Exercicio 32 c)

Seja $\{n_{\vec{k}}\}$ a especificação do número de partículas com vetor de onda $\vec{k}$ para todos os valores de $\vec{k}$ possíveis

Para um gás quântico, as partículas são indistinguiveis, e $\{n_{\vec{k}}\}$ representa um só estado microscópico do sistema. A probabilidade deste estado no ensemble canónico é

$$p_{st}(\{n_{\vec{k}}\}) = \frac{\exp(-\beta E)}{Z} \quad \text{com} \quad E = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}\, n_{\vec{k}}$$

Para gerar realizações da variável aleatória $\{n_{\vec{k}}\}$ com a distribuição de probabilidade pretendida usamos o Algoritmo de Metropolis Genérico considerando x= $\{n_{\vec{k}}\}$

Algoritmo de Metropolis genérico

- Se pretendermos construir uma cadeia de Markov que tem como distribuição estacionária, a densidade de probabilidade, $p_{st}(x)$, então podemos usar o algoritmo:
  - perturbamos o estado x, propondo x' com probabilidade $Q(x'|x)$. A perturbação deve ser pequena de modo a que a probabilidade média de aceitar o novo estado seja próxima de 0.5.
  - aceitamos o novo estado com probabilidade, $p_A = \min\left(1, \frac{Q(x|x')p_{st}(x')}{Q(x'|x)p_{st}(x)}\right)$

Algoritmo de Metropolis genérico

- se o novo estado for recusado o novo estado é igual ao anterior, caso contrário o estado é atualizado para x'.
- repetimos o procedimento um número de passos suficiente para que o sistem perca memória do estado inicial.
- A probabilidade de transição vem dada por $w(x \to x') = Q(x'|x)\min\left(1, \frac{Q(x|x')p_{st}(x')}{Q(x'|x)p_{st}(x)}\right)$
- O equilíbrio detalhado é obedecido:
  - se $\frac{Q(x|x')p_{st}(x')}{Q(x'|x)p_{st}(x)} < 1$ então $p_{st}(x)w(x \to x') = Q(x|x')p_{st}(x') = w(x' \to x)p_{st}(x')$
  - se $\frac{Q(x|x')p_{st}(x')}{Q(x'|x)p_{st}(x)} > 1$ então $p_{st}(x)w(x \to x') = p_{st}(x)Q(x'|x) = Q(x|x')\frac{Q(x'|x)p_{st}(x)}{Q(x|x')p_{st}(x')}p_{st}(x') = w(x' \to x)p_{st}(x')$
- os estado gerados em regime estacionário têm a densidade de probabilidade pretendida.

Se usarmos o Algoritmo 2 em baixo

Algoritmo 2

1. Começar com um estado arbitrário do sistema com N partículas. Por exemplo todas as partículas no estado fundamental.
2. Manter uma lista do estado ocupado por cada uma das N partículas e do número de partículas no estado $\vec{k}$, $n_{\vec{k}}$.
3. Atualizar o estado do sistema repetidamente deixando equilibrar
   - escolher ao acaso uma partícula e mover a partícula do estado $\vec{k}$ para ~~acaso~~ um estado vizinho $\vec{k}_v$ ao acaso
   - calcular a variação de energia, dE correspondente a mover um partícula para o novo estado
   - aceitar a mudança de estado da partícula de $\vec{k}$ para $\vec{k}_v$ com probabilidade p_A, $p_A = \min\left(1, \frac{nv(\vec{k})\left(n_{\vec{k}_v}+1\right)}{nv(\vec{k}_v)n_{\vec{k}}} \exp(-\beta dE)\right)$

temos $x=\{n_{\vec{k}}\} = \{\cdots n_{\vec{k}}, n_{\vec{k}_v}, \cdots\}$ e $x'=\{n'_{\vec{k}}\} = \{\cdots n_{\vec{k}}-1, n_{\vec{k}_v}+1, \cdots\}$

dado que uma perturbação do sistema consiste em retirar uma partícula de $\vec{k}$ e coloca-la em $\vec{k}_v$

Como $Q(x'/x)$ = probabilidade de propor x' dado x é igual ao produto da probabilidade de escolher um k pela probabilidade de escolher um vizinho desse k

A probabilidade de escolher um k escolhendo uma particula ao acaso é $n_{\vec{k}}/N$

A probabilidade de escolher um vizinho ao acaso é $\frac{1}{n_v(\vec{k})}$ onde

$n_v(\vec{k})$ 0 número de vizinhos de um k

ou seja $Q(x'/x) = Q\left(n_{\vec{k}_v}+1, n_{\vec{k}}-1 \mid n_{\vec{k}_v}, n_{\vec{k}}\right) = \frac{n_{\vec{k}}}{N n_v(\vec{k})}$

A transição inversa tem uma probabilidade de ser proposta

$$Q(x/x') = Q\left(n_{\vec{k}_v}, n_{\vec{k}} \mid n_{\vec{k}_v}+1, n_{\vec{k}}-1\right) = \frac{n_{\vec{k}_v}+1}{N n_v(\vec{k}_v)}$$

Como $\frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)} = \frac{e^{-\beta E'}}{e^{-\beta E}} = \exp(-\beta dE)$ com $dE = E' - E$

Portanto a probabilidade de aceitar vem dada por

$$p_A = \min\left(1, \frac{Q(x|x')\ P_{st}(x')}{Q(x|x')\ P_{st}(x)}\right) = \min\left(1, \frac{(n_{\vec{k}_v}+1)\ n_v(\vec{k})}{n_v(\vec{k}_v)\ n_{\vec{k}}} e^{-\beta dE}\right)$$

Num gás clássico, as partículas são distinguiveis, e $\{n_{\vec{k}}\}$ corresponde a vários estados microscópicos do sistema. A probabilidade no ensemble canónico é

$$P_{st}(\{n_{\vec{k}}\}) = \frac{\exp(-\beta E)}{Z} \frac{N!}{\prod_{\vec{k}} n_{\vec{k}}!}$$

porque se trocarmos, entre si, as particulas que se encontram em estados $\vec{k}$ diferentes geramos um outro estado microscópico com o mesmo valor das variáveis $\{n_{\vec{k}}\}$.

$N!$ é o número de permutações das N partículas e $n_{\vec{k}}!$ é o número de permutações de partículas com o mesmo $\vec{k}$ que não podemos contabilizar como gerando um estado microscópico diferente.

Para simular este sistema no exercicio 32 c) usamos o mesmo algoritmo de proposta de estado $\vec{k}$ a ser perturbado e portanto temos a mesma probabilidade de proposta

$$Q(x'/x) = Q(n_{\vec{k}_v}+1, n_{\vec{k}}-1 \mid n_{\vec{k}_v}, n_{\vec{k}}) = \frac{n_{\vec{k}}}{N n_v(\vec{k})}$$

Como a distribuição de probabilidade estacionária é agora diferente temos:

$$\frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)} = \frac{N! \, e^{-\beta E'}}{\cdots(n_{\vec{k}_v}+1)!\,(n_{\vec{k}}-1)!\cdots} \frac{n_{\vec{k}}! \, n_{\vec{k}_v}!}{e^{-\beta E} \, N!} = \frac{n_{\vec{k}}}{n_{\vec{k}_v}+1} \exp(-\beta \, dE)$$

Portanto a probabilidade de aceitar vem dada por

$$P_A = \min\left(1, \frac{Q(x|x')}{Q(x|x')} \frac{P_{st}(x')}{P_{st}(x)}\right) = \min\left(1, \frac{n_v(\vec{k})}{n_v(\vec{k}_v)} e^{-\beta dE}\right)$$