Monte Carlo: wyprowadzenie oraz własności dynamiczne

Jakub Tworzydło

Instytut Fizyki Teoretycznej

13 i 14/12/2022 Pasteura, Warszawa

Plan

Plan

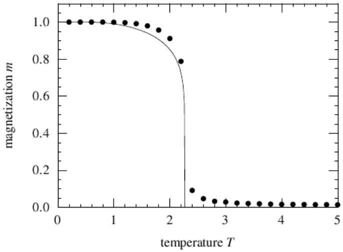
Plan

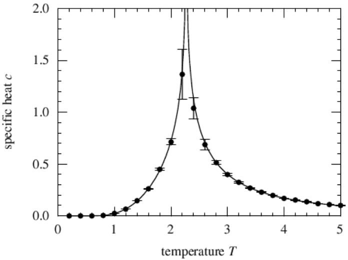
Plan

1. Przejście krytyczne w modelu Isinga
2. Wyprowadzenie równowagowego, termicznego MC
3. Algorytmy Monte Carlo
4. Własności dynamiczne

Plan

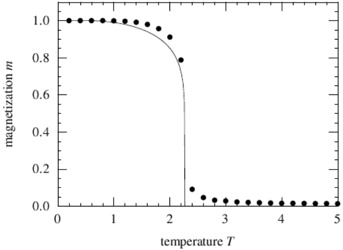
Przykładowe wyniki: sieć 100x100

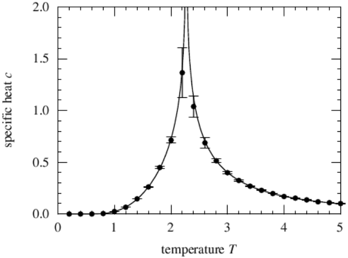




- przejście ostre (rozbieżność) w granicy termodynamicznej
- temperatura krytyczna T_c rozdziela fazy: paramagnetyczną i ferromagnetyczną
- dla m. Isinga $T_c = \frac{2}{\log(1+\sqrt{2})} \simeq 2.27$

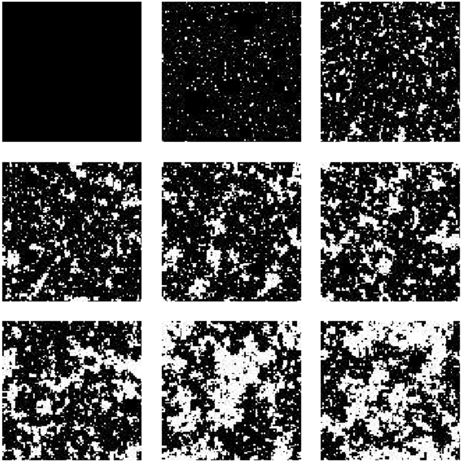
Przykładowe wyniki: sieć 100x100





- przejście ostre (rozbieżność) w granicy termodynamicznej
- temperatura krytyczna T_c rozdziela fazy: paramagnetyczną i ferromagnetyczną
- dla m. Isinga $T_c = \frac{2}{\log(1+\sqrt{2})} \simeq 2.27$
- linie ciągłe – rozwiązanie Onsagera

Model Isinga w pobliżu punktu krytycznego



- powstają klastry uporządkowanych spinów o typowym rozmiarze ξ
- symulacja dla: 10, 20, 40, 60, 100, 200, 400, 1000 MCS

Własności krytyczne

- rozbieżna skala długości $\xi \propto |t|^{-\nu}$, gdzie temp. zredukowana $t = \frac{T - T_c}{T_c}$
- tzw. klasa uniwersalności modelu Isinga (w 2D oraz 3D).

Wykładniki krytyczne: $m \propto t^{\beta}$, $\chi \propto t^{-\gamma}$, $C \propto t^{-\alpha}$

D	2	3	4 (MF)
ν	1	0.63	$1/2$
β	$1/8$	0.32	$1/2$
α	0	0.11	0
γ	$7/4$	1.23	1

- wymiar fraktalny klastra w punkcie krytycznym $D_f = \frac{1}{2}(D + \frac{\gamma}{\nu})$

Plan

Bibliografia

1. J.M. Thijssen
   ”Computational Physics”, Cambridge (1999)
2. M.E.J. Newman and G.T. Barkema
   ”Monte Carlo methods in statistical physics”, Oxford (1999)
3. W. Krauth
   “Statistical Mechanics - Algorithms and Computations”, Oxford (2006)

Los Alamos National Lab

Stanisław Ulam (1909-1984)

John von Neumann (1903-1957)

Historia

Monte Carlo Casino w Monako

Stanisław Ulam (1909-1984)

John von Neumann (1903-1957)

Podstawowe zasady

Wszystko, co powinniśmy wiedzieć o termicznym MC

- próbkowanie wg. wagi (importance sampling)
- równowaga szczegółowa (detailed balance)
- współczynniki akceptacji (acceptance ratios)

... wystarcza, aby zrozumieć większość symulacji z ostanich 50-ciu lat.

Estymator

Ścisłe (choć niezbyt użyteczne)

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_X Q(X) e^{-\beta E(X)}}{\sum_X e^{-\beta E(X)}}$$

Estymator

Załóżmy, że wybieramy przypadkowo M stanów $X_1, X_2, \ldots, X_M$ wg. rozkładu prawdopodobieństwa $p(X)$

$$Q_M = \frac{\sum_i p(X_i)^{-1} Q(X_i) e^{-\beta E(X_i)}}{\sum_i p(X_i)^{-1} e^{-\beta E(X_i)}}$$

jest naszą najlepszą oceną (estymatorem) $\langle Q \rangle = \lim_{M\to\infty} Q_M$.

Estymator

Gdybyśmy umieli znaleźć próbki z $p(X) = e^{-\beta E(X)}/Z$, wtedy

$$Q_M = \frac{\sum_i Q(X_i)}{M}$$

otrzymalibyśmy estymator z próbkowaniem wg. wag.
(IMPORTANCE SAMPLING)

Estymator

Gdybyśmy umieli znaleźć próbki z $p(X) = e^{-\beta E(X)}/Z$, wtedy

$$Q_M = \frac{\sum_i Q(X_i)}{M}$$

otrzymalibyśmy estymator z próbkowaniem wg. wag.
(IMPORTANCE SAMPLING)

Estymator

Gdybyśmy umieli znaleźć próbki z $p(X) = e^{-\beta E(X)}/Z$, wtedy

$$Q_M = \frac{\sum_i Q(X_i)}{M}$$

otrzymalibyśmy estymator z próbkowaniem wg. wag.
(IMPORTANCE SAMPLING)

Jak? Odpowiedź: tzw. procesy Markowa.

Procesy Markowa

- p. Markowa jest przepisem jak przejść z X do Y
- **prawdopodobieństwa przejścia** $\mathcal{P}(X \to Y)$, unormowane $\sum_Y \mathcal{P}(X \to Y) = 1$
- otrzymujemy sekwencję stanów tzw. **łańcuch Markowa**: $X_1 \to X_2 \to X_3 \to \dots$
- powinniśmy sprawdzić **ergodyczność** tj. czy każdą konfigurację można osiągnąć

Równowaga szczegółowa

- poszukujemy granicznego, stacjonarnego rozkładu

$$p_X = \sum_Y p_Y \mathcal{P}(Y \to X)$$

- możemy przepisać

$$\sum_{Y'} p_X \mathcal{P}(X \to Y') = \sum_Y p_Y \mathcal{P}(Y \to X)$$

- warunek **równowagi szczegółowej** (mocniejszy, ale łatwiejszy do rozwiązania)

$$p_X \mathcal{P}(X \to Y) = p_Y \mathcal{P}(Y \to X)$$

Równowaga szczegółowa

- poszukujemy granicznego, stacjonarnego rozkładu

$$p_X = \sum_Y p_Y \mathcal{P}(Y \to X)$$

- możemy przepisać

$$\sum_{Y'} p_X \mathcal{P}(X \to Y') = \sum_Y p_Y \mathcal{P}(Y \to X)$$

- warunek **równowagi szczegółowej**
  (mocniejszy, ale łatwiejszy do rozwiązania)

$$p_X \mathcal{P}(X \to Y) = p_Y \mathcal{P}(Y \to X)$$

$\longrightarrow$ p_X Boltzmanna ma być stacjonarnym rozkładem procesu

Plan

Krok próbny i współczynnik akceptacji

$$\mathcal{P}(X \to Y) = g_{XY} A_{XY}$$

Symetryczna propozycja, krok próbny: $g_{XY} = g_{YX}$

Współczynniki akceptacji A_{XY} muszą spełniać w-ek równowagi szczegółowej, zatem

$$\frac{A_{XY}}{A_{YX}} = \frac{p_Y}{p_X} = e^{-\beta(E_Y - E_X)}$$

Zysk! Nie ma potrzeby obliczania stałej normalizacyjnej Z.

Algorytmy: “heat-bath” i Metropolisa

Najprostszy wybór (heath-bath):

$$A_{XY} = A_0 e^{-\beta E_Y}$$

Propozycja Metropolisa:

$$A_{XY} = \begin{cases} e^{-\beta(E_Y - E_X)} & \text{dla } E_Y > E_X \\ 1 & \text{w p. p.} \end{cases}$$

Jeśli Y ma niższą energię, jest zawsze akceptowane i zastępuje X.

Jeśli Y ma wyższą energię, zostaje zaakceptowane z pewnym prawdopodobieństwem.

Algorytm Metropolisa dla modelu Isinga

1. Wybierz spin losowo, zaproponuj Y jako X z jednym spinem odwróconym
   $\Longrightarrow g_{XY} = 1/N$ (N – liczba wszystkich spinów)
2. Rachunek:

   $$\Delta E = E(Y) - E(X) = 2Js_i \sum_{j \text{ n.n. dla } i} s_{j(i)}$$

   gdzie s_i – nie-odwrócony wybrany spin, $s_{j(i)}$ sąsiednie spiny
3. Dla $\Delta E < 0$ akceptuj tj. odwróć s_i.
4. Dla $\Delta E > 0$
   wybierz losowe $0 \leq r < 1$ i odwróć spin wtedy, gdy $r < e^{-\beta \Delta E}$.

Algorytm Kawabaty

Model Isinga ze stałą magnetyzacją (Conserved Order Parameter):

$$\sum_i s_i = \mathrm{const.}$$

(z zastosowaniem np. w gazach sieciowych)

1. Wybierz losowo parę sąsiednich spinów i, j, zaproponuj Y jako X z zamianą pary (o ile są różne)
2. Rachunek:

$$\Delta E = E(Y) - E(X) = 2J \left[s_i \sum_{k \neq j \text{ n.n. dla } i} s_{k(i)} + s_j \sum_{k \neq i \text{ n.n. dla } j} s_{k(j)} \right]$$

   gdzie s_i, s_j – nie-odwrócona para spinów
3. Dla $\Delta E < 0$ akceptuj tj. zamień $s_i \leftrightarrow s_j$.
4. Dla $\Delta E > 0$
   wybierz losowe $0 \leq r < 1$ i zamień spiny wtedy, gdy $r < e^{-\beta \Delta E}$.

Podsumowanie

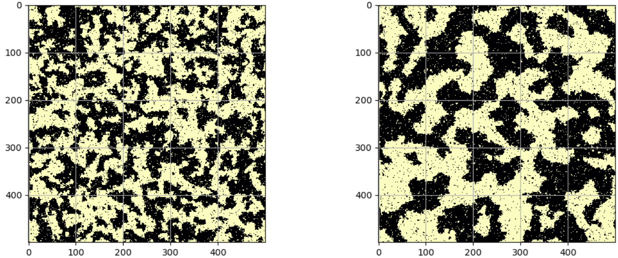
- Metoda symulacji układów w równowadze termodynamicznej
- Pomocnicza konstrukcja procesów Markowa
  i rozwiązanie np. w postaci Metropolisa

Plan

Przejście typu coarsening (pogrubiania)

- formowanie się bazaltu i granitu
- wstrząśnięty olej z wodą
- żeliwo (stop żelaza z węglem)
- formowanie polikryształu (uporządkowanych domen)

Dynamika powstawania domen



- model Isinga po MCS 100 oraz 500 w $T = 2$
- fluktuacje termiczne, lokalne reguły
- dynamiczna klasa uniwersalności (trudniejsza)

Wykładniki dynamiczne

W modelu z zachowaniem parametru porządku (jak separacja cieczy):

$$R \propto t^{1/3}$$

Niezachowany parametr porządku (polikryształ, model Isinga):

$$R \propto t^{1/2}$$

Co ciekawe: nie zależy od wymiaru!