Спиновые модели и локальные алгоритмы моделирования Монте-Карло

Евгений Буровский, ДПМ


В. Янке М.С. Гуськова Л.Н. Щур

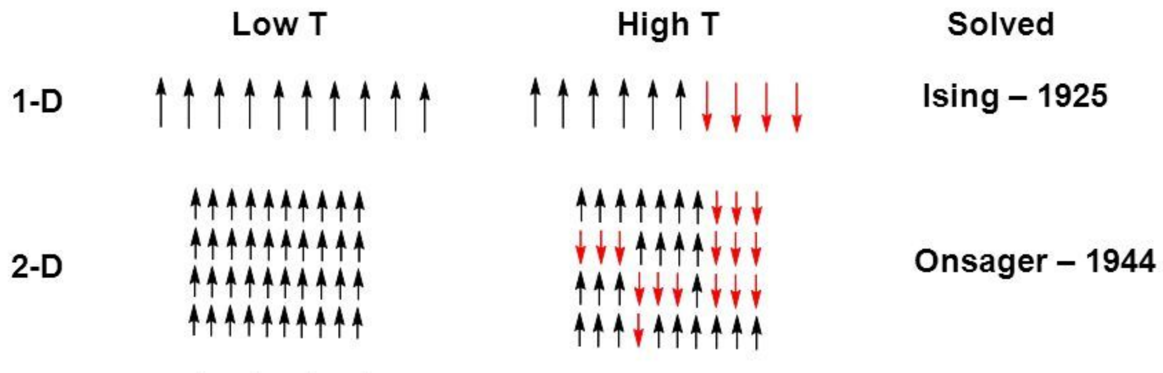
arXiv:1907.06776

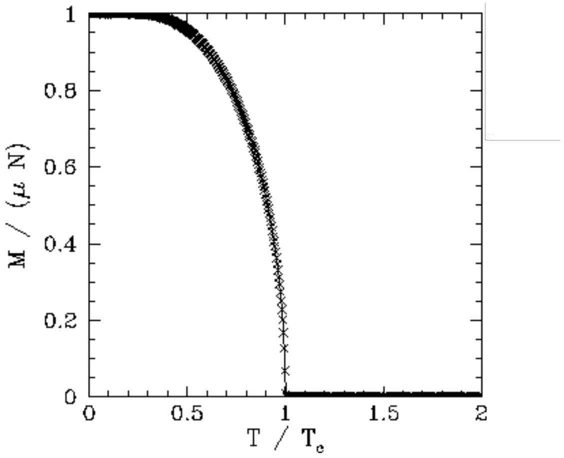
МИЭМ, 23.07.2019

Модель Изинга

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

$$Z = \sum_{\{s_k\}} e^{-\beta E(\{s_k\})}$$





Методы Монте-Карло

J Chem Phys 21, 1087 (1953)

Equation of State Calculations by Fast Computing Machines

NICHOLAS METROPOLIS, ARIANNA W. ROSENBLUTH, MARSHALL N. ROSENBLUTH, AND AUGUSTA H. TELLER,
Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico

AND

EDWARD TELLER,* *Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois*

(Received March 6, 1953)

A general method, suitable for fast computing machines, for investigating such properties as equations of state for substances consisting of interacting individual molecules is described. The method consists of a modified Monte Carlo integration over configuration space. Results for the two-dimensional rigid-sphere system have been obtained on the Los Alamos MANIAC and are presented here. These results are compared to the free volume equation of state and to a four-term virial coefficient expansion.

I. INTRODUCTION

THE purpose of this paper is to describe a general method, suitable for fast electronic computing machines, of calculating the properties of any substance which may be considered as composed of interacting individual molecules. Classical statistics is assumed,

II. THE GENERAL METHOD FOR AN ARBITRARY POTENTIAL BETWEEN THE PARTICLES

In order to reduce the problem to a feasible size for numerical work, we can, of course, consider only a finite number of particles. This number N may be as high as several hundred. Our system consists of a square† con-

Методы Монте-Карло

Марковский процесс в пространстве спиновых конфигураций,

$$\cdots \to \mu \to \nu \to \cdots$$

с равновесным распределением $W_\nu \propto e^{-\beta E_\nu}$

$$\boxed{\frac{\sum\limits_{\nu} A_\nu\, W_\nu}{\sum\limits_{\nu} W_\nu} \longleftarrow \frac{\sum\limits_{\nu_{\mathrm{MC}}} A_\nu}{\sum\limits_{\nu_{\mathrm{MC}}} 1}}$$

Методы Монте-Карло

Марковский процесс: эргодичность + детальный баланс

Элементарный шаг: предложить переход + принять переход

Схема Метрополиса: $$p(\mu \to \nu) = \min(1, e^{-\beta \Delta E})$$

Тепловая баня: $$p(\mu \to \nu) = \frac{e^{-\beta E_\nu}}{e^{-\beta E_\nu} + e^{-\beta E_\mu}}$$

Элементарные переходы

Эффективность:

- Вычислительная сложность
- Средняя вероятность принять переход
- Автокорреляционные времена процесса

Элементарные переходы

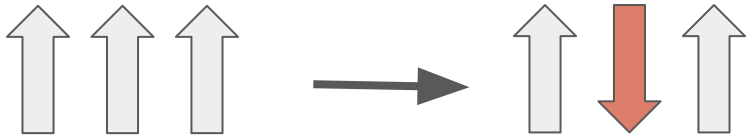
Эффективность:

- Вычислительная сложность
- ***Средняя вероятность принять переход***
- Автокорреляционные времена процесса

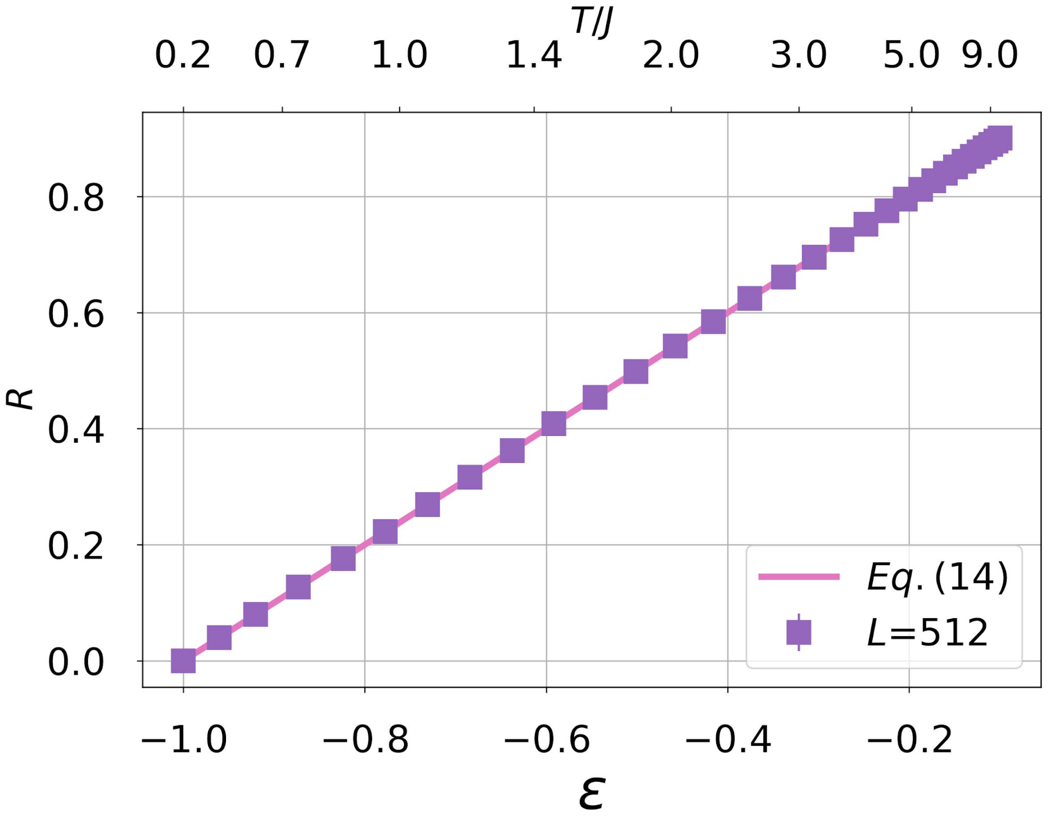
Ожидаемая вероятность перехода

Для фиксированной схемы моделирования, средняя вероятность принять переход является некоторой определенной функцией температуры.

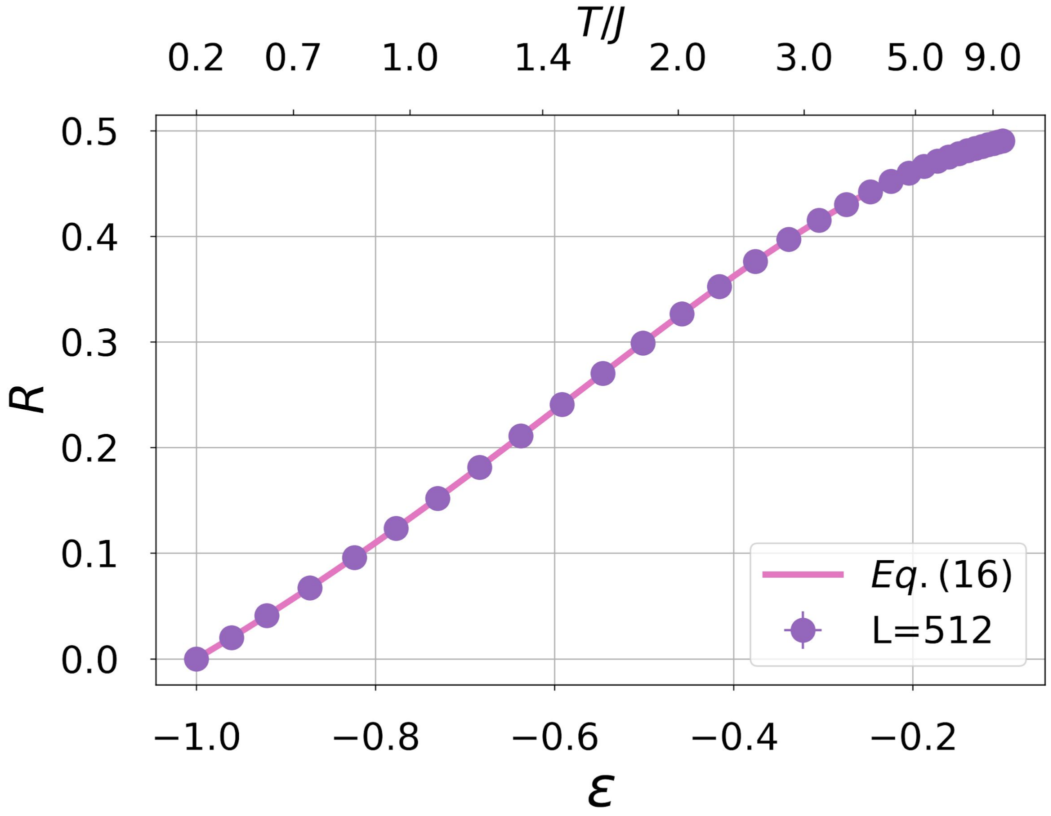
Локальные схемы: переворот одного спина



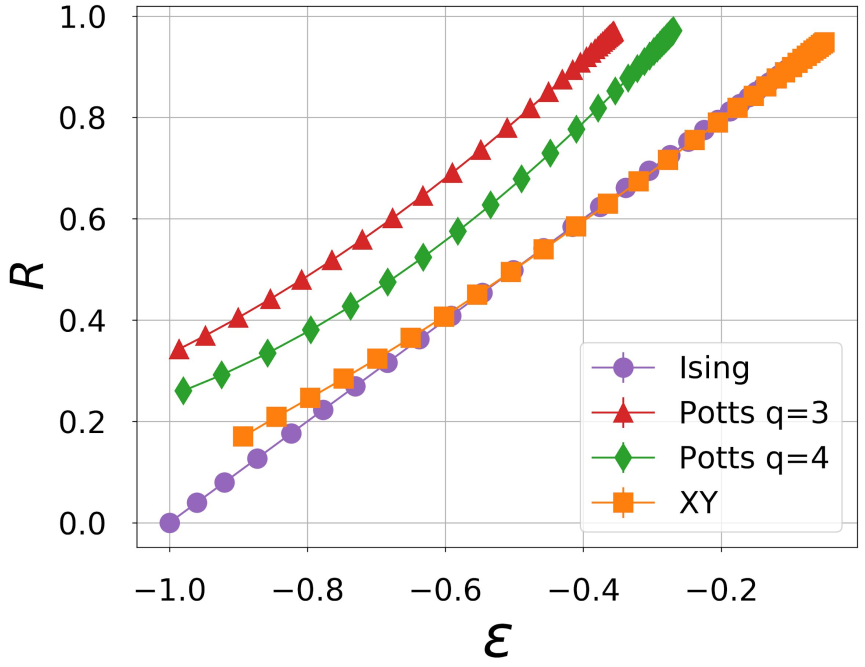
Одномерная модель Изинга : схема Метрополиса

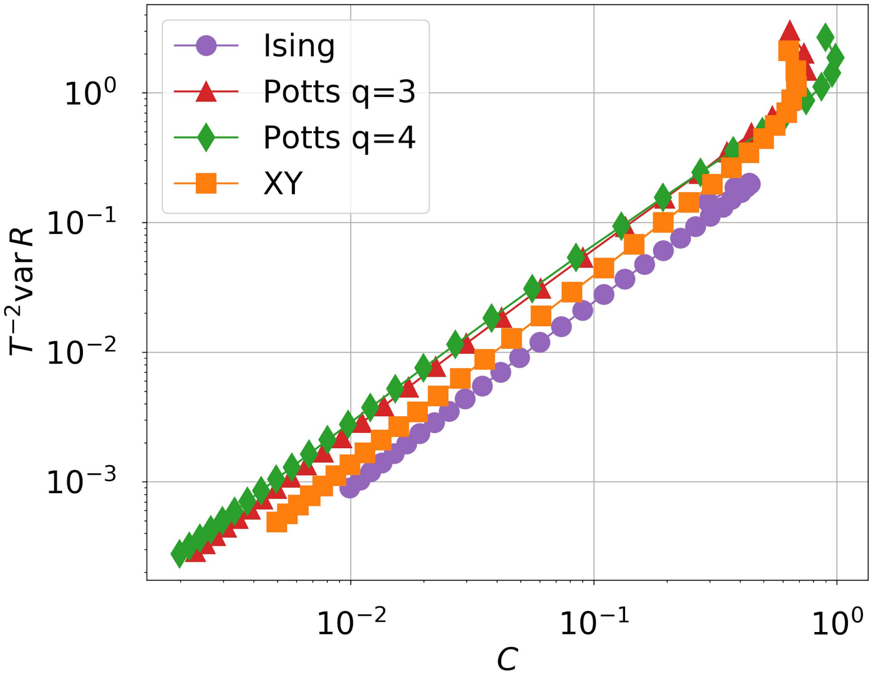


Одномерная модель Изинга : схема тепловой бани

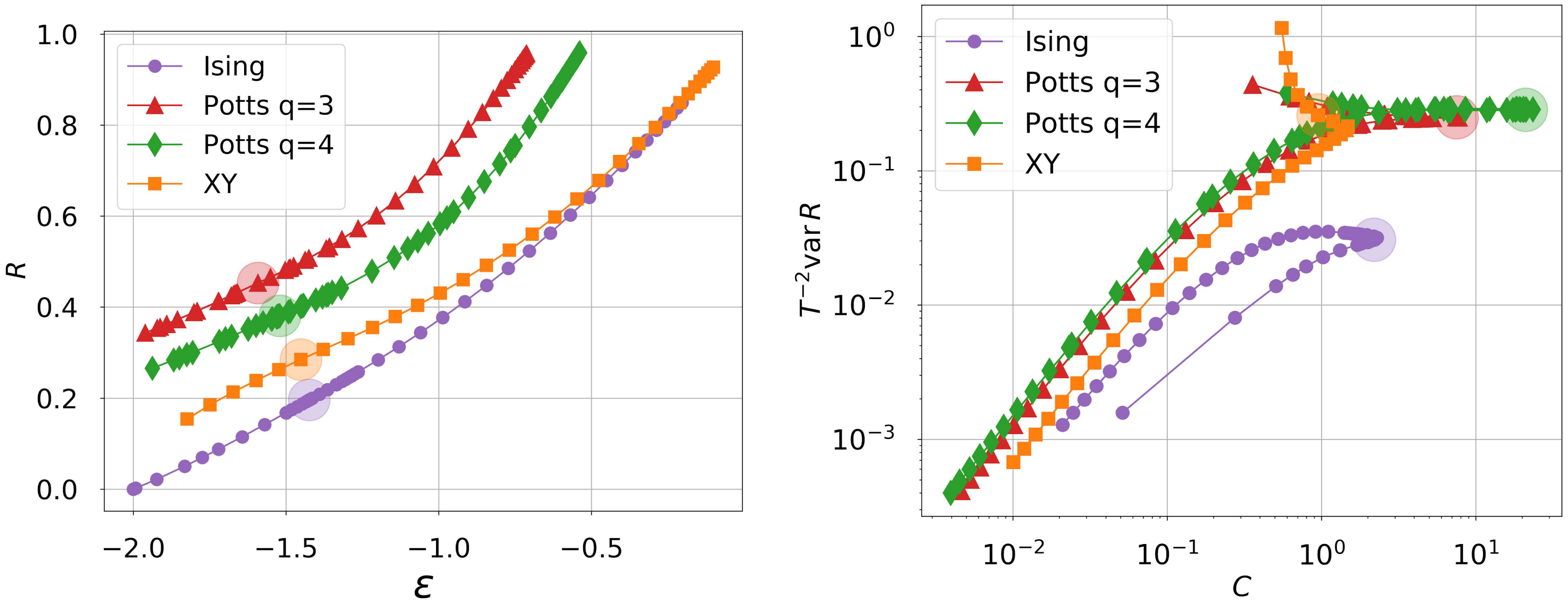


Одномерные модели : схема Метрополиса





Двумерные модели : схема Метрополиса



- Для фиксированной схемы моделирования Монте-Карло, вероятность принятия перехода является термодинамической величиной.
- Для одномерной модели Изинга, вероятность принятия перехода в схеме Метрополиса является линейной функцией энергии.
- Для двумерных моделей, вероятность принятия перехода является линейной функцией энергии в критической области.

Одномерная модель Изинга

Введем “заряды” связанные с ребрами решетки $Q_i = \frac{1}{2}(S_i S_{i+1} + 1)$

$$H = -2J \sum_{i=1}^{L} Q_i + JL$$

Для четного числа ребер, сумма $\sum_{i=1}^{L} Q_i$ четная.

$$Z = 2x^{-L/2} \sum_{l=0}^{L/2} C_L^{2l} x^{2l} \qquad x \equiv e^{2\beta J}$$

Одномерная модель Изинга

$$Z = 2x^{-L/2}\sum_{l=0}^{L/2} C_L^{2l} x^{2l}$$

$$x \equiv e^{2\beta J}$$

S = 1, 1 или -1, -1

2l “черных шаров” (*Q=1*) по *L* ящикам

$$Z = x^{-L/2}\left[(x+1)^L + (x-1)^L\right]$$

Одномерная модель Изинга

$$Q \equiv Q_i + Q_{i-1}$$

Q = 1, 0 : переход принимается с вероятностью единица

Q = 2 : переход принимается с вероятностью x^{-2}

$$1 - R = \sum_{l=0}^{L/2} \left(1 - x^{-2}\right) \frac{2l}{L} \frac{2l-1}{L-1} \frac{C_L^{2l} x^{2l} 2x^{-L/2}}{Z}$$

$$Q_i = Q_j = 1$$

Одномерная модель Изинга

$$Q \equiv Q_i + Q_{i-1}$$

Q = 1, 0 : переход принимается с вероятностью единица

Q = 2 : переход принимается с вероятностью x^{-2}

$$1 - R = \sum_{l=0}^{L/2} \left(1 - x^{-2}\right) \frac{2l}{L} \frac{2l-1}{L-1} \frac{C_L^{2l} x^{2l} 2x^{-L/2}}{Z}$$

$$Q_i = Q_j = 1$$