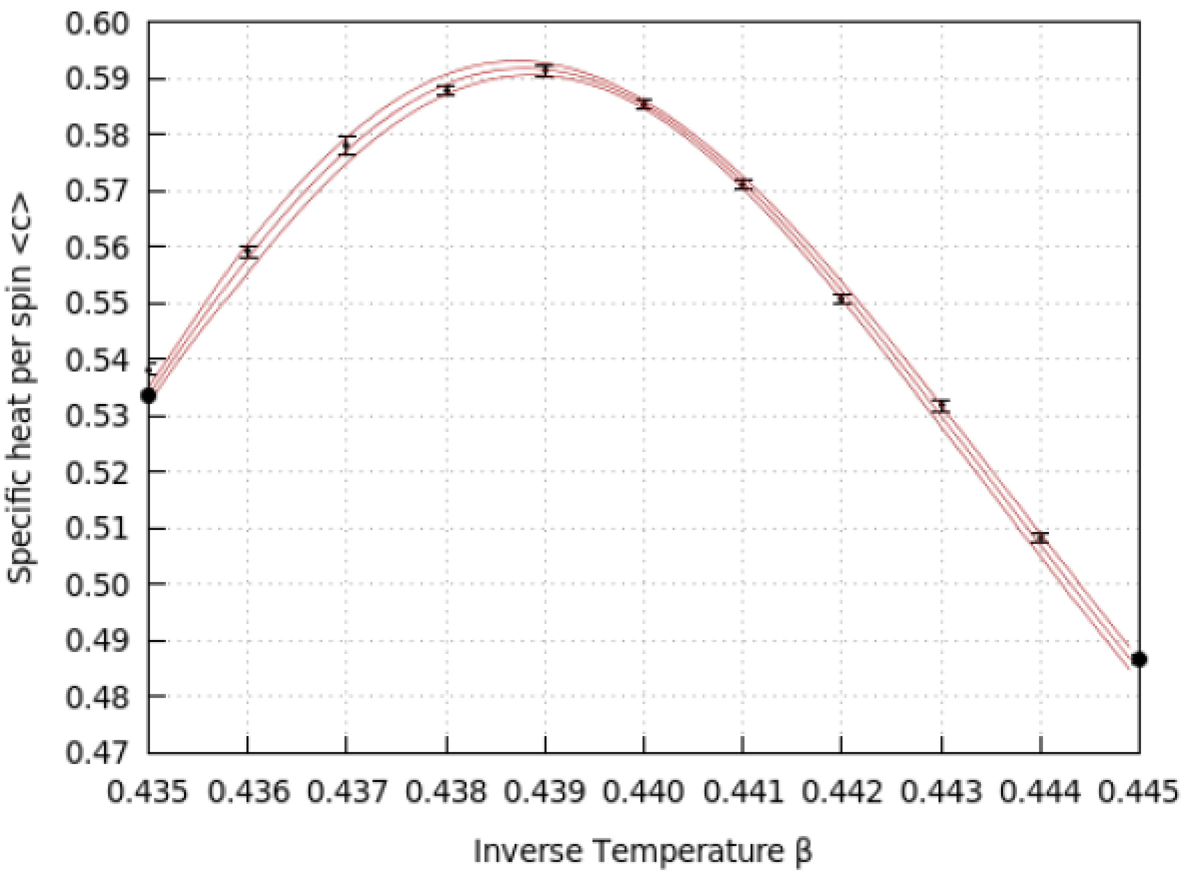
Η μέθοδος Multiple Histogram

Διάγραμμα της εσωτερικής ενέργειας ανά σπιν $\langle e \rangle$ συναρτήσει της β για $L = 140$



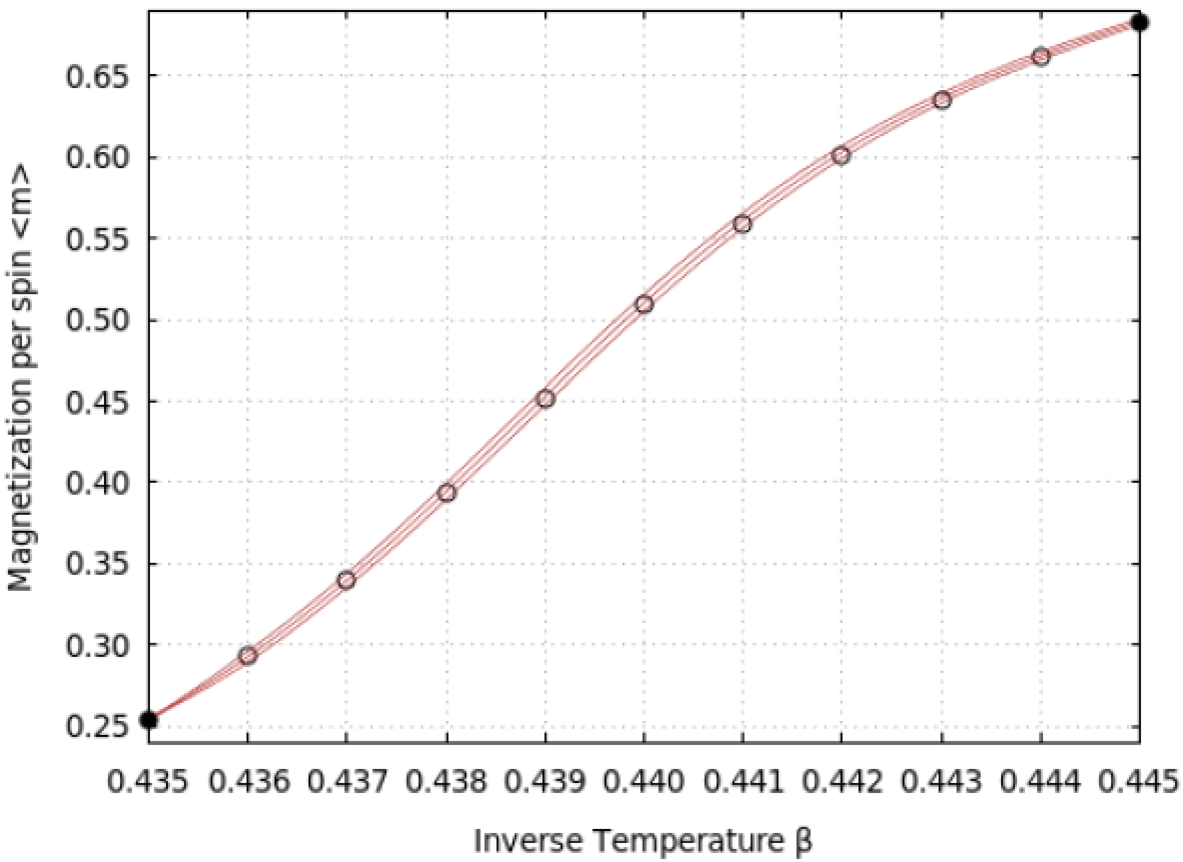
Η μέθοδος Multiple Histogram

Διάγραμμα της ειδικής θερμότητας c συναρτήσει της θερμοκρασίας β για $L = 80$



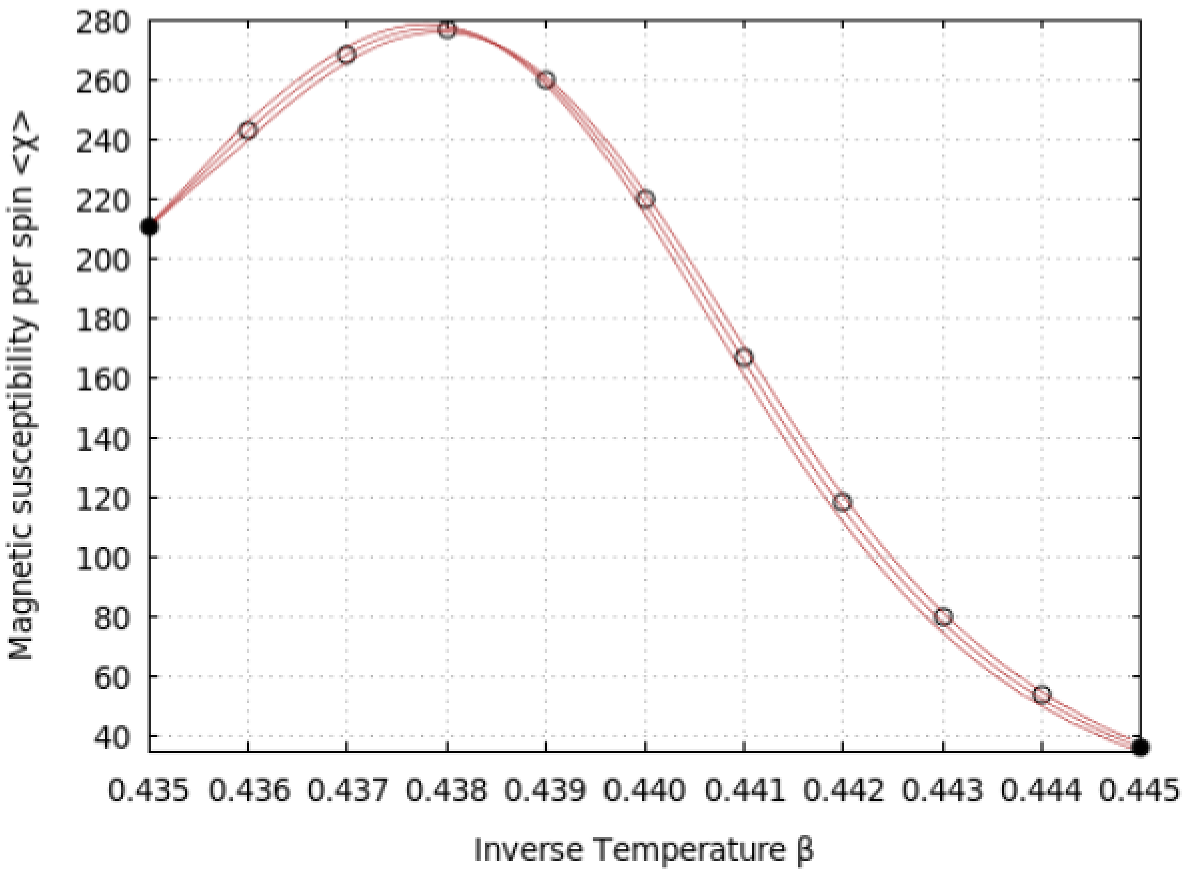
Η μέθοδος Multiple Histogram

Διάγραμμα της μαγνήτισης ανά σπιν $\langle m \rangle$ συναρτήσει της θερμοκρασίας β για $L = 140$



Η μέθοδος Multiple Histogram

Διάγραμμα της μαγνητικής επιδεκτικότητας χ συναρτήσει της θερμοκρασίας β για $L = 140$



Βαθμιση Πεπερασμένου Μεγέθους

Ανασκόπηση: $t = \dfrac{\beta_c - \beta}{\beta_c}$ $\qquad \xi \sim |t|^{-\nu}$

Για το πρότυπο Ising: $\chi \sim |t|^{-\gamma}, \gamma = 7/4$

$$c \sim |t|^{-\alpha}, \alpha = 0$$

$$m \sim |t|^{-\beta}, t < 0, \beta = 1/8$$

Για πεπερασμένο μέγεθος: $\chi \sim L^{\gamma/\nu}$

$$c \sim L^{\alpha/\nu}$$

$$m \sim L^{-\beta/\nu}$$

Βαθμιση Πεπερασμένου Μεγέθους

Ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία:

$$\chi(\beta_c(L), L) \equiv \chi_{max}(L)$$

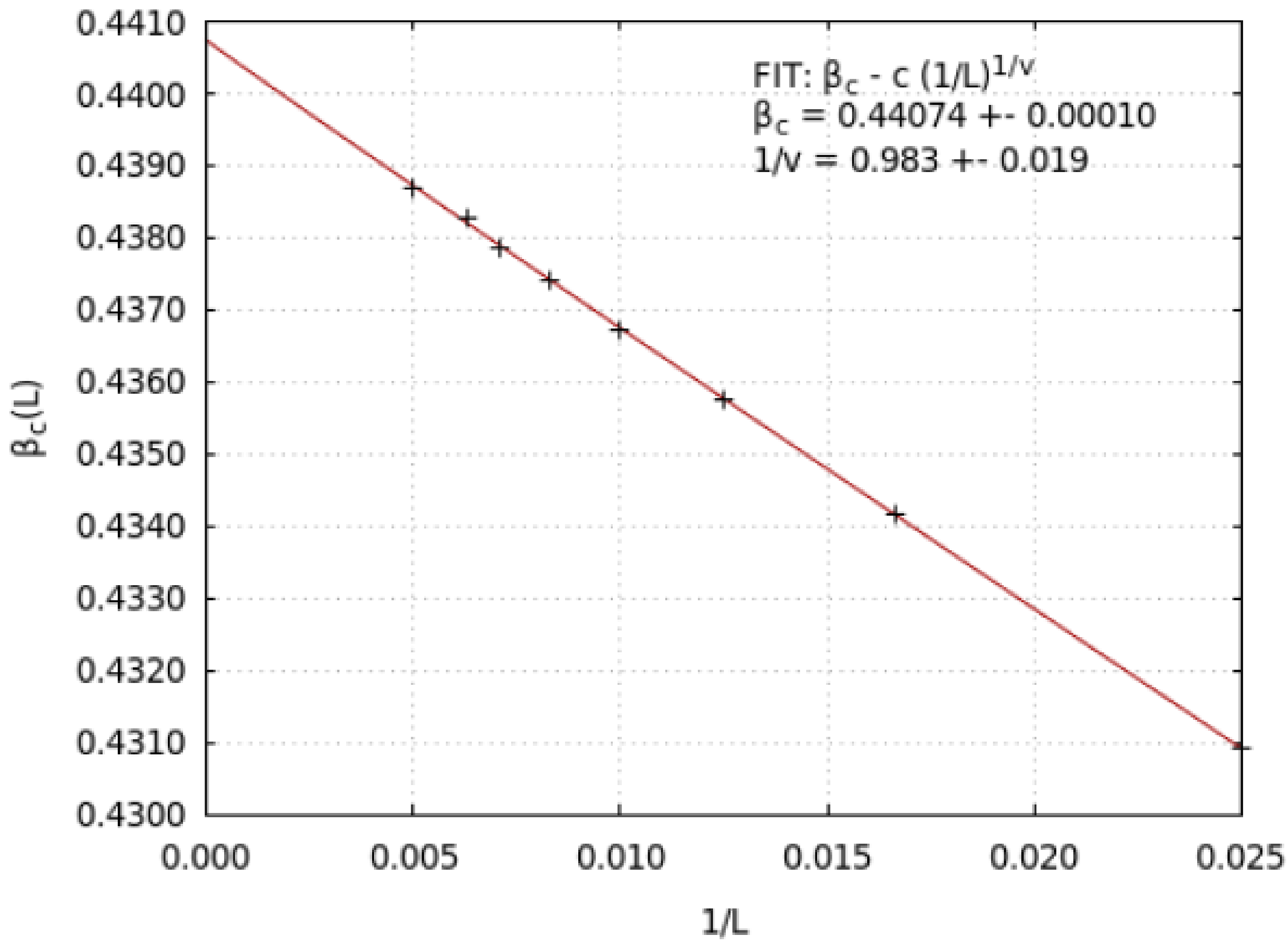
$$c(\beta_c'(L), L) \equiv c_{max}(L)$$

$$\lim_{L\to\infty} \beta_c(L) = \lim_{L\to\infty} \beta_c'(L) = \beta_c$$

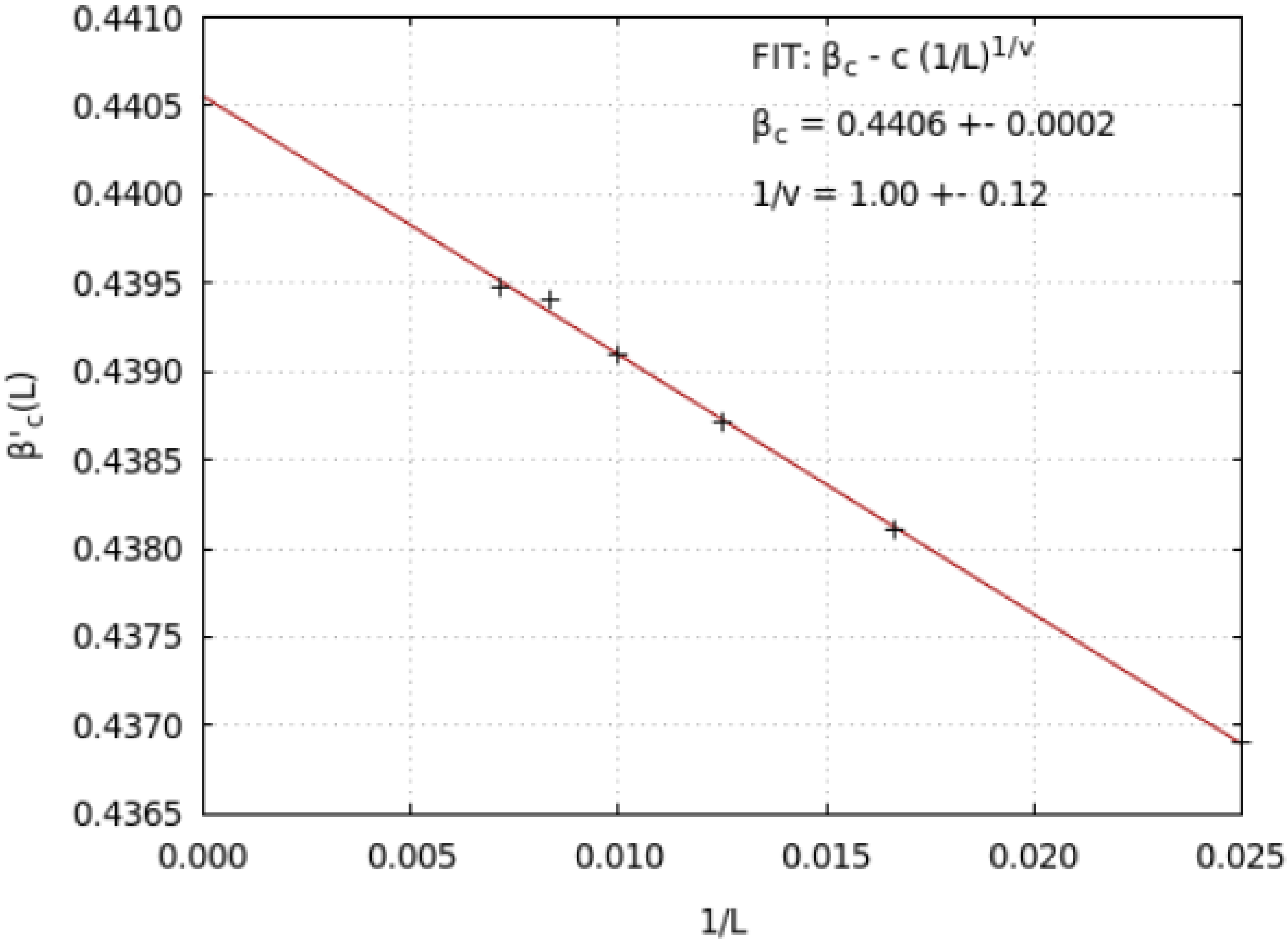
Για την ψευδοκρίσιμη περιοχή σε πεπερασμένο μέγεθος:

$$|t| = \left| \frac{\beta_c - \beta_c(L)}{\beta_c} \right| \sim \xi^{-\frac{1}{\nu}} \sim L^{-\frac{1}{\nu}} \implies \beta_c(L) = \beta_c - \frac{c}{L^{\frac{1}{\nu}}}$$

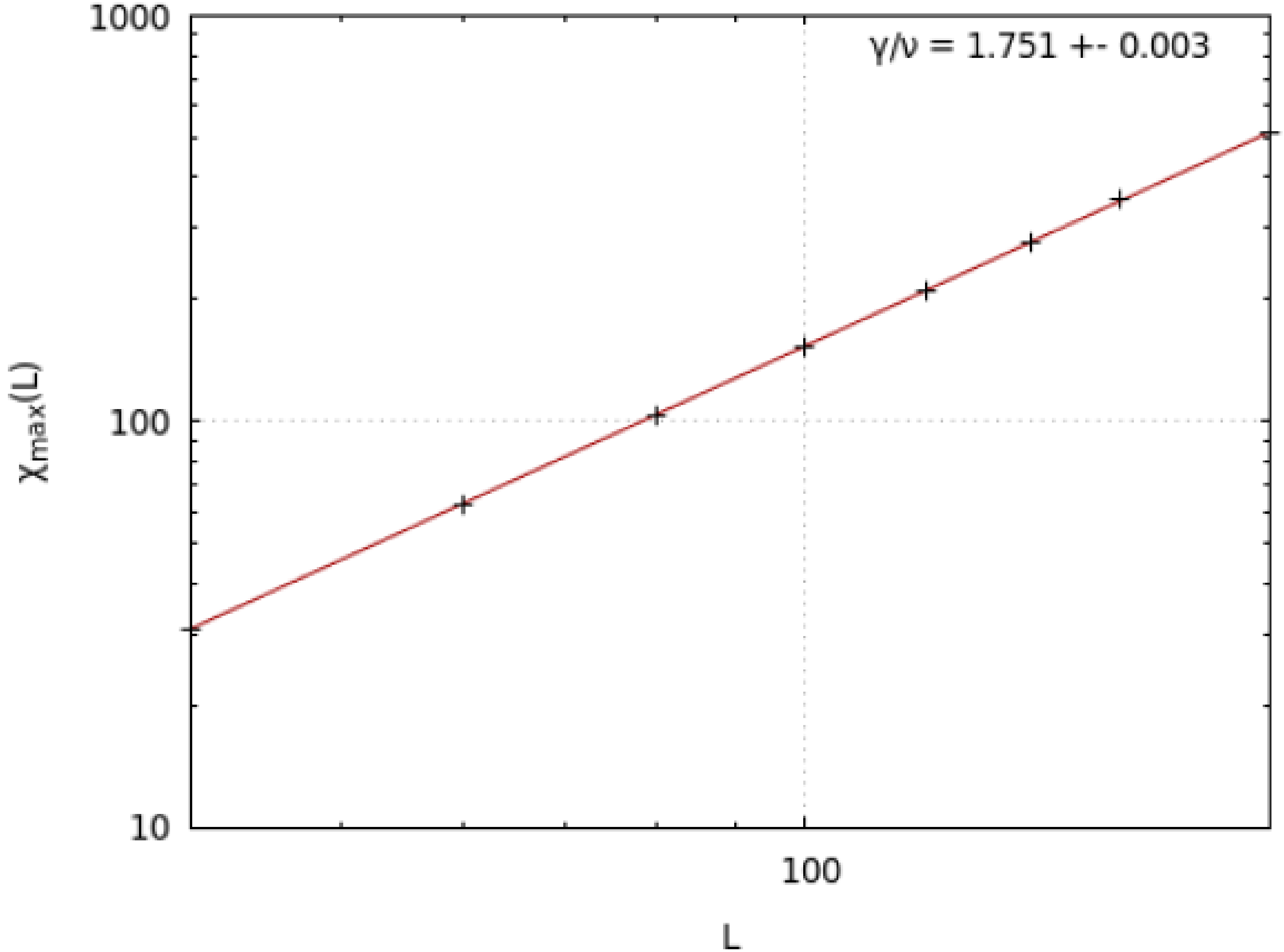
Βαθμιση Πεπερασμένου Μεγέθους



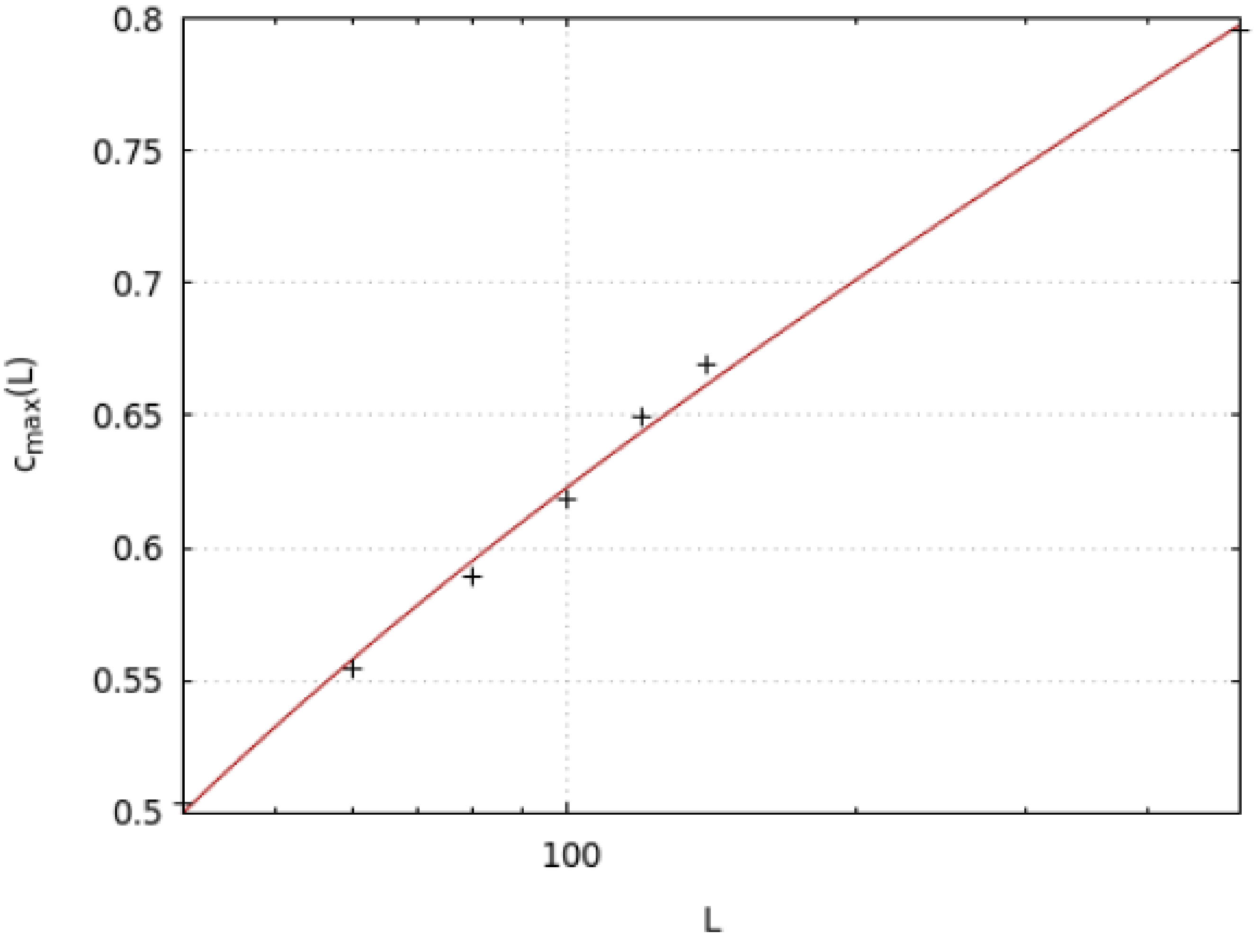
Βαθμιση Πεπερασμένου Μεγέθους



Βαθμιση Πεπερασμένου Μεγέθους



Βαθμιση Πεπερασμένου Μεγέθους



Ευχαριστώ για την προσοχή σας!