WORM

$$\left(\prod_i \sum_{S_i=\pm 1}\right.$$

Ising: etc

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta \sum_{\langle ij\rangle} S_i S_j} = \sum_{\{S_i\}} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!}\left(\sum_b S_i S_j\right)^n}_{\text{SOMA}}$$

bonds (elos) $\equiv b$

SOMA: termos c/ ordem ímpar de bonds só contribuem se for um percurso fechado

$$= 1 + \beta \sum_b \overset{b}{\widehat{S_i S_j}} + \frac{\beta^2}{2} \sum_b \overset{b}{\widehat{S_i S_j}} \sum_{b'} \overset{b'}{\widehat{S_i S_j}} + \dots$$

↳ só sobrevive se $b = b'$

$i \overset{b}{—} j \overset{b'}{—} k$

↳ contribui 0 p/ soma $S_i = \pm 1$, ou $S_k = \pm 1$, idem p/ variável + geral, se for simétrica

⇒ aparecem todos os produtos de bonds, de todas as ordens (i.e. todos os caminhos) SEM REPETIÇÃO, pois bonds são distinguíveis

∴ equivale a (re-ordenando termos)

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \underbrace{\prod_b \left(\sum_{N_b} \frac{\beta^{N_b} \left(\overset{b}{\widehat{S_i S_j}}\right)^{N_b}}{N_b!} \right)}$$

soma de produtos de bonds p/ cada combinação de N_b's como acima

Notando, como dito acima, que só contribuem percursos fechados (i.e. cada spin aparece em # par de bonds)

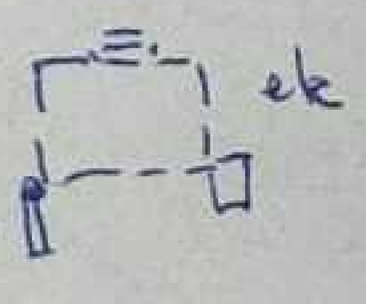
$$\Rightarrow Z = \sum_{CP} W_{CP} \quad \text{onde} \quad W_{CP} = \prod_b \frac{\beta^{N_b}}{N_b!} \prod_i \overbrace{\left(\sum_{S_i = \pm 1} S_i^{\sum N_b \text{ bonds a que } S_i \text{ pertence}} \right)}^{\equiv Q(K_i)}$$

↳ closed paths

including bond #s → soma nos spins está "escondida" em W_{CP}!!

ou $\int_{-\infty}^{\infty} d\phi_i$ etc

→ para cada caminho há um produto nos bonds, com os N_b associados a cada spin, correspondendo aos termos que contribuem p/ a soma em Z



$$Q(k_i) \equiv \sum_{S_i = \pm 1} S_i^{k_i} \qquad k_i = \sum_\nu N_{i,\nu}$$

→ depende do percurso, será par p/ caminho fechado

p/ Ising: Q será sempre $= 2$ //

→ cálculo da f. de 2 ptos segue mesmo raciocínio, MAS: spins escolhidos terão k_i ímpar

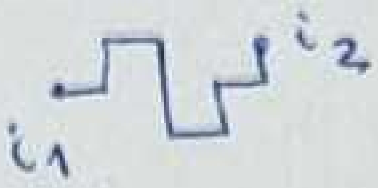
Função de 2 pts

$$G(i_1 - i_2) = \langle S_{i_1} S_{i_2} \rangle = \frac{\sum_{\{S_i\}} S_{i_1} S_{i_2} e^{\beta \sum_b S_i S_j}}{Z} = \frac{\sum_{CP_g} W_{CP_g}}{\sum_{CP} W_{CP}} \quad = g(i_1 - i_2)$$

PBC só dep. de $i_1 - i_2$ (distância)

W_{CP_g} → como acima, mas $k_i = 1 + \sum_\nu N_{i,\nu}$ p/ as pontas

caminhos c/ 2 "pontas"



Note: caminho com $i_1 = i_2$ contribui p/ $g(0)$ e p/ Z → em relação ao caminho contado p/ Z difere por fator $(S_{i_1 = S_2})^2$ a mais em $Q(k_{i_1 = i_2})$ → p/ Ising ñ importa, fator é $= 1$ //

→ Passei de spins p/ minhocas!!

SIMULAÇÃO: vou amostrando caminhos com peso W_{CP_g} e conto p/ $g(i \mid CP_g)$, propondo apenas mudanças em i_1, i_2

Detailed Balance garantido se em transição de C_1 p/ C_2

→ dado C_1 proponho C_2 e aceito ou não por Metropolis

$$\underbrace{P(C_1)}_{\text{pb// de estar em } C_1} \underbrace{P(C_1 \to C_2)} = P(C_2) P(C_2 \to C_1)$$

pb// de ir de C_1 p/ C_2: inclui pb// de propor C_2 e pb// de aceitar a proposta

Situação "padrão":

$i_1 \neq i_2$ antes e depois

propondo shift de i_1 p/ vizinho, de $i \to j$ (pb// $\frac{1}{2d}$), "apagando" ou "adicionando" elo c/ pb// 1/2 e aceito ou não com pb// $P(C_2)/P(C_1)$, i.e. $P(C_1 \to C_2) = \left(\frac{1}{4d}\right) \cdot \min(1, P_2/P_1)$

com P_2/P_1 dado por:

$$W_{CP_g} = \prod_b \frac{\beta^{N_b}}{N_b!} \prod_i Q(k_i) \quad p/\ i_1, i_2\ \ k = \sum_\nu N_{i,\nu} + 1$$

$W(C_2)/W(C_1)$

adicionando

$P(i \to j$ e $N_b \to N_b + 1) =$

j ganha bond $\to S_j^2$ e ponta

i perde ser ponta ∴ k_i ñ muda, mas ganha bond

$$\frac{\beta^{N_b+1}/(N_b+1)!}{\beta^{N_b}/N_b!} \frac{\cancel{Q(k_i)}\, Q(k_j + 2)}{\cancel{Q(k_i)}\, Q(k_j)} = \boxed{\frac{\beta}{N_b + 1} \frac{Q(k_j + 2)}{Q(k_j)}} \ (I)$$

apagando:

$P(i \to j$ e $N_b \to N_b - 1)$

j perde bond mas ganha ponta: k_j ñ muda

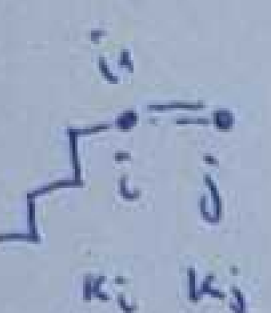
i perde bond e ponta: $k_i \to k_i - 2$

$$\frac{\beta^{N_b - 1}/(N_b - 1)!}{\beta^{N_b}/N_b!} \frac{Q(k_i - 2)\, \cancel{Q(k_j)}}{Q(k_i)\, \cancel{Q(k_j)}} \to$$

$\frac{N_b}{\beta}\,\frac{Q(k_i-2)}{Q(k_i)}$ (II)

Note: parece assimétrico pq ñ posso propor apagar se $N_b=0$ MAS é compensado pelo peso P_2/P_1 já que é zero //

check: ir de C_1 p/ C_2 adicionando shift de $i_1=i$ p/ j :



$$P(C_1\to C_2)=\begin{cases}\frac{1}{4d}\cdot\underbrace{\frac{\beta}{N_b+1}\,\frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)}}_{P_2/P_1}, & P_2/P_1<1\\ \text{ou } 1/4d & \text{se } P_2/P_1>1\end{cases}$$

volta: shift de j p/ i apagando i.e.

L i.e. começando de N_b+1 e trocando $i\leftrightarrow j$ acima

$$P(C_2\to C_1)=\begin{cases}\frac{1}{4d}\cdot\underbrace{\frac{N_b+1}{\beta}\,\frac{Q(k_j+\cancel{2}-\cancel{2})}{Q(k_j+2)}}_{P_1/P_2} & \text{se } P_1/P_2<1\\ \text{ou } \frac{1}{4d} & \text{se } P_1/P_2>1\end{cases}$$

$k_i=k_i$ acima

$k_j=k_j+2$

L acima

i.e. se $\frac{P_2}{P_1}=\frac{\beta}{N_b+1}\,\frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)}<1$ (valores do C_1) tenho $P(C_1\to C_2)=\frac{1}{4d}\cdot\frac{\beta}{N_b+1}\frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)}$, $P(C_2\to C_1)=\frac{1}{4d}$

se não: $P(C_1\to C_2)=1/4d$

$P(C_2\to C_1)=\frac{1}{4d}\cdot\frac{N_b+1}{\beta}\,\frac{Q(k_j)}{Q(k_j+2)}$

nos dois casos:

$$\frac{P(C_1\to C_2)}{P(C_2\to C_1)}=\frac{P_2}{P_1}=\frac{P(C_2)}{P(C_1)}\ //$$

→ claramente vale p/ ir de $i\to j$ apagando e voltar adicionando (só inverter $i\leftrightarrow j$)

Situação especial: início ou final (ou ambos — já tratado acima) dado por $i_1=i_2$

ir de $i_1=i_2=i$ p/ $i_1=i_2=j$ → proponho c/ pbl P_0 ($\cdot\,1/V$ de ser escolhido j) aceito c/ $\frac{P_2}{P_1}=\frac{Q(k_i-2)Q(k_j-2)}{Q(k_i)Q(k_j)}$

i tem 2 pts → j tem 2 pts

i perde 2, j ganha 2

$P(C_1\to C_2)=\frac{P_0}{V}\,\underbrace{(P_2/P_1)}_{\min(1,P_2/P_1)}$

→ volta é simétrica: "pular" de j p/ i $P(C_2\to C_1)=\frac{P_0}{V}\underbrace{\left(\frac{P_1}{P_2}\right)}_{\min(1,P_1/P_2)}$

ok como acima ✓

pbl de propor shift: $P_1=1-P_0$

início $i_1=i_2=i$ final $\overset{i}{\bullet}\!\!-\!\!\overset{j}{\bullet}$ (i_2, i_1)

$P(C_1\to C_2)=\underbrace{P_1\cdot\frac{1}{2d}}\cdot\left(\frac{P_2}{P_1}\right)$ — I ou II acima, $\min(1,P_2/P_1)$ $\times\frac{1}{2}$?

* artigo diz $\frac{1}{2P_1}$

volta: $\overset{i}{\bullet}\leftarrow\overset{j}{\bullet}$ (i_2, i_1) final $\bullet\bullet$ $i_1=i_2=i$

$P(C_2\to C_1)=\frac{1}{2d}\cdot\frac{1}{2}\left(\frac{P_1}{P_2}\right)$ — I ou II acima, $\min(1,P_1/P_2)$

PRECISO "corrigir" P_2/P_1 p/ absorver P_1: multiplico por $\boxed{\text{fator } \frac{1}{P_1}}$ no 1º caso e P_1 no 2º

$$\Rightarrow P_{1\to2}=\frac{P_1}{4d}\min\left(1,\frac{P(2)}{P(1)}\cdot\frac{1}{P_1}\right)^{\alpha},\ P_{2\to1}=\frac{1}{4d}\min\left(1,\frac{P(1)}{P(2)}\cdot P_1\right)\Rightarrow$$

se $\alpha>1$ $P_{1\to2}=P_1/4d$, $P_{2\to1}=\frac{P_1}{4d}\cdot\frac{P(1)}{P(2)}$ ✓ etc

⇒ Na verdade, ñ processo de P_0, P_1 → proponho sempre "pular" se $i_1 = i_2$ e logo em seguida fazer shift; balanço det. vale p/ pulo e p/ shift separadamente, 2 tipos de update (ok)

CASO do Mod. de Ising:

Note que $e^{\beta s_i s_j} = \cosh\beta \,(1 + th\beta \cdot \overset{\frown}{s_i s_j})$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_b \cosh\beta\,(1 + th\beta\, \overset{b}{\overset{\frown}{s_i s_j}})$$

→ só contribuem caminhos fechados, e agora Nb é "no máximo" = 1
de qq forma, todas as somas $\sum_{S_i = \pm 1}$ dão contrib. = 2

$$= (\cosh\beta)^{Vd} \cdot 2^V \sum_{CP} W_{CP} \quad , \quad W_{CP} = \prod_b th\beta$$

ou: $\sum_{CP} \prod_b (th\beta)^{Nb}$ — contando $N_b = 0$ p/ bond vazio e $N_b = 1$ p/ elos do CP

Algoritmo:
- se $i_1 = i_2$ "pulo" p/ novo sítio → equilibrado, aceito sempre
- movo i_1 na direção b, se $\left[\begin{array}{l} N_b = 0 \to N_b = 1 \\ N_b = 1 \to N_b = 0 \end{array}\right]$ → como acima mas simplificado

peso P_2/P_1 p/ $\left[\begin{array}{l} N_b\ 0 \to 1 = \min(1, th\beta) \\ N_b\ 1 \to 0 = \min(1, (th\beta)^{-1}) \end{array}\right.$

Dessa forma: $$G(\underbrace{i_1 - i_2}_{i}) = \frac{\overbrace{\sum_{CP_g} W_{CP_g}}^{\approx g(i)}}{\sum_{CP} W_{CP}} \cdot Z$$

tenho como amostrar numerador $g(i)$ e denominador Z
MAS ñ é verdade que peso de CP_g é W_{CP_g}/Z (!)
pois soma é sobre caminhos diferentes (!)

Ising: fator $(\cosh\beta)^{Vd}\, 2^V$ cancela

⇒ estimo os 2 separadamente e divido → calculo erros separados (??)