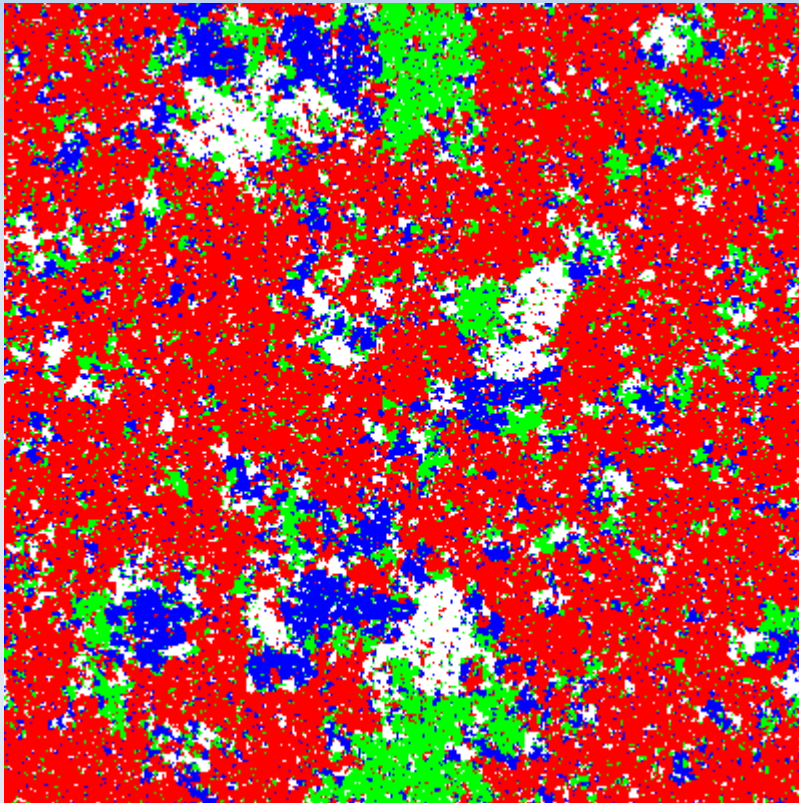


Μετάβαση φάσης 1ης τάξης Η Πολυκανονική Μέθοδος



4-state Potts

Νικολακόπουλος Ηλίας

*Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και
Φυσικών Επιστημών*

Ιούλιος 2010

ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΕΣ ΣΥΛΛΟΓΕΣ (ensembles)

Στατιστική συλλογή:

νοητό σύνολο πανομοιότυπων συστημάτων

▶ στατική δομή ▶ δεν προσομοιώνεται !

Λύση: αλυσίδα Markov

▶ δυναμική δομή ▶ χρονοσειρά καταστάσεων

⇒ *ισοδύναμος υπολογισμός μέσης τιμής.*

- Μικροκανονική συλλογή
- Κανονική συλλογή $w_B^k = e^{-\beta E^k}$, $P(E) = c_B n(E) e^{-\beta E}$
- Μεγαλοκανονική συλλογή
- Πολυκανονική συλλογή (ή γενικευμένη)

q-state Potts model

Συνάρτηση ενέργειας στο γενικευμένο Potts:

$$-\beta E^k = -\beta E_0^k + HM^k = \left(-2 \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(q_i, q_j) \delta(q_i, q_j) + \frac{2dN}{q} \right) + \left(2 \sum_{i=1}^N \delta(1, q_i) \right)$$

↙
↘

Μαγνήτιση Potts ως προς q_0 :

$$M_{q_0} = \langle \delta_{q_i, q_{q_0}} \rangle$$

$$|M| = J - \frac{N-J}{q-1} = \frac{qJ - N}{q-1}$$

Παράμετρος τάξης!

Metropolis updating:

- Τυχαία επιλογή πλεγματικής θέσης, πιθανότητα: $1/N$
- Επιλογή q-state: $1, \dots, q$, με πιθανότητα $1/q$

Αποδοχή με:

$$p^a(k', k) = \min \left(1, \frac{w(k')}{w(k)} \right)$$

Μετάβαση φάσης 1ης τάξης και μια συνήθης μέτρηση: f^S

- $\beta < \beta_c$: καθαρή φάση 1
- $\beta > \beta_c$: καθαρή φάση 2
- $\beta \sim \beta_c$: μικτή φάση

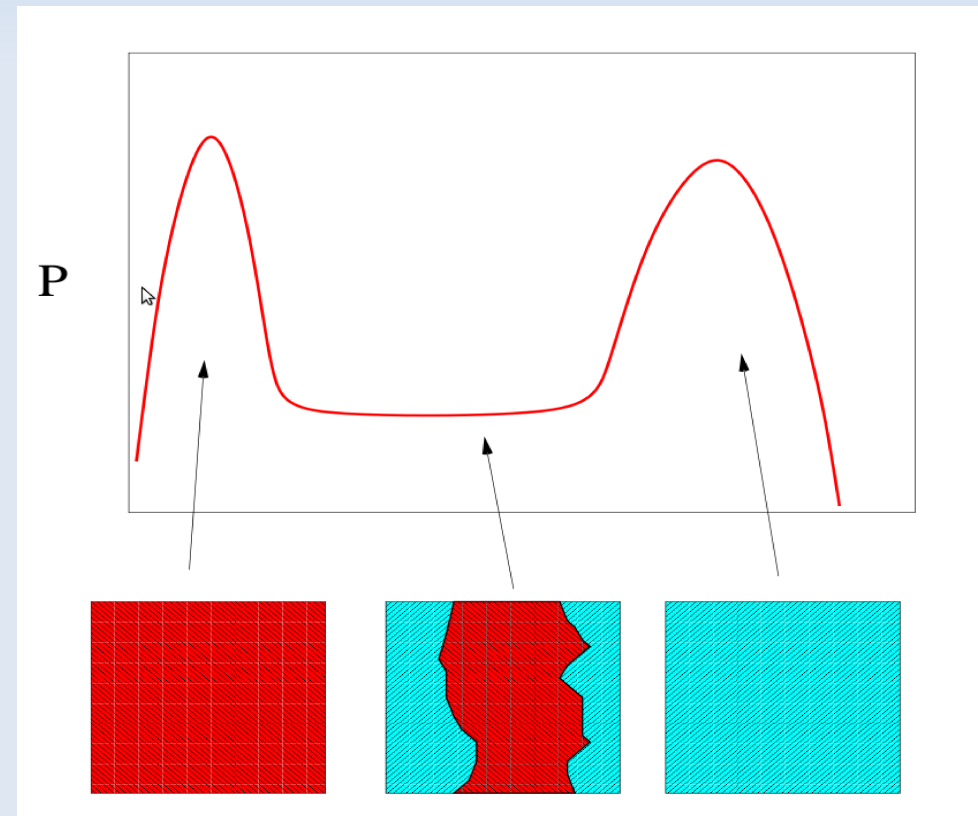
αποτελούνται και από τις 2 καθαρές φάσεις!

- Η επιφάνεια φέρει ελεύθερη ενέργεια

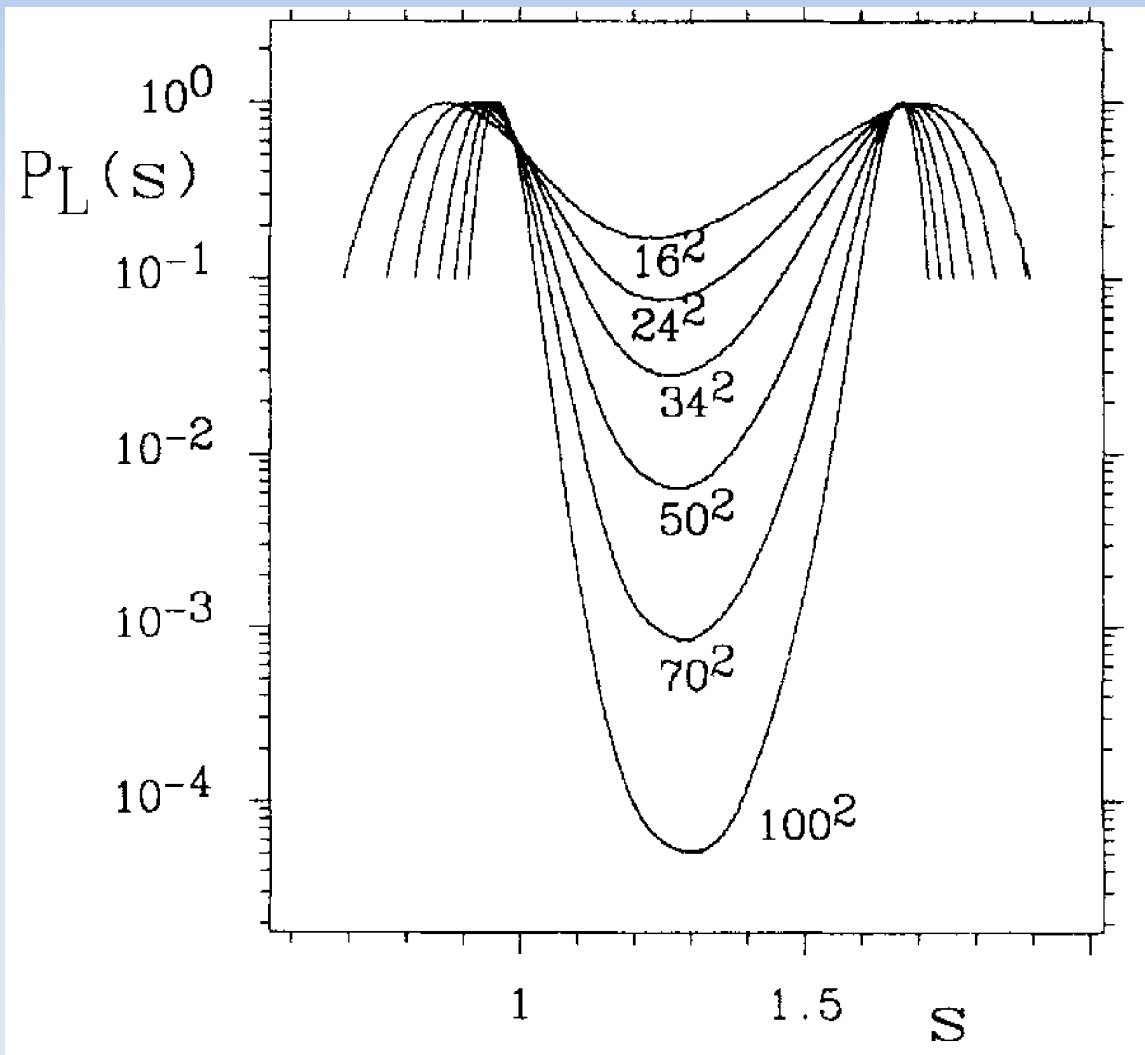
$f_A = f^S A$, $A=2L$ για $2d$ πλέγμα.

$$P_{\min} / P_{\max} \sim \exp(f^S A)$$

Διάγραμμα καθαρών και μικτών φάσεων.
[Kari Rummukainen, Lecture Notes]



10-state Potts

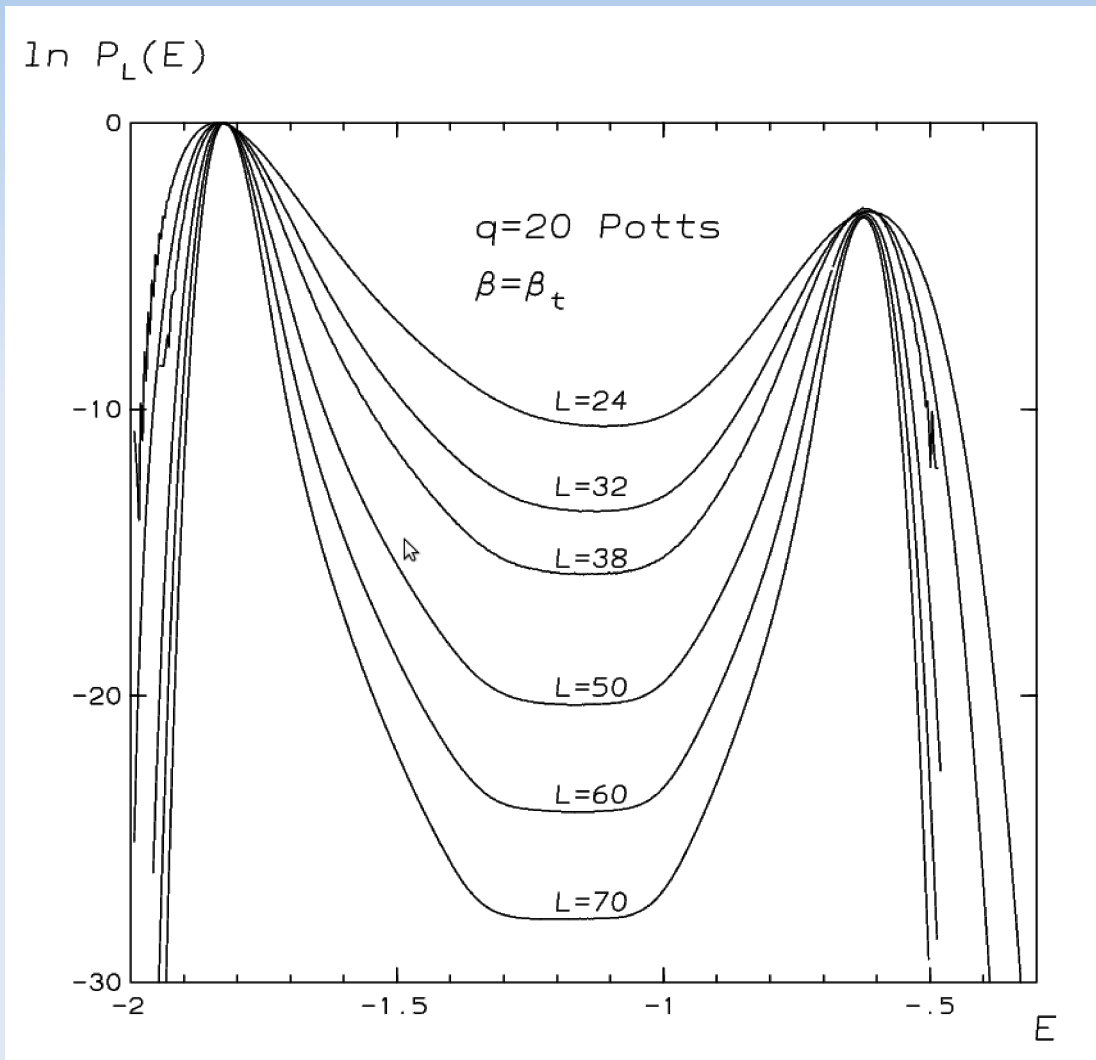


[B.A.Berg, T.Neuhaus
(1991)]

10-state Potts

- $\beta_c \approx 0.71$
- Δομή διπλής κορυφής
- Χάσμα $\sim L$
- Υσουψείς κορυφές
 - ▶ μέτρηση f^S ?

20-state Potts



[A.Billoire, T.Neuhaus, B.A.Berg (1993)]

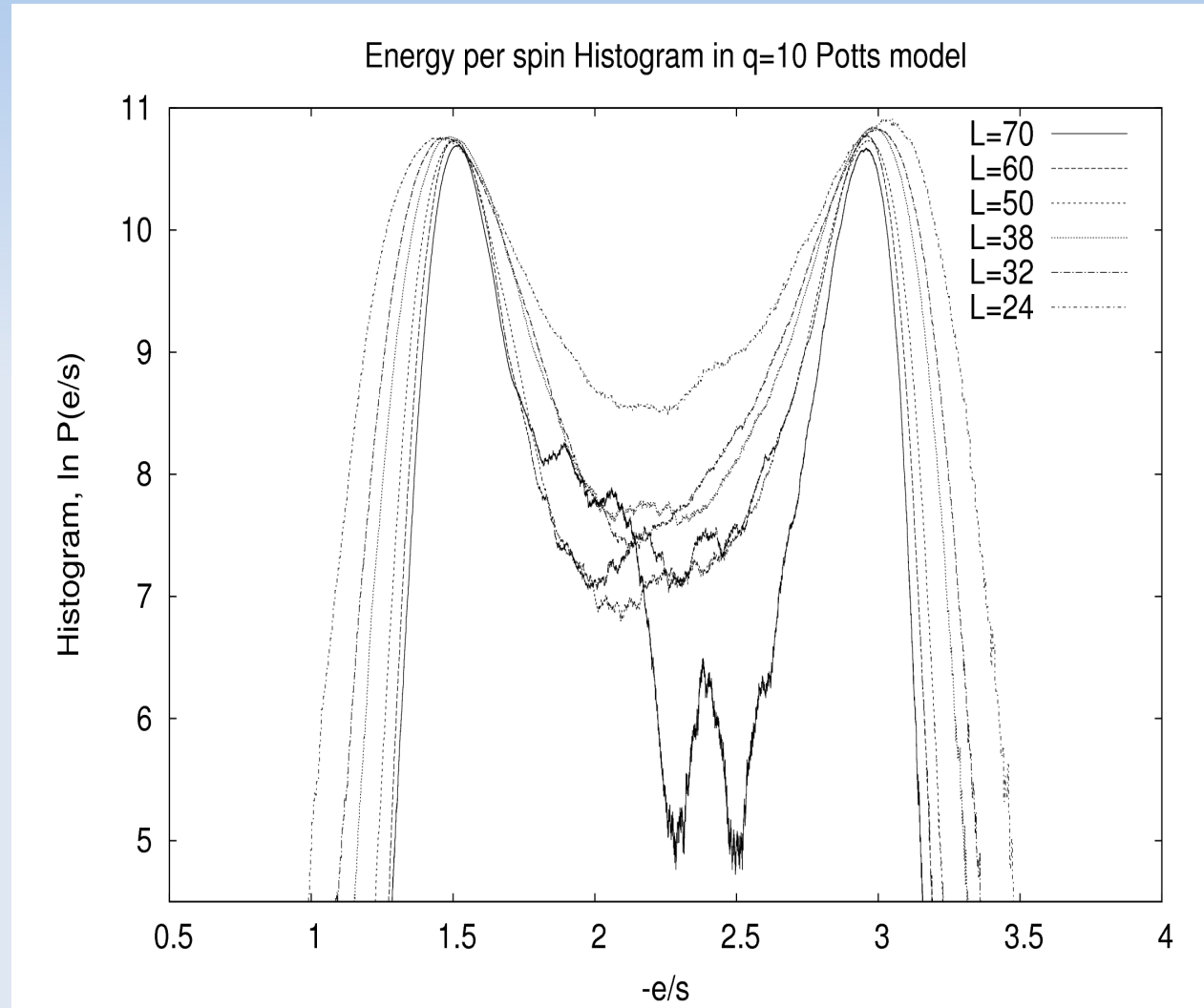
- $\beta_c^{ps} \approx 0.85$
- Δομή διπλής κορυφής
- Όχι ισουψείς κορυφές
Αναζύγιση στη β_c
- ▶ Μέτρηση f^s ?
- Plateau $\sim L$
Μήπως εξυπηρετεί
- Ενίσχυση με επιμήκυνση
μιας διάστασης πλέγματος

[B.Grossmann, M.L. Laursen
(1993)]

Ανεπαρκή sweeps

Πρακτικά

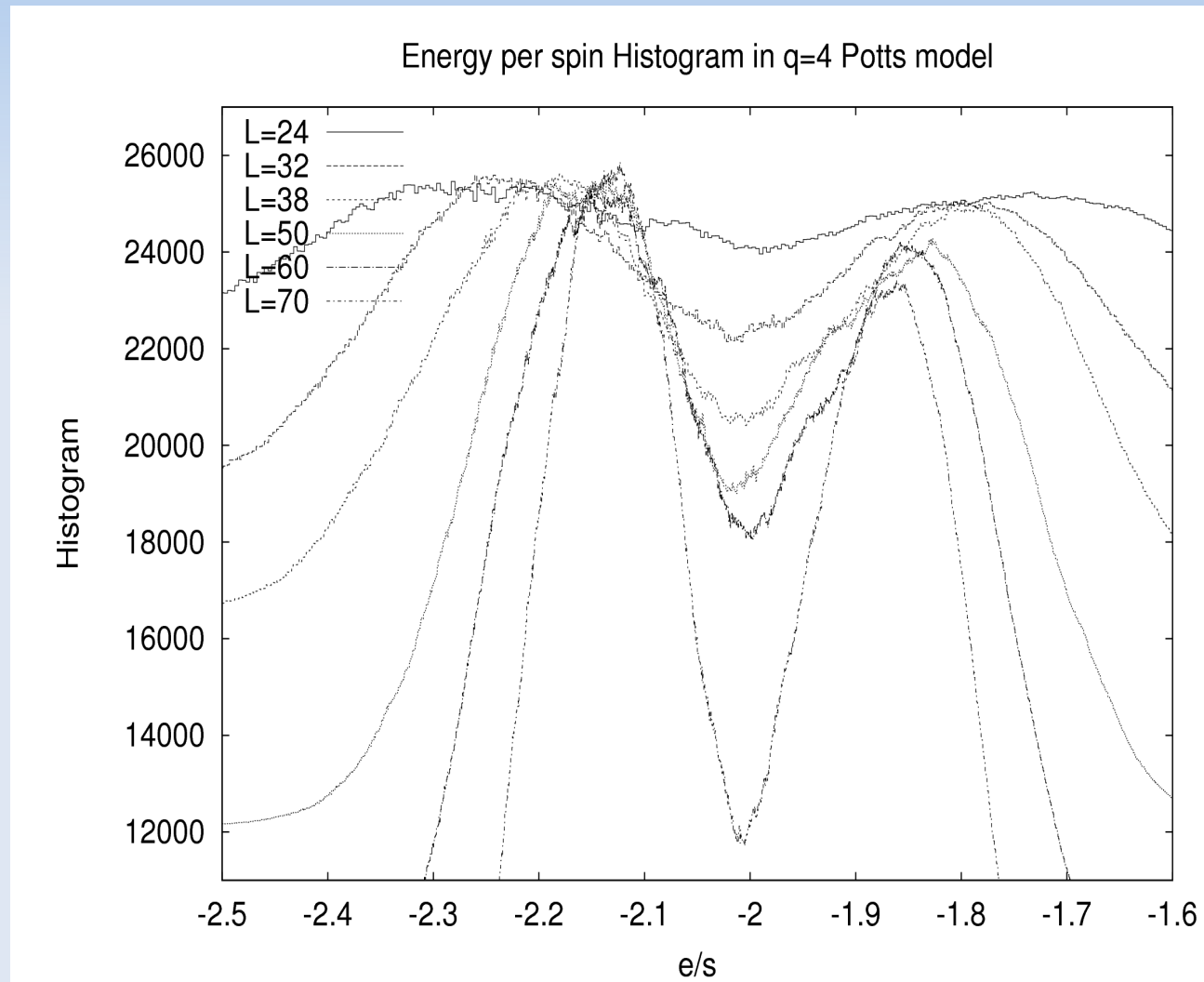
- $L=70$, ~ 10 h
 - ▶ "Ακριβός" τρόπος εκτίμησης μετάβασης.
- Ισχυρή καταπίεση
- Ανεπαρκής στατιστική ακόμα και για $L=24$



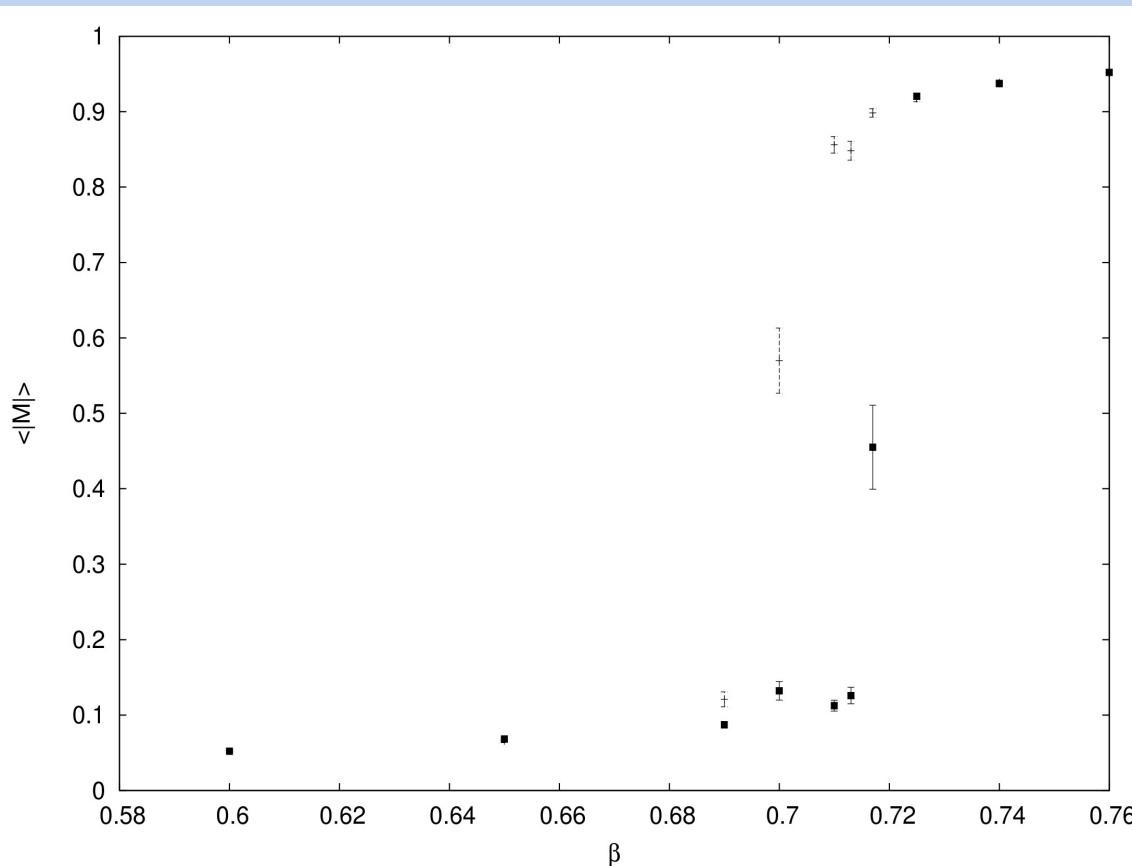
Και μια... παρεξήγηση

4-state Potts

- $q \leq 4$
Μετάβαση 2ης τάξης
- $q > 4$
Μετάβαση 1ης τάξης
- Στο σχήμα:
ψευδομετάβαση 1ης τάξης
- Χρειάζεται μεγάλο L για να αποφανθούμε



Μια απλούστερη εκτίμηση: Βρόχοι υστέρησης



2d 10-state Potts σε $L=20 \times 20$
100 equilibration sweeps + 32x100 sweeps
μετρήσεων.

- $\beta \approx \beta_c + \text{λίγα sweeps} !$
Η κάθε διαδρομή "καθυστερεί" λόγω της αντίστοιχης κορυφής στο $P(M)$.
- Ύπαρξη βρόχου
→ μετάβαση φάσης
- Περισσότερα sweeps
→ σμίκρυνση βρόχου
- Χρήσιμη μέθοδος για χαμηλή υπολογιστική ισχύ!

Υπερκρίσιμη καθυστέρηση (Supercritical slowing down)

$$P(E_{\min}) \sim L^d \exp(-f^s A)$$



Πρέπει να ενισχύσουμε τις ενδιάμεσες καταστάσεις!

Βασική λειτουργία της Πολυκανονικής Μεθόδου
στη μελέτη μεταβάσεων φάσης 1ης τάξης.

Γενική ιδέα:

Τροποποίηση των βαρών έτσι ώστε να ανακόπτουν
την ισχυρή εξάρτηση της $P(E)$ από την E .



Το σύστημα επισκέπτεται όλες τις καταστάσεις με
περίπου ίση πιθανότητα

Η Πολυκανονική Μέθοδος (Multicanonical Method)

Βάρη Boltzmann: $w_B(E^k) = e^{-\beta E(k)}$

Κατανομή: $P(E) = c_B w_B(E) = c_B n(E) e^{-\beta E}$

$n(E)$: φασματική πυκνότητα καταστάσεων

► Πρέπει να απαλοφεί ◀



Χρειαζόμαστε βάρη που συμπεριφέρονται σαν: $1/n(E)$

Πολυκανονική προσέγγιση

$w_{\mu}(E^k) = \exp(-b(E^k)E^k + \alpha(E^k))$, b, α : παράμετροι

Κατανομή: $P_{\mu}(E) = c_{\mu} n(E) w_{\mu}(E) \approx c_{\mu}$

Η αναδρομή για τα βάρη

- Τα βάρη $1/n(E)$ δεν είναι a-priori γνωστά
- Αναδρομική προσέγγιση μέσω των $\alpha(E)$, $b(E)$

$$w(k) = e^{-S(E^k)} = e^{-b(E^k)E^k + \alpha(E^k)}$$

$$b(E) = \frac{1}{T(E)} = \frac{\partial S(E)}{\partial E} \quad \text{και} \quad \alpha(E) = \frac{F(E)}{T(E)} = \frac{E}{T(E)} - S(E) = b(E) - S(E)$$

Διακριτοποίηση:
$$b(E) = \frac{S(E + \varepsilon) - S(E)}{\varepsilon}$$

Με εξίσωση των εκθετών, κάνοντας ένα βήμα στην ενέργεια και χρήση της τελευταίας σχέσης :

$$\alpha(E - \varepsilon) = \alpha(E) + [b(E - \varepsilon) - b(E)] \times E$$

- Γι' αυτό συμφέρει η συγκεκριμένη τυποποίηση!

$$\alpha(E_{max}) = 0 \quad \alpha^0(E) = 0, \quad b(E) = b^0 \geq 0$$

... αναδρομή για το $b(E)$

$$w_0^{n+1}(E) = e^{-S_0^{n+1}(E)} = c \frac{w^n(E)}{\hat{H}^n(E)}, \quad H^n(E) \rightarrow \hat{H}^n(E) = \max[h_0, H^n(E)]$$

Έτσι ώστε: $S_0^{n+1}(E) = -\ln c + S^n(E) + \ln \hat{H}^n(E)$

Υπολογίζοντας το $b_0^{n+1}(E)$ από τη σχέση ορισμού του, τελικά:

$$b_0^{n+1}(E) = b^n(E) + \frac{\ln \hat{H}^n(E + \varepsilon) - \ln \hat{H}^n(E)}{\varepsilon}$$

Μετά από λίγη στατιστική:

$$\sigma^2[b_0^{n+1}(E)] = \frac{c'}{H^n(E + \varepsilon)} + \frac{c'}{H^n(E)} \rightarrow g_0^n(E) = \frac{H^n(E + \varepsilon)H^n(E)}{H^n(E + \varepsilon) + H^n(E)}$$

Τελικά:

$$b^{n+1}(E) = \hat{g}^n(E)b^n(E) + \hat{g}_0^n(E)b_0^{n+1}(E)$$

$$b^{n+1}(E) = b^n(E) + \hat{g}_0^n(E) \frac{\ln \hat{H}^n(E + \varepsilon) - \ln \hat{H}^n(E)}{\varepsilon}$$

Πρακτικά...

$$R^n(E) \equiv \varepsilon b^n(E) = \frac{e^{-S^n(E)}}{e^{-S^n(E+\varepsilon)}} = \frac{w^n(E)}{w^n(E+\varepsilon)}$$

Που στο (n+1) βήμα θα δώσει:

$$R^{n+1}(E) = R^n(E) \left(\frac{\hat{H}^n(E+\varepsilon)}{\hat{H}^n(E)} \right)^{\hat{g}_0^n(E)}$$

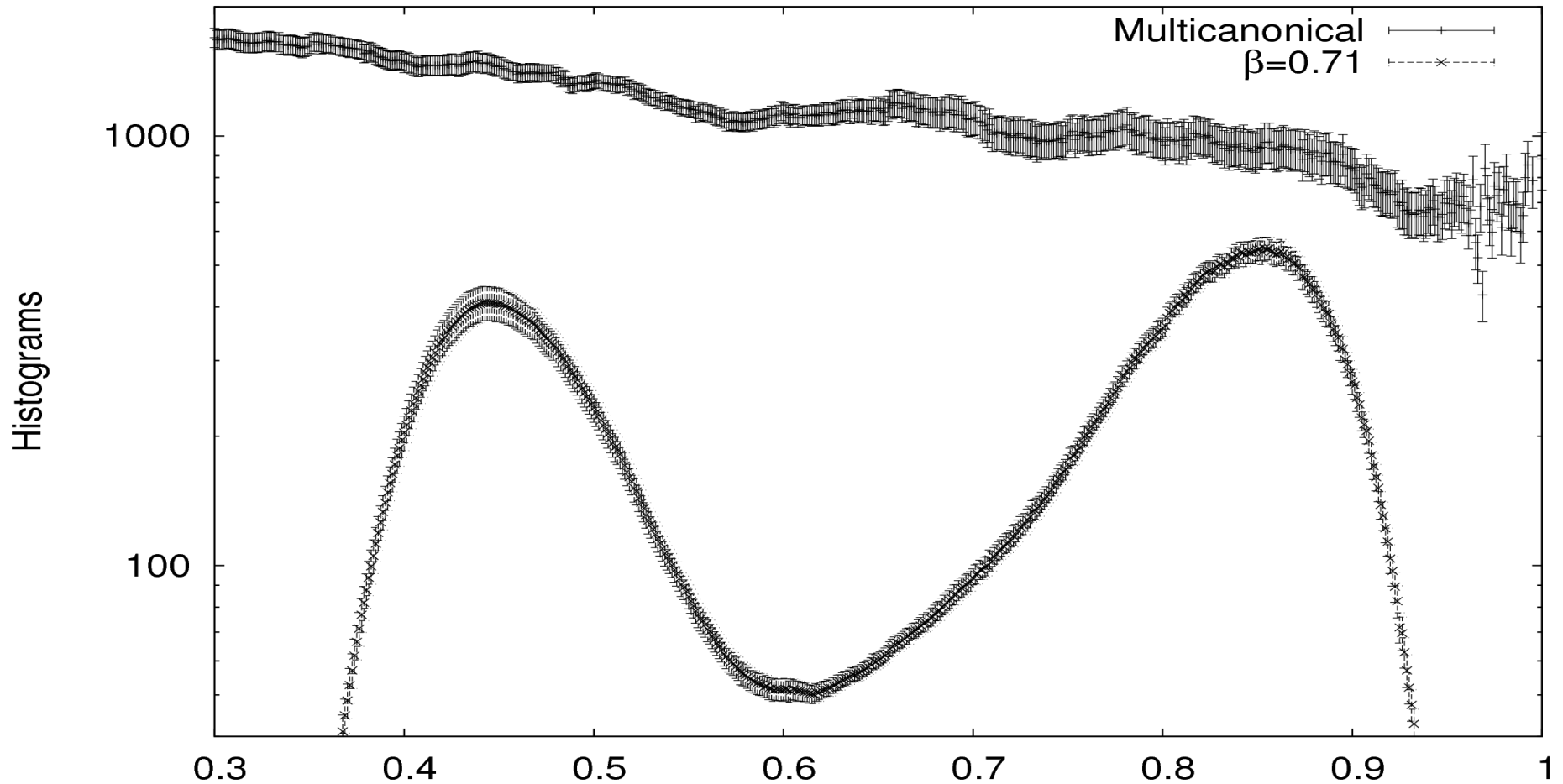
Σημαντικές παράμετροι Πολυκανονικής Προσομοίωσης:

- `namin`, `namax` : ενεργειακό φάσμα
- `maxtun` : μέγιστο πλήθος tunneling events (ή cycling)
- `prec_max`: μέγιστο πλήθος αναδρομών πριν τη διακοπή

10-state Potts

[B.A.Berg] Αναπαρήχθη με το πακέτο STMC

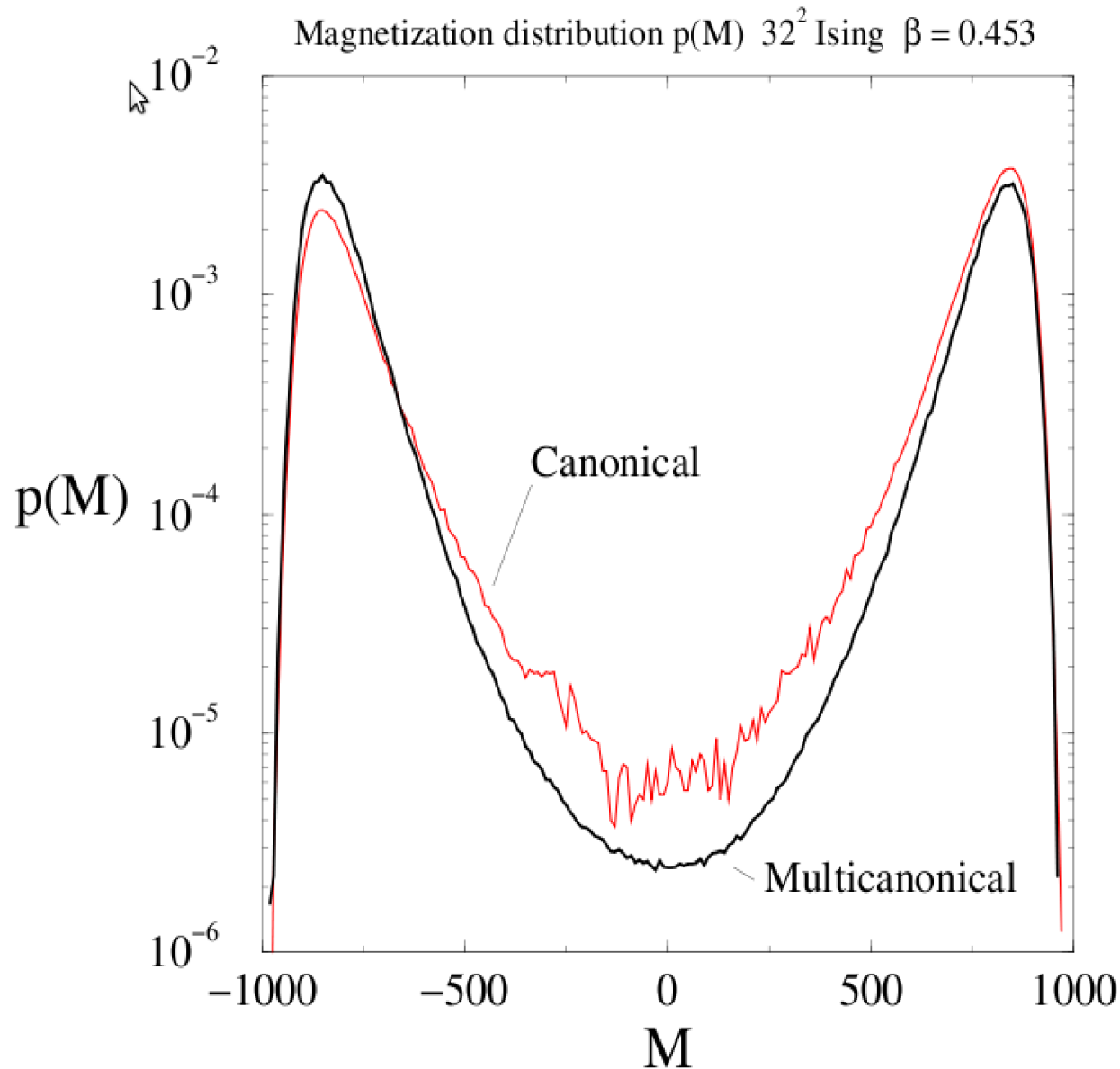
Multicanonical Action Histogram and Canonically re-weighted histogram at b_c



$$\bar{O} = \frac{\sum_{i=1}^n O^i \exp\left(-\beta E^i + b(E^i) E^i - \alpha(E^i)\right)}{\sum_{i=1}^n \exp\left(-\beta E^i + b(E^i) E^i - \alpha(E^i)\right)}$$

$$\bar{f} = \frac{\sum_E f(E) h_{mu}(E) \exp\left(-\beta E + b(E) E - \alpha(E)\right)}{\sum_E h_{mu}(E) \exp\left(-\beta E + b(E) E - \alpha(E)\right)}$$

Τί πετύχαμε;

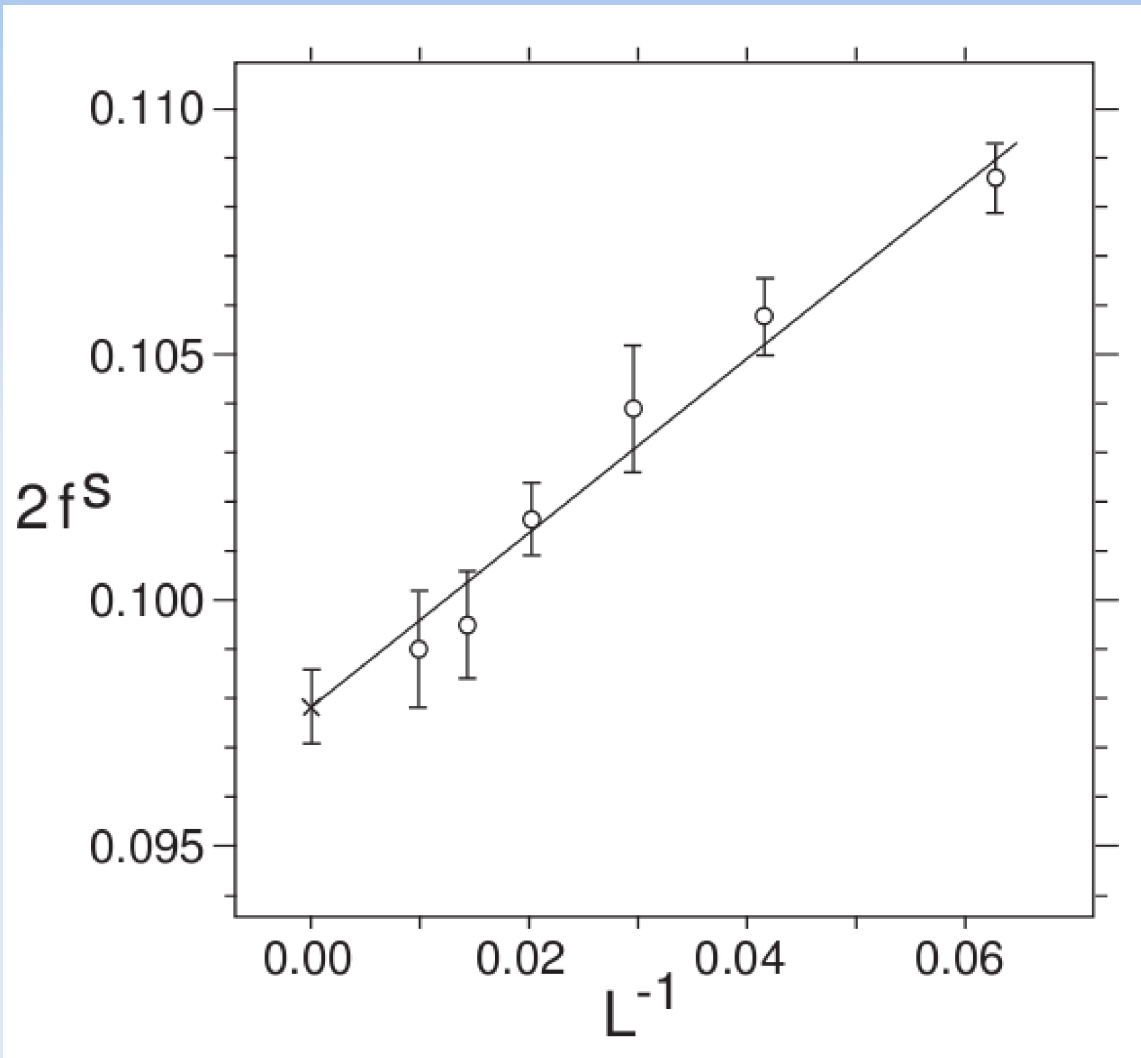


Κανονικό ιστόγραμμα
+
Πολυκανονικό
αναζυγισμένο στη β_c
[Kari Rummukainen L.Notes]



Η στατιστική στις
ενδιάμεσες
καταστάσεις
βελτιώθηκε
αισθητά !

Υπολογισμός επιφανειακής τάσης



- ✓ Διεξαγωγή πολυκανονικών προσομοιώσεων για διάφορα L .
- ✓ Αναζύγιση σε β_c (θα πρέπει να τη βρούμε)
- ✓ Υπολογισμός του λόγου $\frac{P_{min}}{P_{max}}$
- ✓ Υπολογισμός της f^S
- ✓ Επανάληψη για κάθε L

FSS (finite size scaling)

Παρατηρούμε την οριακή συμπεριφορά του συστήματος στο θερμοδυναμικό όριο.

Επιφανειακές τάσεις στο $q=10$ Potts και
FS $L \rightarrow \infty$ extrapolation.

[B.A.Berg, T.Neuhaus (1992)]

Συνάρτηση επιμερισμού

$$Z(\beta) = \sum_{k=1}^K e^{-\beta E^k} \Rightarrow Z(0) = K = q^N$$

Σταθερό σημείο! Αρκεί η $\beta=0$ να είναι εντός β -φάσματος.

$$c_\beta \sum_E n(E) e^{-\beta E} = 1 \Rightarrow c_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} \rightarrow c_0 = \frac{1}{K}$$

Ο εκτιμητής για την $P(E)$ είναι:

$$P(E) = \left(\frac{c_\beta}{c_{mu}^n} \right) \frac{h_{mu}(E)}{w_{mu}(E)} e^{-\beta E}$$

Τότε:

$$\beta=0 \rightarrow c_{mu}^n$$

Fixed!

και τότε η συνθήκη:

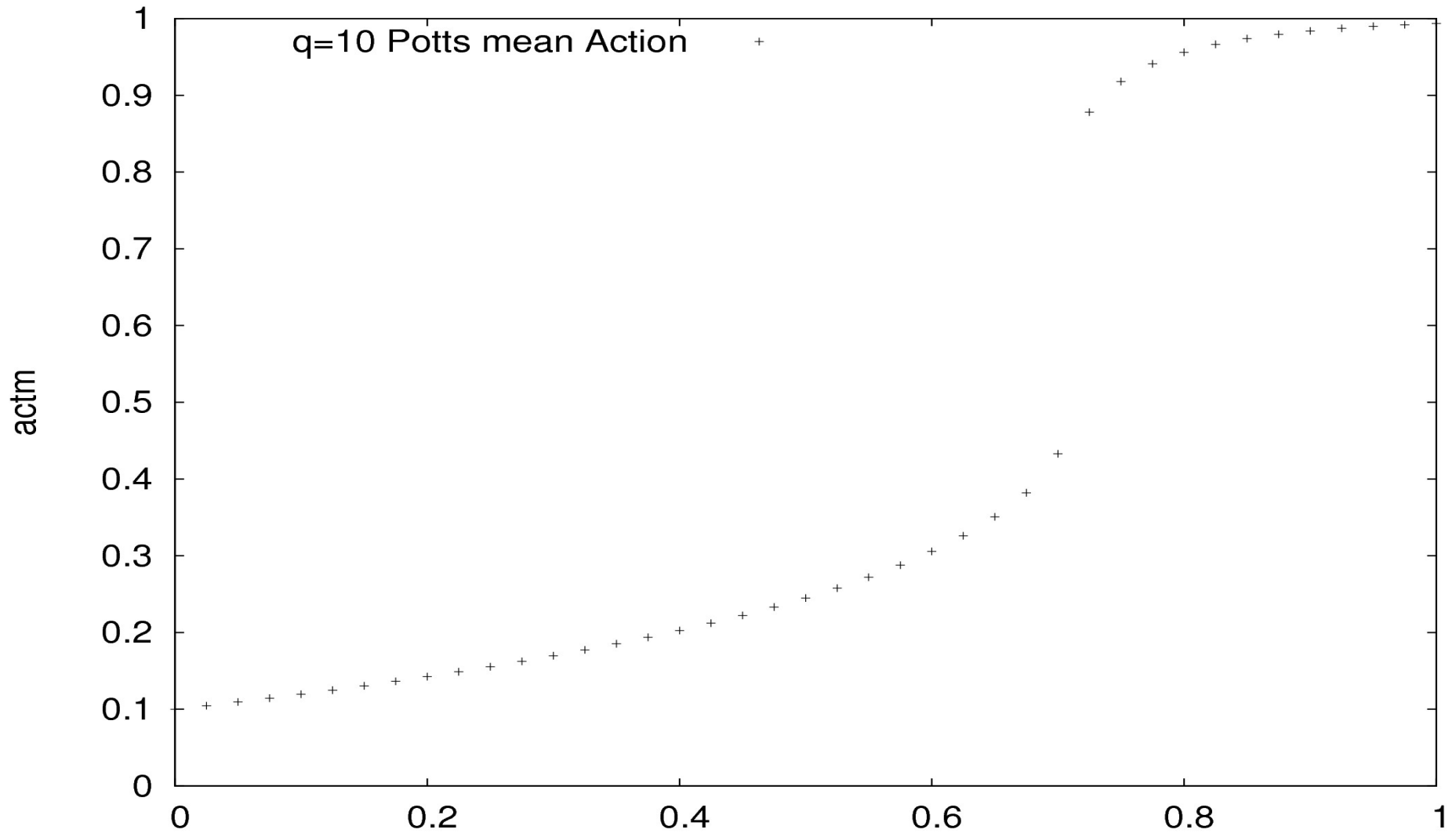
$$\sum_E P(E) = 1$$

Fixed!

$$\rightarrow c_\beta \rightarrow Z(\beta)$$

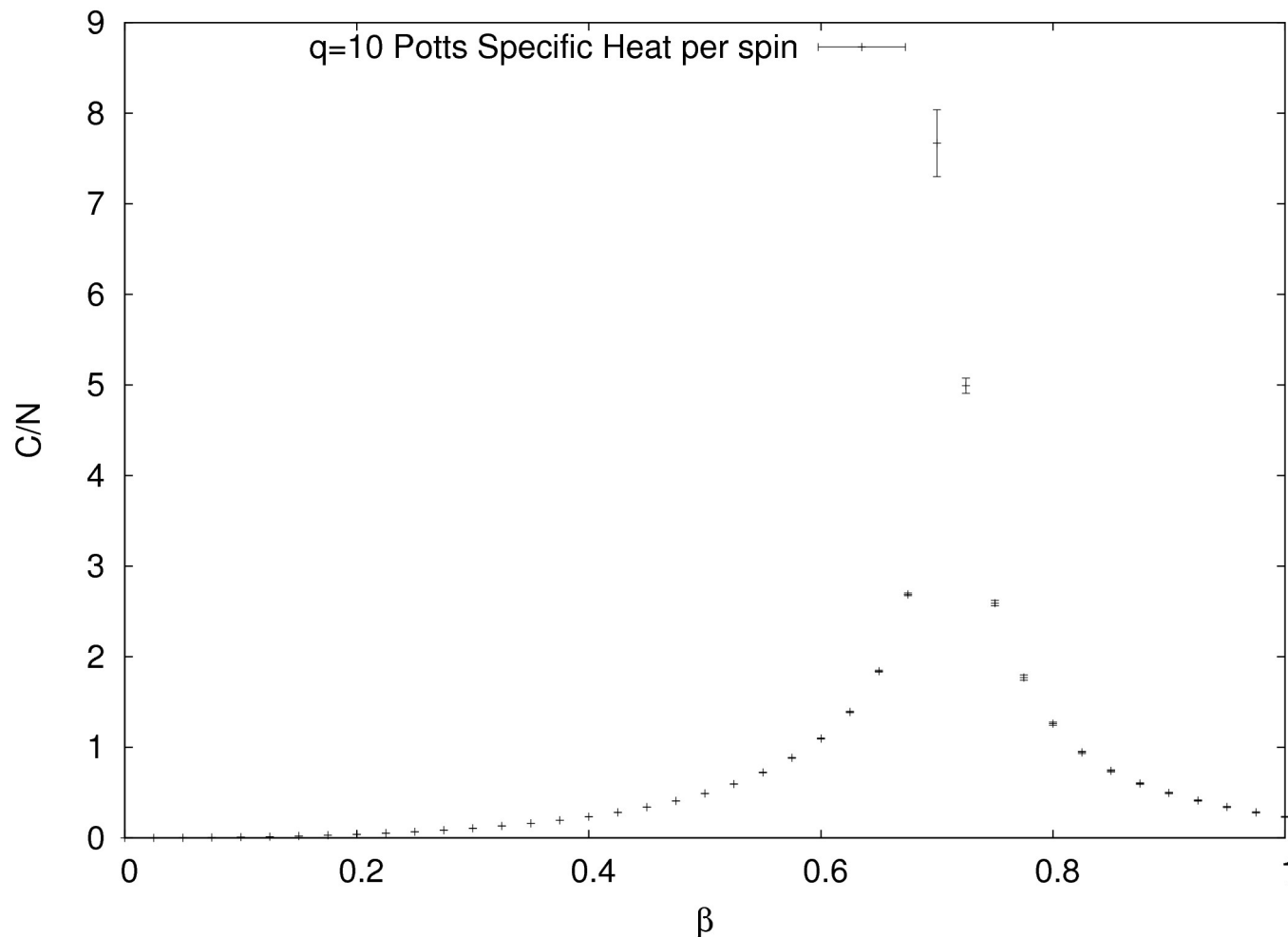
Και έπονται: $F(\beta) = -\beta^{-1} \ln Z(\beta)$, $S = \frac{E - F}{T}$

Διάγραμμα δράσης



$$E_0^k = \frac{2dN}{q} - d iact^k, \quad iact^k = \sum_{\langle ij \rangle} \delta(q_i, q_j)^\beta, \quad iact = 0, 1, 2, \dots, nlink$$

Διάγραμμα C/N

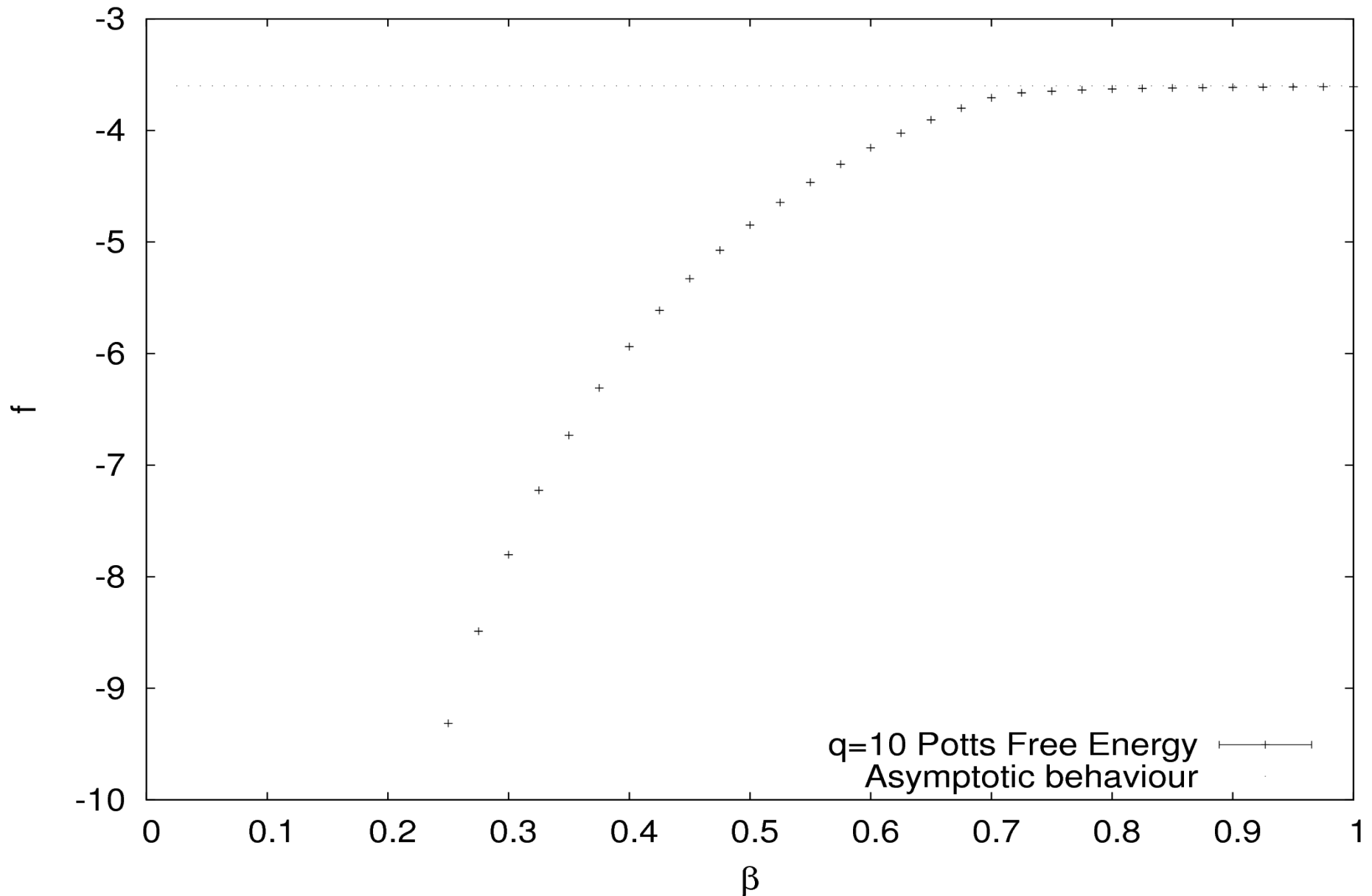


$$C = \frac{dE}{dT} = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

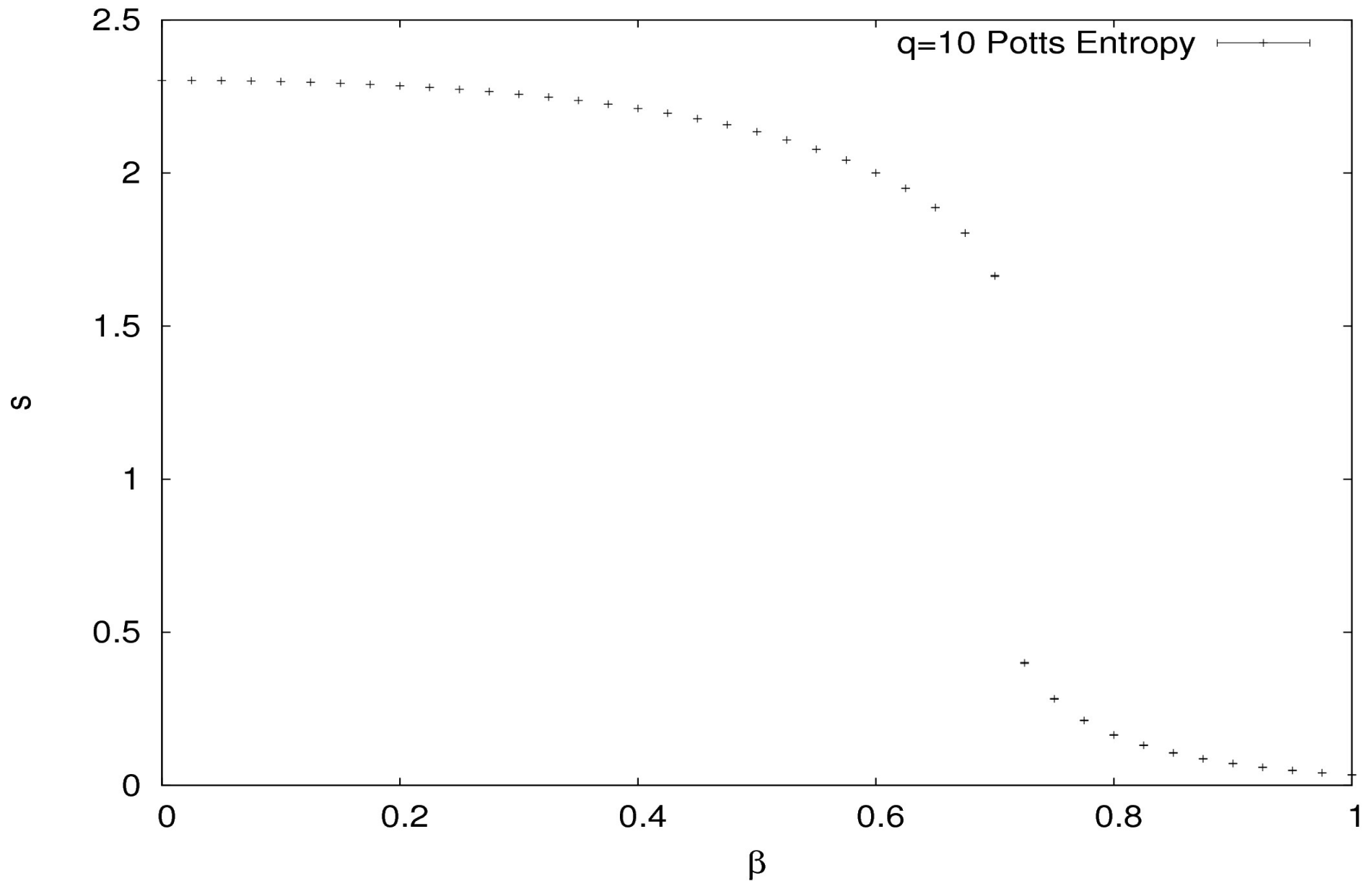
$$\beta_c \approx 0.71$$

10-state Potts σε $L=20 \times 20$. 100000 equilibration sweeps και 32x100000 sweeps μετρήσεων. [Berg (2003)]. Αναπαρήχθη με χρήση του πακέτου STMC.

Διάγραμμα F/N



Διάγραμμα S/N



ΕΥΧΑΡΙΣΤΩ !