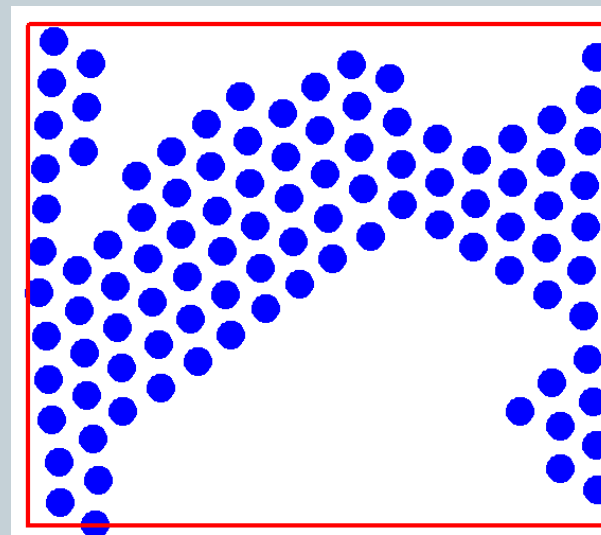
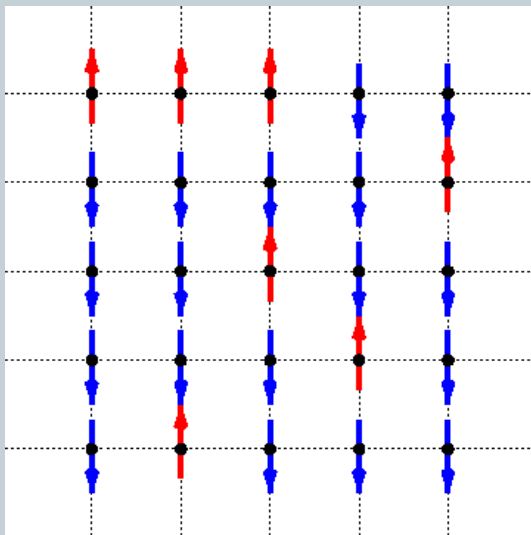


Symulacje Monte Carlo w stałej temperaturze



. ALGORYTM METROPOLISA



Gaz Lennarda-Jonesa

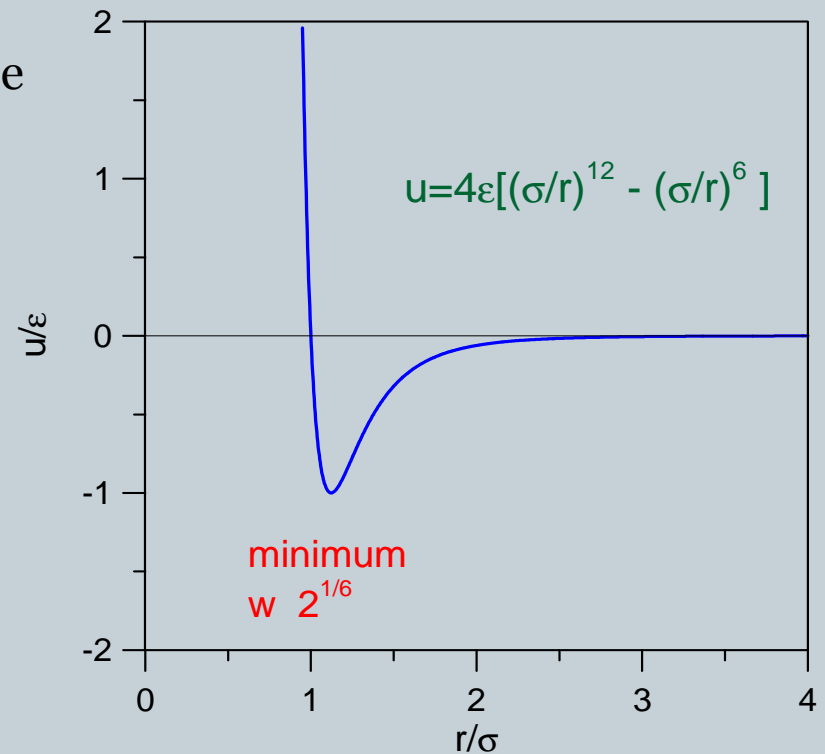


Rozważamy N atomów, których oddziaływanie zadaje potencjał Lennarda-Jonesa

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Energia potencjalna takiego układu

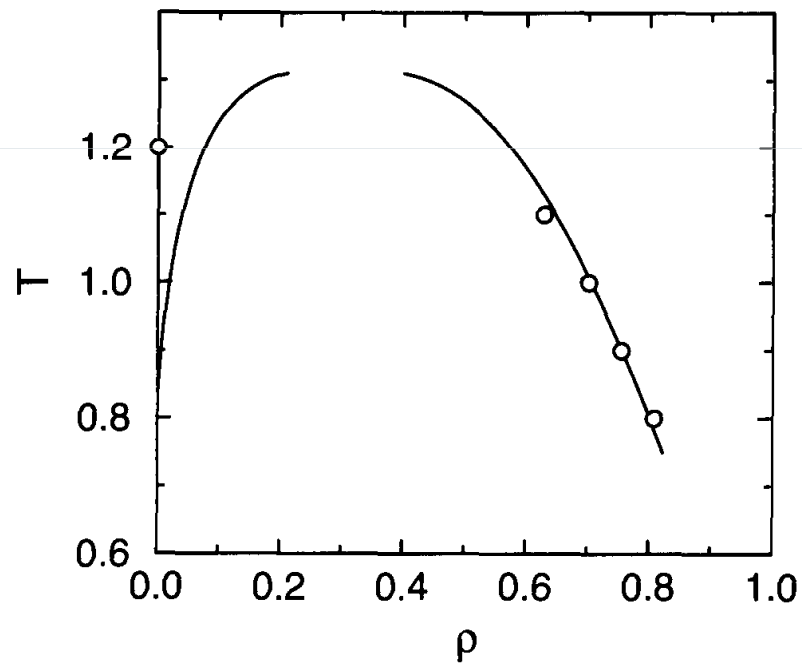
$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i \sum_{j, j>i} u(r_{ij})$$



Gaz Lennarda-Jonesa



Ciecz/gaz Lennarda Jonesa ma szereg ciekawych własności, np. współistnienie fazy gazowej i ciekłej



Algorytm Metropolisa



W temperaturze T konfiguracja $\mathbf{X}=(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N)$ wystąpi z gęstością prawdopodobieństwa

$$P(\mathbf{X}) = C \exp(-U(\mathbf{X})/kT)$$

W metodzie Monte Carlo generowanie konfiguracji \mathbf{X} z takim rozkładem realizuje się za pomocą algorytmu Metropolisa

Warunek równowagi szczegółowej

$$P(\mathbf{X}_b)W(\mathbf{X}_b \rightarrow \mathbf{X}_t) = P(\mathbf{X}_t)W(\mathbf{X}_t \rightarrow \mathbf{X}_b)$$

gdzie \mathbf{W} jest macierzą przejścia

$$W(\mathbf{X}_b \rightarrow \mathbf{X}_t) = \Gamma(\mathbf{X}_b \rightarrow \mathbf{X}_t)R(\mathbf{X}_b \rightarrow \mathbf{X}_t)$$

Iloczyn prawd., że będąc w konfiguracji \mathbf{X}_b wygenerujemy konfiguracji \mathbf{X}_t i prawd. akceptacji takiego posunięcia

Algorytm Metropolisa



Metropolis wybrał \mathbf{W} w postaci

$$W(\mathbf{X}_b \rightarrow \mathbf{X}_t) = \Gamma(\mathbf{X}_b \rightarrow \mathbf{X}_t) \min\left(1, \frac{P(\mathbf{X}_t)}{P(\mathbf{X}_b)}\right)$$

Uwzględniając rozkład P dostajemy słynny wzór

$$W(\mathbf{X}_b \rightarrow \mathbf{X}_t) = \Gamma(\mathbf{X}_b \rightarrow \mathbf{X}_t) \min(1, \exp(-\Delta U / kT))$$

Prawdopodobieństwo akceptacji takiego przejścia zależy od różnicy energii potencjalnej

Algorytm Metropolisa



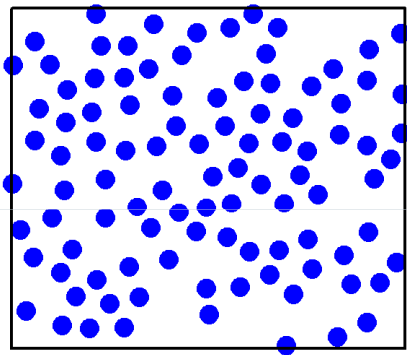
Algorytm.

1. Zadać stan początkowy X_0 w chwili $i=0$.
2. Wygenerować testowy stan X_t z $X_b = X_i$ za pomocą rozkładu $\Gamma_{b,t}$.
3. Obliczyć $\Delta U = \mathcal{U}(X_t) - \mathcal{U}(X_b)$
4. Jeśli $\Delta U \leq 0$ lub $\text{rng}() < \exp(-\Delta U / kT)$
to $X_{i+1} = X_t$, a w przeciwnym razie $X_{i+1} = X_b$.
5. $i++$; go to 2.

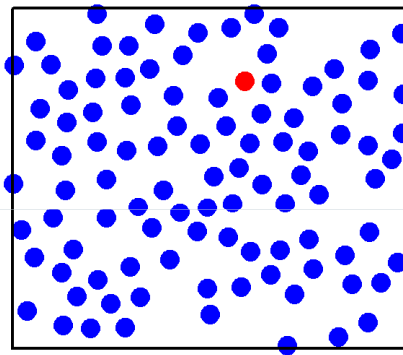
Gaz Lennarda-Jonesa



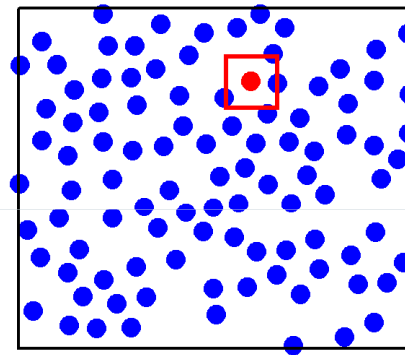
Bieżąca
konfiguracja



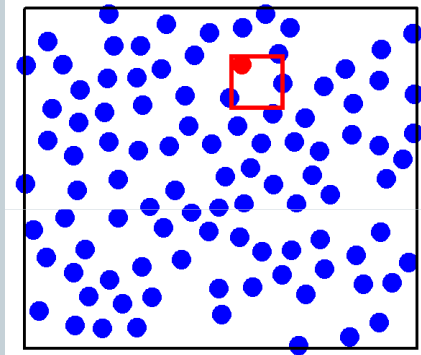
Losowy
wybór atomu



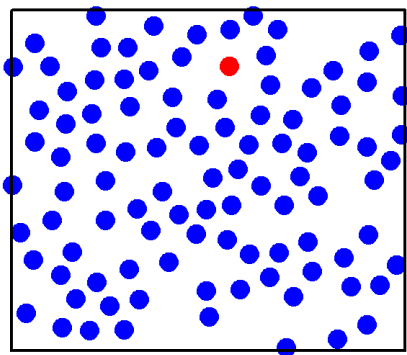
Lokalne
otoczenie LO



Losowy wybór
położenia w LO



Testowa konfiguracja



$$j = N * rng()$$

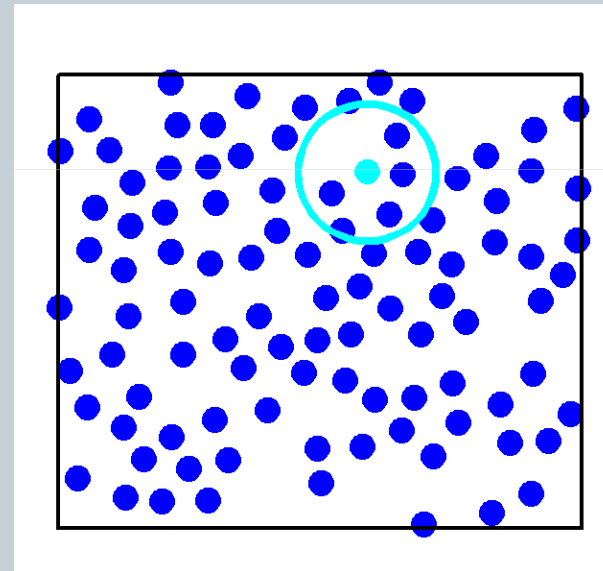
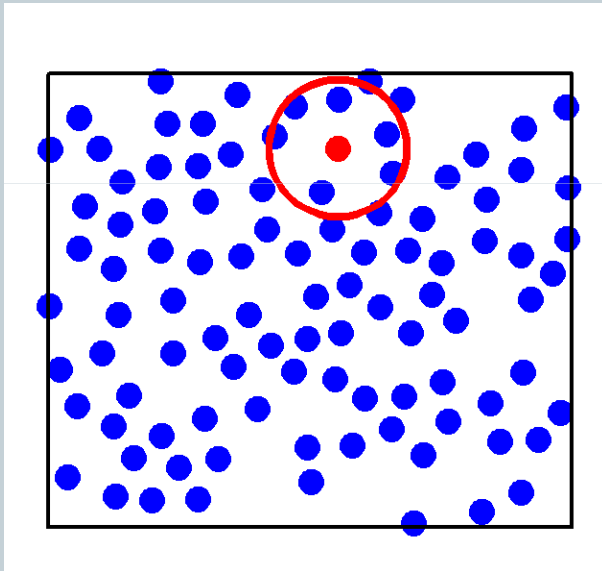
$$x'_j = x_j + \Delta \cdot (rng() - 0.5)$$

$$y'_j = y_j + \Delta \cdot (rng() - 0.5)$$

Gaz Lennarda-Jonesa



Do obliczenia różnicy energii ΔU wystarczy znać energię oddziaływania wylosowanego atomu U_j i U_j z innymi atomami w kole o promieniu = zasięg potencjału.



$$\Delta U = U_j - U_j$$

Algorytm Metropolisa



Symulacja MC korzystająca z alg. Metropolisa składa się z 3 etapów

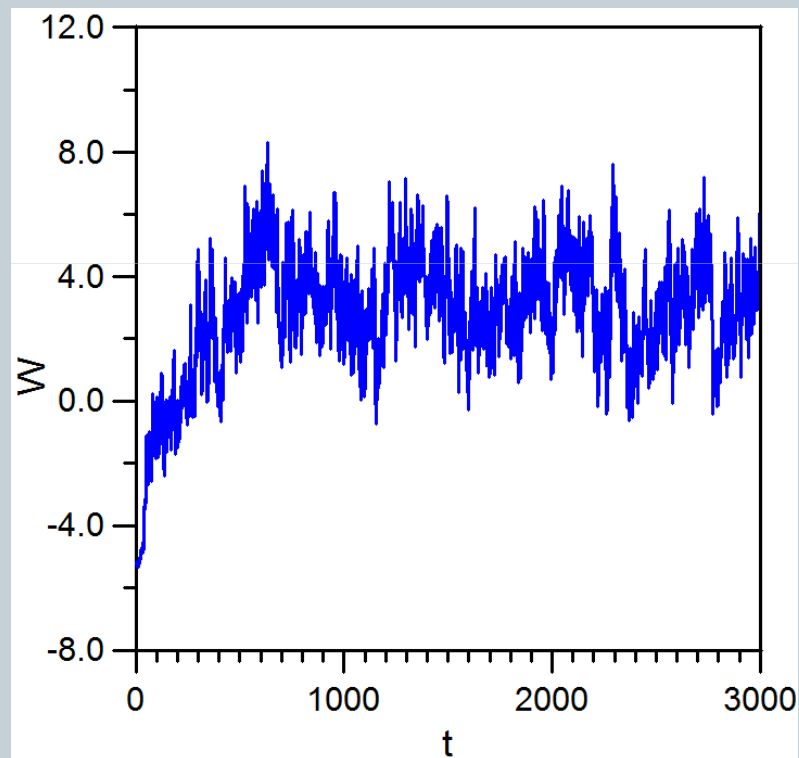
1. Inicjalizacji układu w chwili $t=0$.
2. Termalizacji w czasie $t=\tau_R$.
3. Pomiarów od chwili τ_R co odstęp czasowy $\delta\tau$.

Czas t mierzony jest w krokach MC. 1 krok MC w układzie z N atomami odpowiada testowaniu kolejnych N konfiguracji

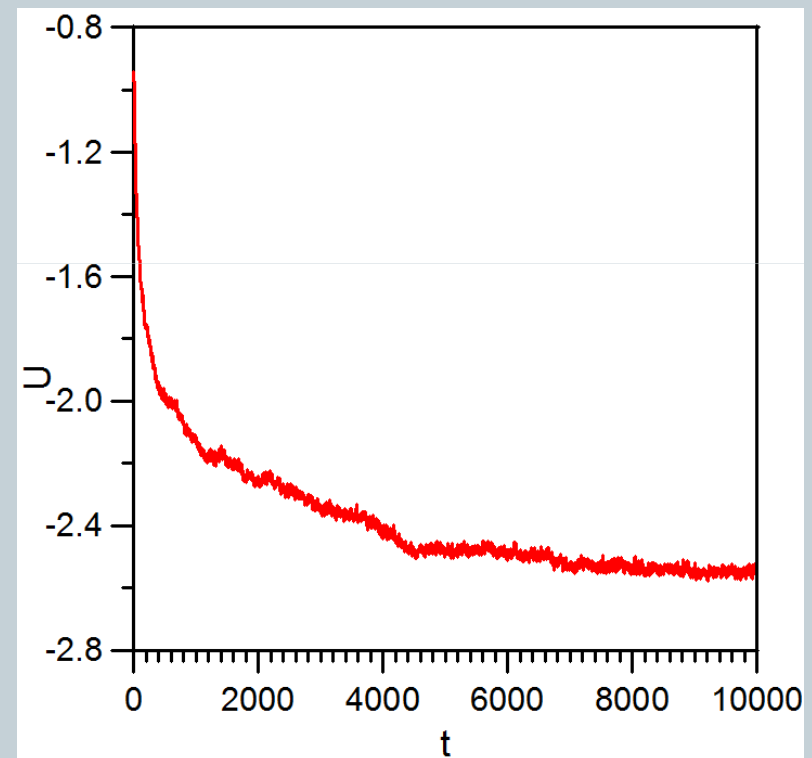
Algorytm Metropolisa



Termalizacja



Ewolucja wiriału $T=2$, $\rho=0.5$

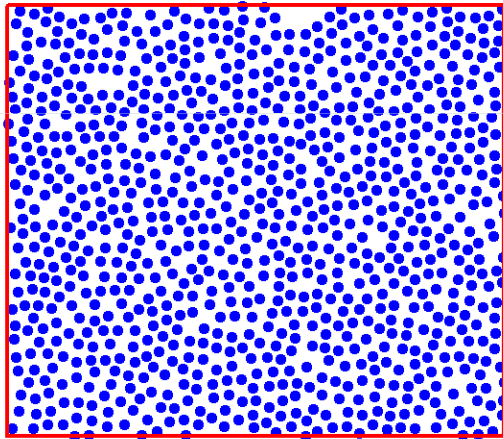


Ewolucja energii $T=0.1$, $\rho=0.5$

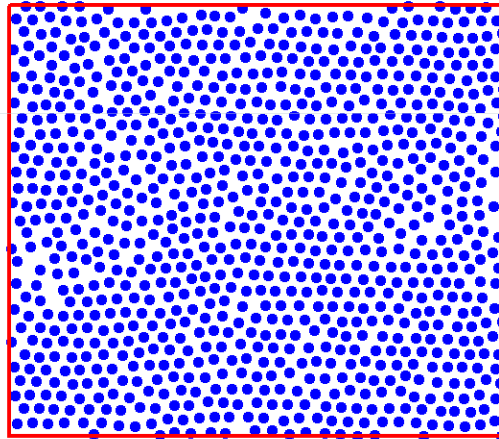
Algorytm Metropolisa



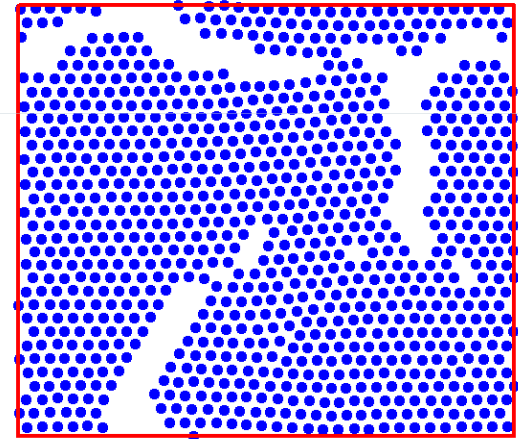
Konfiguracje $N=900$, $\rho=0.8$



$T=2$



$T=0.40$



$T=0.10$

Algorytm Metropolisa



Pomiary

Po termalizacji układu
wybieramy n konfiguracji $\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2, \dots, \mathcal{X}_n$ z odstępem czasowym $\delta\tau$,

a średnią dowolnej wielkości A w temperaturze T szacujemy
następująco

$$\langle A \rangle_T \approx \bar{A} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(\mathcal{X}_i)$$

Algorytm Metropolisa



Pomiar ciśnienia

Ciśnienie otrzymamy mierząc wiriał sił

$$P = \rho \left[k_B T + \frac{\langle W \rangle}{3N} \right]$$

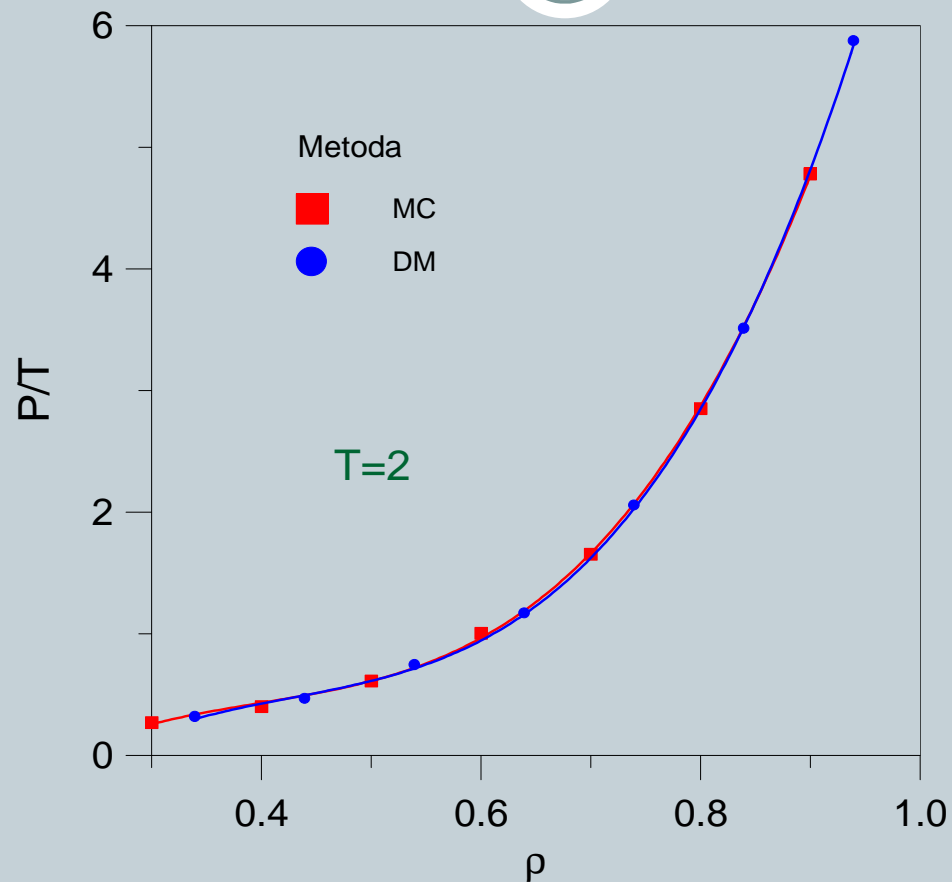
gdzie

$$\langle W \rangle = \left\langle \sum_{i,j>i} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \vec{F}_{ij} \right\rangle$$

A dla gazu L-J

$$\langle W \rangle = \left\langle \sum_{i,j>i} 48\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \right\rangle$$

Gaz Lennarda-Jonesa



Ciśnienie jako funkcja gęstości w $T=2$, obliczone metodami
dynamiki molekularnej i Monte Carlo

Model Isinga



W d-wymiarowym modelu Isinga spiny s_i rozmieszczone są w węzłach sieci o rozmiarze liniowym L . Liczba węzłów $N=L^d$. Każdy spin może przyjmować wartość $+1$ lub -1 .

Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_i s_i$$

Sumowanie w pierwszym składniku ograniczone jest do najbliższych sąsiadów, J jest całką wymiany, a μ momentem magnetycznym spinu.

Model Isinga



Energia wewnętrzna

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle_T$$

gdzie

$$\langle A \rangle_T = Z^{-1} \sum_{s_1=\pm 1, s_2=\pm 1, \dots} A(s_1, s_2, \dots) \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(s_1, s_2, \dots)}{k_B T}\right)$$

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1, s_2=\pm 1, \dots} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(s_1, s_2, \dots)}{k_B T}\right)$$

Model Isinga



Namagnesowanie $M(T)$, na spin m

$$M(T) = \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle_T, \quad m = \frac{M}{N}$$

Ciepło właściwe na spin

$$C_V = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{Nk_B T^2}$$

Podatność magnetyczna

$$\chi = \frac{N}{k_B T} \begin{cases} \langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2 & T < T_c \\ \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 & T > T_c \end{cases}$$

Model Isinga



Własności krytyczne

W pobliżu temperatury przejścia fazowego T_c obserwuje się zachowanie krytyczne wielkości takich wielkości jak

Ciepło właściwe $M(T) \approx (T - T_c)^\beta$

Podatność magnetyczna $\chi(T) \approx |T - T_c|^{-\gamma}$

Długość korelacji $\xi(T) \approx |T - T_c|^{-\nu}$

gdzie β , γ i ν są wykładnikami krytycznymi

Długość korelacji jest nieskończona w punkcie krytycznym !

Algorytm Metropolisa



Zastosowanie do układu spinów .

Bieżąca konfiguracja spinów $\mathcal{K}_b = (s_1, s_2, \dots, s_N)$ o energii E_b ,

Nową konfigurację wybierzemy spośród tych różniących się tylko jednym spinem :

- poprzez wylosowanie numeru spinu , przyjmijmy p
- i zamianę $S_p \rightarrow -S_p$.

Otrzymamy zatem konfigurację $\mathcal{K}_n = (s_1, s_2, \dots, -s_p, \dots, s_N)$ o energii E_n

Akceptacja nowej konfiguracji zależy od różnicy energii $\Delta E = E_n - E_b$.

Jeśli $\Delta E \leq 0$ to akceptujemy \mathcal{K}_n

W przeciwnym razie ($\Delta E > 0$) akceptacja zachodzi z prawdopodobieństwem $\exp(-\Delta E / kT)$

Algorytm Metropolisa



Zastosowanie do układu spinów ΔE nie wymaga obliczania energii nowej konfiguracji, gdyż przewrócenie jednego spinu w węźle p , $S_p \rightarrow -S_p$, powoduje zmianę oddziaływania tego spinu z jego najbliższymi sąsiadami.

$$\Delta E = 2JS_p \left(\sum_{\text{po sąsiadach } p} S_j \right)$$

Przykład kodu obliczającego zmianę energii przy przewróceniu spinu w węźle (i,j) sieci kwadratowej z uwzględnieniem periodycznych warunków brzegowych

```
const int L=128, Lm1=L-1;
```

```
int DE( int i, int j)
```

```
{int tym= S[i][(j+1)%L] + S[i][(j+Lm1)%L] + S[(i+Lm1)%L][j] + S[(i+1)%L][j];  
return( 2*tym *S[i][j]);}
```

Algorytm Metropolisa



Symulacja Monte Carlo korzystająca z algorytmu Metropolisa składa się z 3 etapów

1. Inicjalizacji układu w chwili $t=0$.
2. Termalizacji w czasie $t=\tau_R$.
3. Pomiarów od chwili τ_R co odstęp czasowy $\delta\tau$.

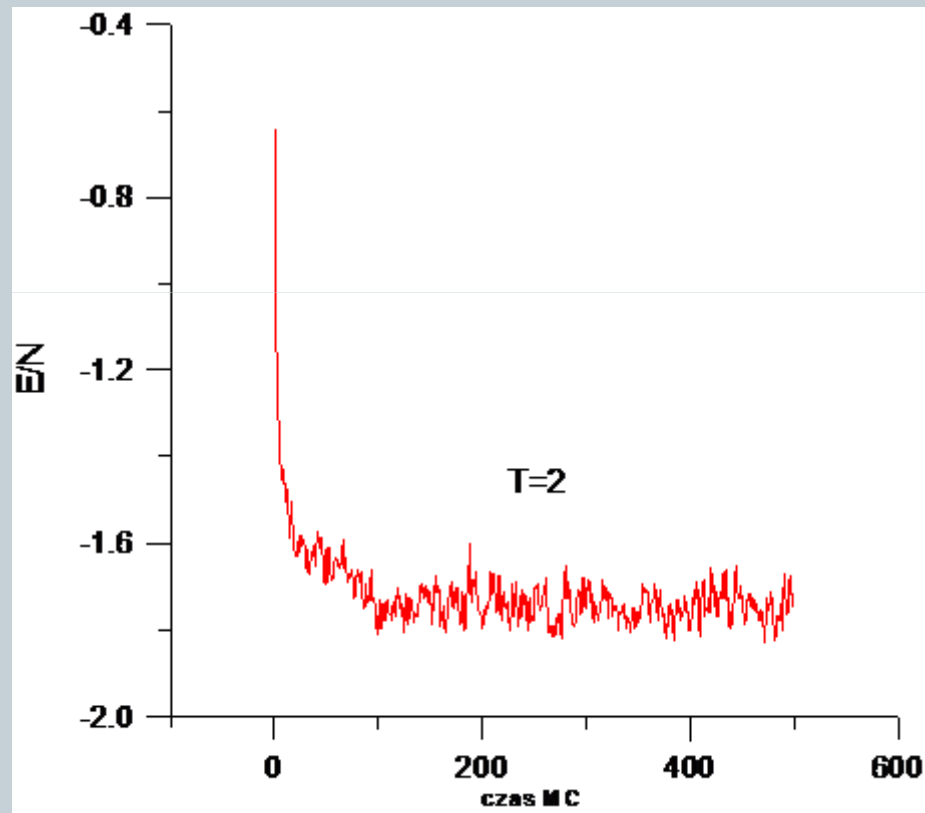
Czas t mierzony jest w krok MC.

1 krok MC w modelu Isinga z N spinami odpowiada testowaniu kolejnych N konfiguracji spinowych.

Algorytm Metropolisa



Termalizacja



Algorytm Metropolisa



Pomiary interesującej nas wielkości A polegają na obliczeniu średniej arytmetycznej

$$\langle A \rangle_T = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} A_i$$

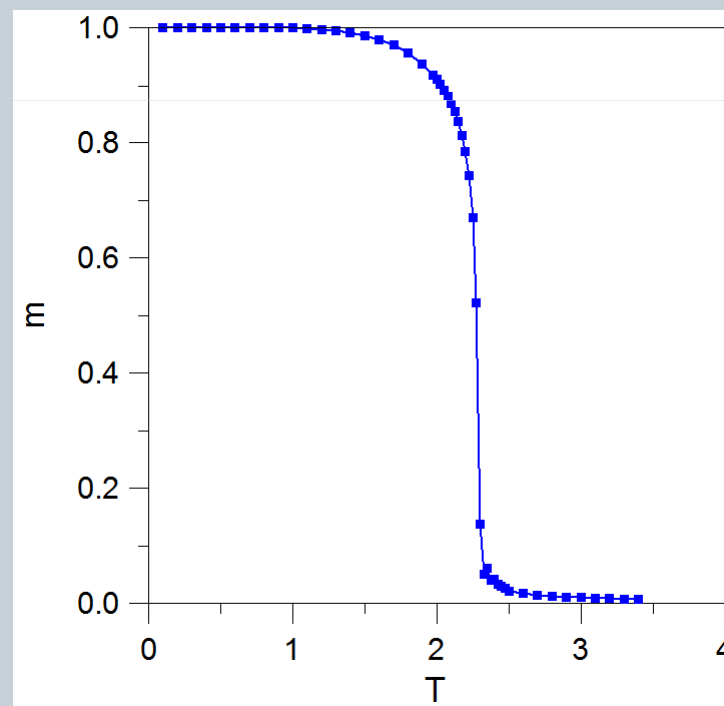
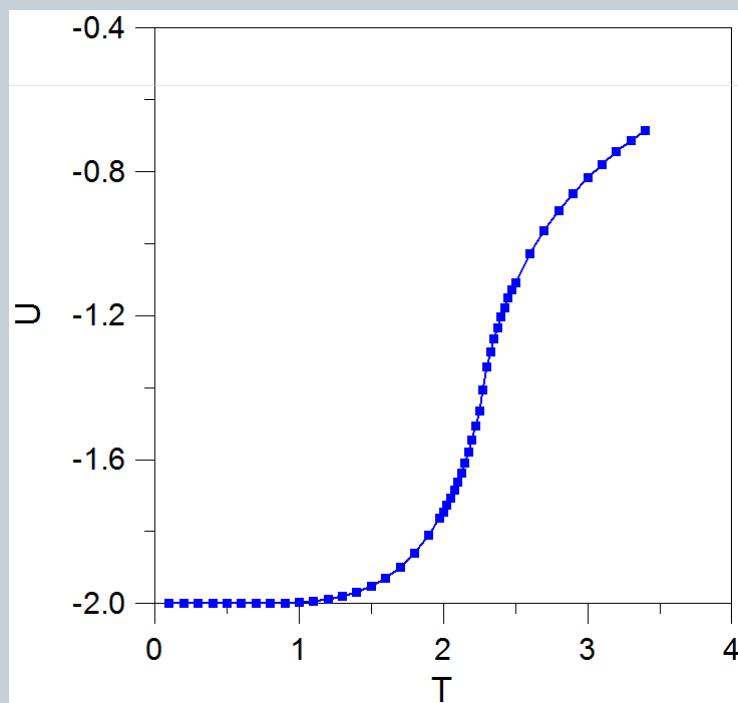
gdzie A_i jest wartością A obliczoną na konfiguracji \mathcal{K}_i w chwili $t = \tau_R + i^* \delta\tau$

Konieczność uwzględnienia odstępu czasowego $\delta\tau$ w pomiarach wynika z faktu, iż kolejne konfiguracje w łańcuchu Markowa są silnie skorelowane.

Model Isinga – wyniki symulacji



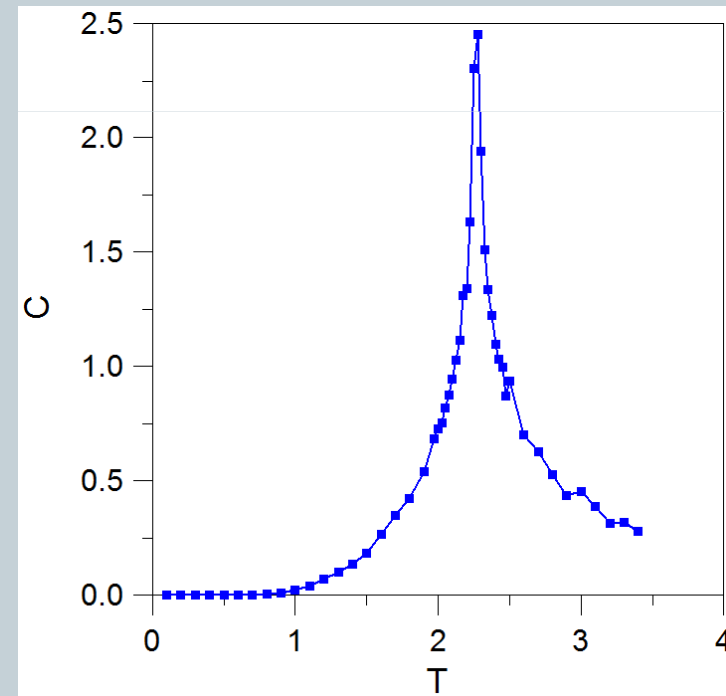
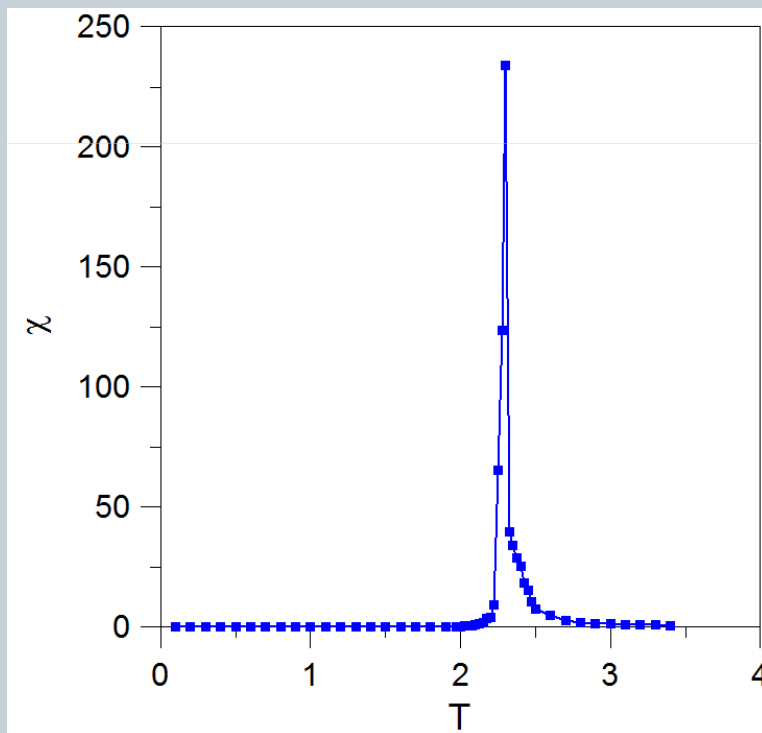
Zastosujemy teraz algorytm Metropolis'a do zbadania zależności temperaturowych energii wewnętrznej U , namagnesowania m , podatności magnetycznej χ i ciepła właściwego C w dwuwymiarowym modelu Isinga na sieci kwadratowej o $L=256$.



Model Isinga – wyniki symulacji



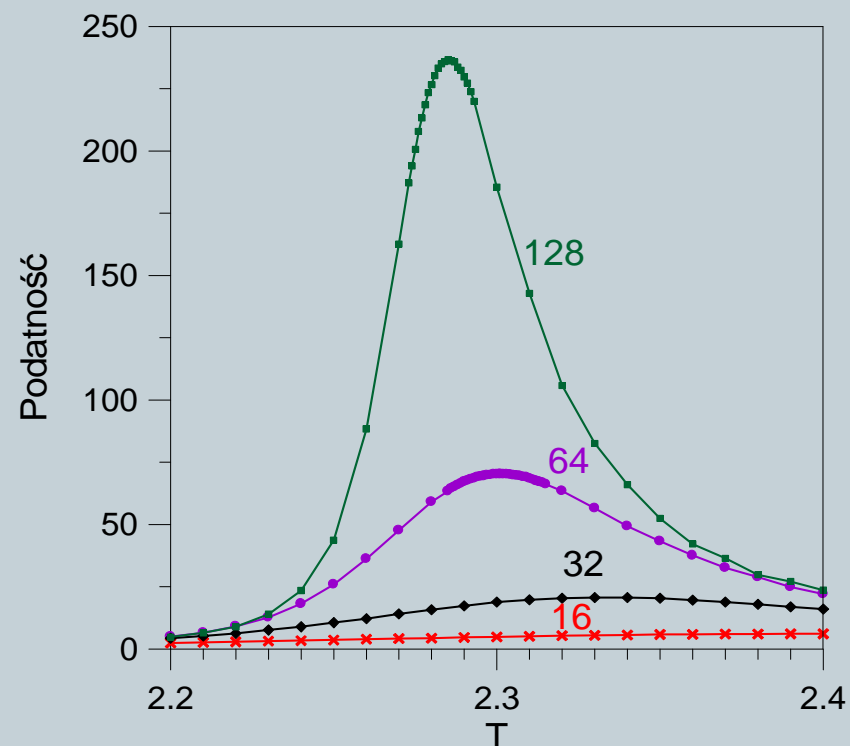
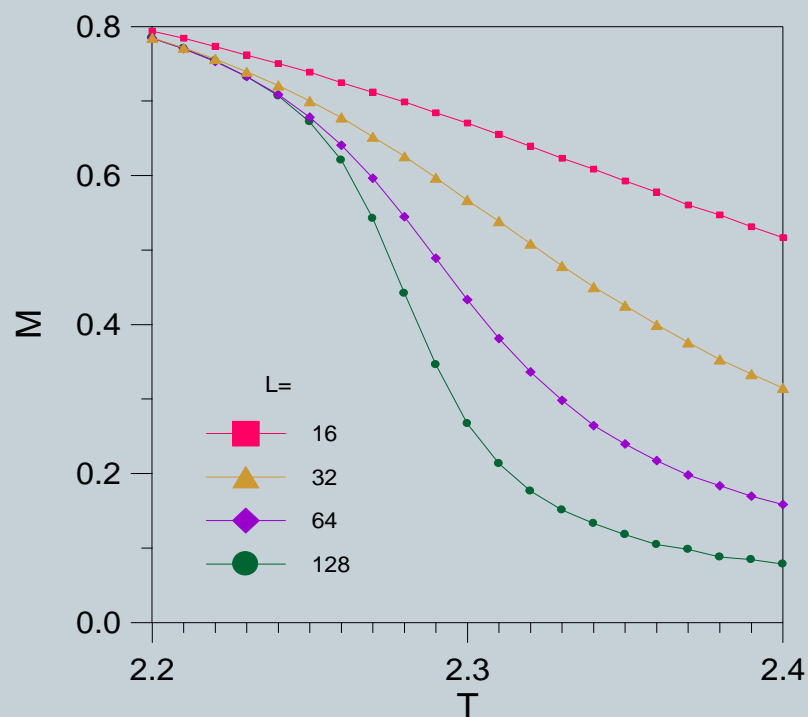
Podatność i ciepło właściwe w skończonym mają maksima w pobliżu T_c nieskończonego układu (pobliżu $T_c \approx 2.269$)



Model Isinga – wyniki symulacji



Wyniki symulacji skończonym układzie zależą w pobliżu T_c od o rozmiaru liniowego L ponieważ długość korelacji ξ jest większa od L



Model Isinga – wyniki symulacji



Ważną rolę w wyznaczeniu punktu krytycznego T_c gra kumulanta Bindera

$$K_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}$$

Wielkość ta powyżej T_c dąży do zera – fluktuacje namagnesowania są gaussowskie, a w niskich temperaturach osiąga wartość $2/3$.

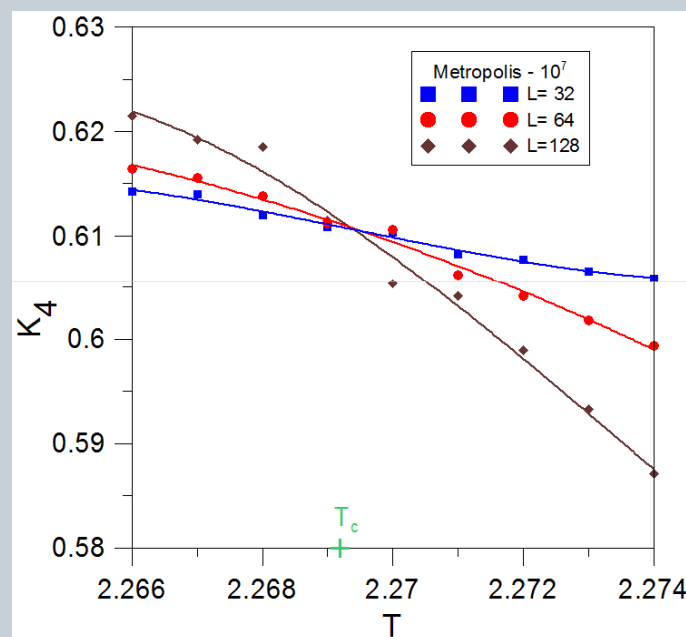
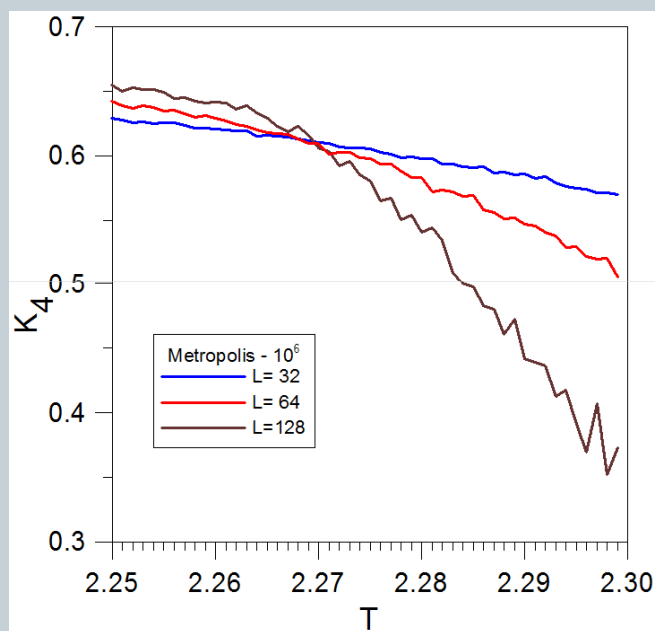
Binder pokazał, że K_4 skończonego układu o rozmiarze L osiąga uniwersalną wartość K_4^* w $T=T_c$

$$K_4(T = T_c, L) = K_4^*$$

Model Isinga – wyniki symulacji



Kumulanty Bindera w pobliżu T_c dla 3 rozmiarów $L=32, 64$ i 128



Widoczne duże błędy statystyczne dla $L=128$ to efekt spowolnienia krytycznego – wada algorytmu Metropolisa. Do wyznaczenia T_c stosuje się algorytmy klastrowe (np. algorytm Wolfa) lub metodę Wanga-Landaua – wolną od spowolnienia krytycznego.

Model Isinga – wyniki symulacji



Wyznaczenie T_c z przecięcia się kumulant Bindera obliczonych metodą Wanga-Landaua.

