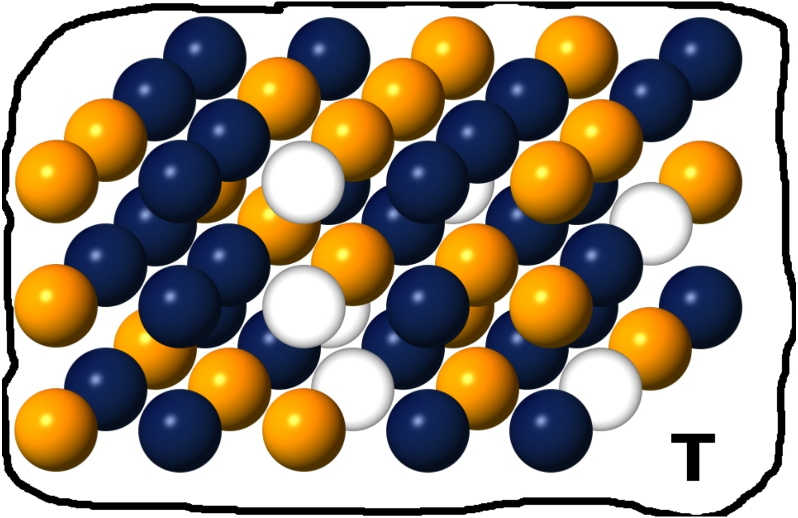
Исследуемая система



Исследуемая система

- Рассматривается большой канонический ансамбль
- N - число частиц
- H - гамильтониан (энергия) системы
- $\overrightarrow{\mathbf{S}}$ - её конфигурация ($\overrightarrow{\mathbf{S}} = S_1, S_2, S_3, ..., S_N$)
- $H(\overrightarrow{\mathbf{S}})$ - энергия системы в состоянии $\overrightarrow{\mathbf{S}}$

Статистические характеристики

Статистическая сумма ансамбля:

$$Z = \sum_{[\vec{\mathbf{s}}]} \exp^{-\frac{H(\vec{\mathbf{s}})}{kT}} \tag{1}$$

Обозначим A - некоторую макроскопическую характеристику системы

$$\begin{aligned} \langle A(T) \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{[\vec{\mathbf{s}}]} A(\vec{\mathbf{s}}) \exp^{-\frac{H(\vec{\mathbf{s}})}{kT}} \\ &= \frac{\sum_{[\vec{\mathbf{s}}]} A(\vec{\mathbf{s}}) \exp^{-\frac{H(\vec{\mathbf{s}})}{kT}}}{\sum_{[\vec{\mathbf{s}}]} \exp^{-\frac{H(\vec{\mathbf{s}})}{kT}}} \end{aligned} \tag{2}$$

Статистические характеристики

Ограничимся m состояниями системы

$$\langle A(T)\rangle \approx \frac{\sum_{[\overrightarrow{\mathbf{s}}]\in m} A(\overrightarrow{\mathbf{s}})\exp^{-\frac{H(\overrightarrow{\mathbf{s}})}{kT}}}{\sum_{[\overrightarrow{\mathbf{s}}]\in m}\exp^{-\frac{H(\overrightarrow{\mathbf{s}})}{kT}}} \tag{3}$$

Метод существенной выборки (Importance sampling)

Сопоставим каждой конфигурации некоторую вероятность $P_{\vec{\mathbf{s}}}$

$$\langle A(T)\rangle \approx \frac{\sum_{[\vec{\mathbf{s}}]\in m} \frac{A(\vec{\mathbf{s}})}{P_{\vec{\mathbf{s}}}} \exp^{-\frac{H(\vec{\mathbf{s}})}{kT}}}{\sum_{[\vec{\mathbf{s}}]\in m} \frac{1}{P_{\vec{\mathbf{s}}}} \exp^{-\frac{H(\vec{\mathbf{s}})}{kT}}} \tag{4}$$

если выбрать $P^{(eq)}_{\vec{\mathbf{s}}} = \frac{1}{Z} \exp^{-\frac{H(\vec{\mathbf{s}})}{kT}}$

$$\langle A(T)\rangle = \frac{1}{m} \sum_{[\vec{\mathbf{s}}]\in m} A(\vec{\mathbf{s}}) \tag{5}$$

Алгоритм Метрополиса

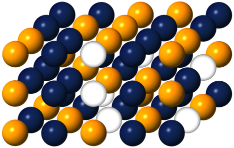
- Переход от независимых состояний к марковской цепи последовательных изменений
- Определяем вероятность перехода $W\vec{\mathbf{S}} \to \vec{\mathbf{S}'}$
- Получаем последовательность переходов
  $\dots \xrightarrow{W} \vec{\mathbf{S}} \xrightarrow{W} \vec{\mathbf{S}'} \xrightarrow{W} \vec{\mathbf{S}''} \xrightarrow{W} \dots.$
- Вероятность перехода удовлетворяет следующим условиям
  1. $W(\vec{\mathbf{S}} \to \vec{\mathbf{S}'}) \geq 0$ для любых состояний $\vec{\mathbf{S}}$, $\vec{\mathbf{S}'}$,
  2. $\sum_{\vec{\mathbf{S}'}} W(\vec{\mathbf{S}} \to \vec{\mathbf{S}'}) = 1$,
  3. $\sum_{\vec{\mathbf{S}}} W(\vec{\mathbf{S}} \to \vec{\mathbf{S}'}) P_{\vec{\mathbf{S}}} = P_{\vec{\mathbf{S}'}}$.

Алгоритм Метрополиса

Вероятность перехода

$$W(\vec{\mathbf{S}} \rightarrow \vec{\mathbf{S}'}) = \begin{cases} 1 & H(\vec{\mathbf{S}'}) < H(\vec{\mathbf{S}}) \\ \exp[-\frac{\Delta H}{kT}] & H(\vec{\mathbf{S}'}) \geq H(\vec{\mathbf{S}}). \end{cases} \quad (6)$$

Модель Изинга



- Гамильтониан

$$H = -J \sum_{<i,j>} S_i S_j - h \sum_i S_i \qquad (7)$$

- $J > 0$, $S_i = \pm 1$
- Короткодействующее взаимодействие: $< i, j >$ - суммирование по j обходит только ближайших соседей i-го спина
- $\sum_{<i,j>} S_i S_j = \sum_i S_i \sum_{j \in i} S_j$

Модель Изинга

Алгоритм Метрополиса

1. Формируется начальная конфигурация.
2. Случайным образом выбирается спин и производится попытка его переворота.
3. Вычисляется вероятность переворота W
4. Задается случайное число r в интервале $(0, 1)$.
5. Если $r \leq W$, то новая конфигурация принимается, иначе - остается неизменной.
6. Определяются значения исследуемых физических величин.
7. Повторяются шаги $2 - 6$.
8. Производится усреднение необходимых величин.

Модель Изинга

- Единица времени - шаг Монте-Карло на спин(MCS/s) - N случайных попыток выбора спина и его переворота
- $N = L^2$ для двумерной системы.