



UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR

LA-CoNGA PHYSICS

Métodos de Monte Carlo.
c) " Critical Slowing down "

Profesora
GLORIA BUENDÍA

3 de abril de 2023

Contenido General

1 " Critical Slowing down "	1
2 Análisis de Datos	3
2.1 Estimación de errores estadísticos	3
3 Efectos de tamaño finito - Finite Size Scaling FSS	5



1. “ Critical Slowing down ”

Cerca de los puntos críticos (transiciones de fase) las correlaciones espaciales y temporales crecen, a la temperatura crítica T_c las escalas divergen. Por ejemplo en un sistema de espines a T_c , temperatura de Curie, el sistema pasa de un estado de desorden a uno de orden o viceversa, dependiendo si se aproxima al punto crítico desde $T < T_c$ ó $T > T_c$. Si se aproxima desde $T > T_c$ a pesar de que la magnetización promedio es cero, se comienzan a formar grandes “clusters” de espines ordenados, estos “clusters” pueden cambiar fácilmente su orientación produciendo grandes fluctuaciones en las cantidades físicas, como la magnetización y la energía, el tamaño de estos clusters diverge cuando $T \gtrsim T_c$, y cantidades que dependen de las fluctuaciones de la magnetización y de la energía como la susceptibilidad magnética y el calor específico, respectivamente, tienden a diverger. Como nuestros sistemas tienen tamaño finito estas divergencias se manifiestan en el tamaño de las barras de error de la magnetización y la energía, y como picos en la susceptibilidad y el calor específico centrados cerca de T_c . Este comportamiento cerca de las transiciones de fase es uno de los fenómenos físicos más interesantes que nos encontramos. El auge de los métodos de Monte Carlo es en gran parte debido al interés de estudiar estos fenómenos cerca de la criticalidad. Irónicamente a pesar de que estas fluctuaciones nos permiten identificar la cercanía de un punto crítico, los grandes errores nos impiden calcular con precisión las cantidades críticas.

Los errores estadísticos disminuyen con el número de mediciones, entonces en principio cerca de los puntos críticos debemos hacer muchos más pasos de Monte Carlo, cierto???? No es tan sencillo, como veremos los errores disminuyen al aumentar el número de medidas sólo si estas son **independientes**.

La función de relajación: correlación temporal entre dos medidas de la cantidad M , separadas un “tiempo” t

$$C_M(t) = \frac{\langle M(t)M(0) \rangle - \langle M \rangle^2}{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2} \quad ; \quad 0 \leq C_M(t) \leq 1$$

En general para tiempos muy largos, la correlación disminuye de forma exponencial $C_M(t \rightarrow \infty) \rightarrow e^{-\frac{t}{\tau}}$

τ es el tiempo de correlación, diverge cuando $T \rightarrow T_c$. Se relaciona con la longitud de correlación espacial ξ

$$\tau \sim \xi^3$$

y cuando nos aproximamos a T_c , ξ diverge como

$$\xi(T \approx T_c) \sim \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-\nu} \implies \tau \sim \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-3\nu}$$

A diferencia de ν , 3 no es un exponente universal, depende del algoritmo utilizado, exponente dinámico.



$$C(k) = \frac{\langle M(j)M(j+k) \rangle - \langle M(j) \rangle^2}{\langle M^2(j) \rangle - \langle M(j) \rangle^2}$$

Medidas separadas k pasos

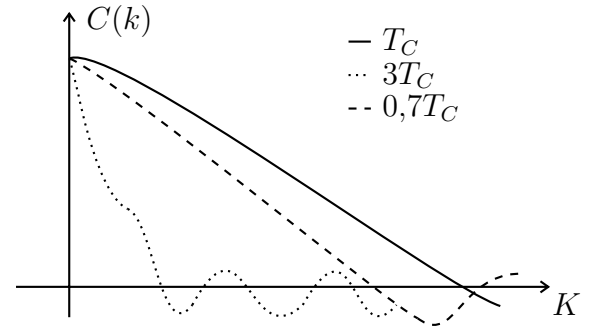


Figura 1: Critical Slowing down

Cuando nos aproximamos a T_c la longitud de correlación se hace cada vez mayor ($\xi \sim \left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^\nu$). Es muy difícil generar configuraciones estadísticamente independientes, el sistema contiene islas en que los espines están alineados, para generar configuraciones distintas es necesario invertir gran número de espines de la isla. Esto es muy difícil con el algoritmo de Metropolis, la probabilidad de invertir un espin de la isla es muy baja, ya que está rodeado de espines alineados, al invertir un espin el cambio de energía es muy grande y tiene muy poca probabilidad de ser aceptado el cambio.

El algoritmo simple de Metropolis que hemos descrito tiene una ventaja muy grande: al voltear solo un espin a la vez, calcular el cambio de energía del sistema es muy fácil, por que el Hamiltoniano es local

$$\begin{array}{l} S_i \quad E_i = -JS_i(S_1 + S_2 + S_3 + S_4) - hS_i \\ \downarrow \\ -S_i \quad E'_i = JS_i(S_1 + S_2 + S_3 + S_4) + hS_i \end{array}$$

$$\Delta E = 2JS_i(S_1 + S_2 + S_3 + S_4) + 2hS_i \rightarrow \text{Cambio de energía asociado al voltear el espin } i, \text{ donde } S_1, S_2, S_3, S_4, \text{ son sus 4 vecinos cercanos (Red cuadrada)}$$

Pero este algoritmo en que se voltean solo un espin por vez, tiene un parámetro dinámico, $\beta \approx 2$ muy alto, el critical slowing down es muy serio.

Como veremos luego hay otros algoritmos con exponentes dinámicos β , mucho más pequeños.



2. Análisis de Datos

Fuentes de errores	Sistemáticos
	Estadísticos
	Sistema finito

Sistemáticos: ocurren cuando hacemos aproximaciones en los algoritmos, por ejemplo cuando discretizamos ecuaciones diferenciales. En los algoritmos de Monte Carlo en general estos errores no son relevantes.

Estadísticos: Realmente no generamos todas las configuraciones del sistema generamos solo un conjunto de ellas y calculamos promedios pero las fluctuaciones pueden ser muy grandes sobre todo cerca de los puntos críticos. Recordemos que las fluctuaciones corresponden a las funciones respuesta.

Ejemplo: Si fijamos la T del sistema, la energía es diferente en las distintas configuraciones, las diferencias del promedio, es decir el error de la energía está asociado al calor específico.

$$C_v = \frac{1}{KT^2} \{ \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \} \text{ esta cantidad diverge a } T_c$$

Similarmente las fluctuaciones de la magnetización están asociadas a las susceptibilidad magnética, $\chi \sim (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$.

Cada paso de Monte Carlo en general solo ocasiona un pequeño cambio en el sistema. Cerca de T_c los sistemas se aproximan al equilibrio muy lentamente - Critical Slowing down.

Como habíamos y dicho

$$C(t) = \frac{\langle O(s+t)O(s) \rangle - \langle O(s) \rangle^2}{\langle O^2(s) \rangle - \langle O(s) \rangle^2} \sim e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Correlación entre medidas separadas un tiempo t (t se mide en pasos de Monte Carlo). Generalmente se considera que si $t \sim \tau$ las medidas son independientes.

Pero el tiempo de correlación crece al acercarnos al punto crítico $\tau \sim \left| \frac{T-T_c}{T_c} \right|^{-\nu_3}$.

Es muy difícil obtener medidas estadísticamente independientes cuando nos aproximamos a T_c (Critical Slowing Down)

2.1. Estimación de errores estadísticos

En los métodos numéricos tipo Monte Carlo en que las cantidades físicas se calculan al promediar sobre distintas configuraciones, es fundamental determinar los errores de forma correcta, al menos no subestimarlos.

El error estadístico de una muestra de N medidas estadísticamente independientes es



$$\Delta X = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$$

$$\langle X^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i^2$$

$$\langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$$

Si las medidas no son estadísticamente independientes esta fórmula subestima el error

Supongamos que nuestras medidas son estadísticamente independientes solo después que están separadas por n pasos de Monte Carlo ($n < M$).

Una forma mejor de estimar los errores, llamado método de bloques, es dividir la totalidad de medidas en M bloques, donde cada bloque tiene n medidas consecutivas

$$M = \frac{N}{n}, \quad n = \frac{M}{n} \quad \begin{array}{l} M \text{ \# de bloques} \\ n \text{ \# de medidas en cada bloque} \end{array}$$

se puede estimar ahora el error como

$$\Delta X' = \frac{1}{\sqrt{M-1}} \sqrt{\langle X_b^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$$

El error ahora se toma como la desviación estándar de las M medidas (una para cada bloque) que se consideran estadísticamente independientes

$$\langle X_b^2 \rangle = \frac{1}{M} \sum_{I=1}^M X_I^2, \quad \text{dónde } X_I \text{ es el promedio de } X \text{ dentro de cada bloque}$$

$$X_I = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k^{(I)},$$

Note que

$$\begin{aligned} \langle X_b \rangle &= \langle X \rangle \\ &= \frac{1}{Mn} \sum_{I=1}^M \sum_{k=1}^n X_k' = \frac{1}{Mn} \sum_{i=1}^{Mn} X_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \end{aligned}$$

Es inmediato ver que el $\langle X \rangle$ es el mismo calculado sobre N medidas iniciales que calculado como el promedio de los promedios de los bloques \implies La cantidad física es la misma independientemente de como se calculan los errores. Pero $\langle X^2 \rangle \neq$ que calculado sobre promedio de los bloques.

Ejm trivial: Tenemos 6 medidas consecutivas (1, 3, 1, 1, 0, 2, 0)

- Calcular $\langle X \rangle$, calcular ΔX si las medidas son estadísticamente independientes.
- Calcular $\langle X \rangle$ y ΔX si la correlación entre las medidas es de dos pasos.
- Calcular $\langle X \rangle$ y ΔX si la correlación entre las medidas es de tres pasos.



a) Tomo las 6 medidas

$$\langle X \rangle = \frac{7}{6} \quad \langle X^2 \rangle = \frac{15}{6}$$

$$\Delta X = \frac{1}{\sqrt{5}} \sqrt{\frac{15}{6} - \frac{49}{36}} = ,2278$$

b) Divido el sistema en 3 bloques de 3 medidas cada uno

$$X' = 2, \frac{1}{2}, 1 \quad \langle X' \rangle = \frac{7}{6} \quad \langle X'^2 \rangle = \frac{21}{12}$$

$$\Delta X' = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{21}{12} - \frac{49}{36}} \approx ,4410$$

c) Divido el sistema en 2 bloques de 3 medidas cada uno

$$X'' = \frac{5}{3}, \frac{2}{3} \quad \langle X'' \rangle = \frac{7}{6} \quad \langle X''^2 \rangle = \frac{29}{18}$$

$$\Delta X'' = \frac{1}{\sqrt{1}} \sqrt{\frac{29}{18} - \frac{49}{36}} \approx ,5$$

3. Efectos de tamaño finito - Finite Size Scaling FSS

Los promedios en el ensemble canónico son válidos en el límite de sistemas macroscópicos, tamaños enormes para poder ser estudiados aún en los computadores más modernos. Como estimamos los errores cometidos al trabajar con sistemas finitos?

Por ejemplo para un sistema finito las cantidades termodinámicas tienen un comportamiento suave, aún cerca de la transición de fase, sea esta de primer o segundo orden

Ejemplo

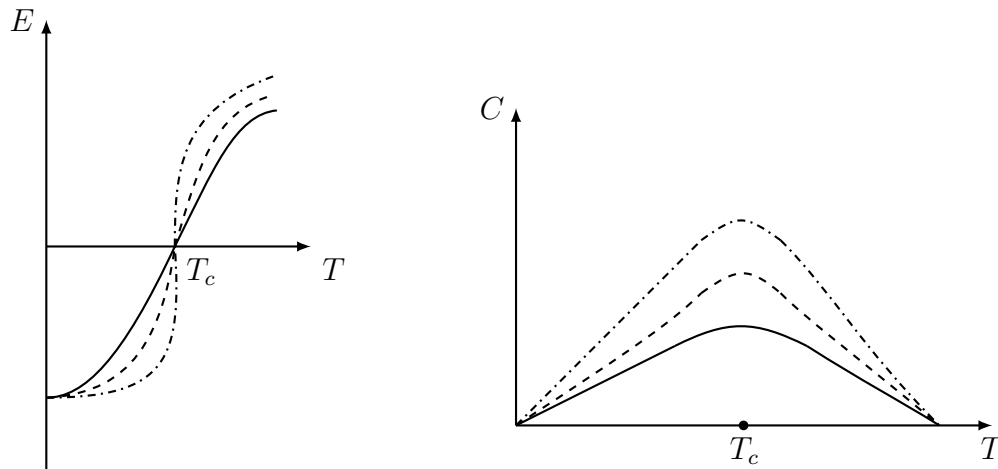


Figura 2: Resultados de la energía y el calor específico para sistemas de 3 tamaños, $L_3 > L_2 > L_1$



Como se sabe el orden de la transición?

La dependencia con el tamaño de las cantidades singulares en las transiciones de segundo orden (continuas) es muy útil para calcular exponentes críticos.

La parte singular de la energía libre, F_s cerca del punto crítico se comporta como una función homogénea

$$F_s(t, L) = \lambda F_s(\lambda^x t, \lambda^y L)$$

Escogemos $\lambda^y = \frac{1}{L} \implies \lambda = L^{-\frac{1}{y}} \implies F_s(t, L) = L^{-\frac{1}{y}} F_s(L^{-\frac{x}{y}} t, 1)$ L Tamaño del sistema

Ahora también escogemos $-\frac{x}{y} = \frac{1}{\nu}$, donde ν es el exponente crítico de la longitud de correlación

$$\xi \sim t^{-\nu} \quad T \approx T_c$$

Pero como estamos trabajando con un sistema finito la longitud de correlación en realidad no puede nunca diverger, el máximo valor que puede tomar es $\xi_L = L$

$$\begin{aligned} \implies L \sim t^{-\nu} \quad \text{at} \quad T \approx T_c &\implies \frac{L^{\frac{1}{\nu}} t = \text{constante cerca de } T_c}{\implies L \sim t^{-\nu}} \\ \implies F_s(t, L) = L^{\frac{1}{y}} F_s(L^{\frac{1}{\nu}} t) & \end{aligned}$$

Que ocurre con el calor específico $C \sim \frac{\partial^2 F}{\partial t^2} \sim t^{-\alpha}$ at $(T \approx T_c)$

$$L^{\nu(\frac{1}{y} - \frac{2}{\nu})} \sim t^{-\alpha} \implies \frac{1}{y} = \frac{1}{\nu}(2 - \alpha)$$

Sustituyendo en la energía libre

$$F_s(t, L) = L^{\frac{\alpha-2}{\nu}} F_s(L^{\frac{1}{\nu}} t) \quad \text{y} \quad C \sim t^{-\alpha} \sim L^{\frac{\alpha}{\nu}}$$

Ahora sabemos como se comporta el calor específico cerca de la T_c cuando varía el tamaño del sistema.

Si nuestra energía libre también depende de otro parámetro, por ejemplo H , campo magnético

$$F_s(t, L, H) = \lambda F_s(\lambda^x t, \lambda^y L, \lambda^z H)$$

Por el argumento anterior $\xi(T \approx T_c) \sim L$, $\lambda^y = L^{-1}$, $-\frac{x}{y} = \frac{1}{\nu}$

Escogemos

$$\implies F_s(t, L, H) = L^{-\frac{1}{y}} F_s(L^{\frac{1}{\nu}} t, 1, L^{-\frac{z}{y}} H)$$

La magnetización, parámetro de orden, cerca de T_c

$$\begin{aligned} M &\approx \frac{\partial F_s}{\partial H} = L^{-(\frac{1}{y} + \frac{z}{y})} F_s(L^{\frac{1}{\nu}} t, 1, L^{-\frac{z}{y}} H) \\ &= t^{\nu(\frac{1}{y} + \frac{z}{y})} F_s(L^{\frac{1}{\nu}} t, 1, L^{-\frac{z}{y}} H); \quad L \sim t^{-\nu} \end{aligned}$$



Si $H = 0$

$$M = t^{\nu(\frac{1}{y} + \frac{z}{y})} F_s(L^{\frac{1}{\nu}} t, 1, 0) \quad L^{\frac{1}{\nu}} t \text{ constante}$$

$$\implies M \sim t^{\nu(\frac{1}{y} + \frac{z}{y})} \sim (-t)^{\beta} \quad \beta \text{ es el exponente crítico de la magnetización, si } H = 0$$

Recordando que $\frac{1}{y} = \frac{2-\alpha}{\nu}$

$$\implies t^{(2-\alpha)(1+z)} = (-t)^{\beta} \implies z = \frac{\beta - 2 + \alpha}{2 - \alpha}$$

$$M(H = 0) \sim (-t)^{\beta} = L^{-\frac{\beta}{\nu}}$$

Ahora tenemos el comportamiento de $M(H = 0)$ con L cerca de T_c .

La susceptibilidad magnética $\chi(t, L, H = 0) \sim t^{-\gamma}$ Cerca de T_c

$$\chi = \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = L^{-\frac{1}{y}(1+2z)} F_s(L^{\frac{1}{\nu}} t, 1, L^{-\frac{z}{y}} H)$$

$$\chi(t, L, H = 0) \sim L^{-\frac{1}{y}(1+2z)} \sim t^{-\gamma} \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (L^{\frac{1}{\nu}} t \text{ const})$$

$$-\frac{1}{y}(1+2z) = \frac{\gamma}{\nu}$$

Recordando que $z = \frac{\beta - 2 + \alpha}{2 - \alpha}$

$$-\frac{1}{y}(1+2z) = -\frac{1}{\nu}(\alpha + 2\beta - 2) = +\frac{\gamma}{\nu}$$

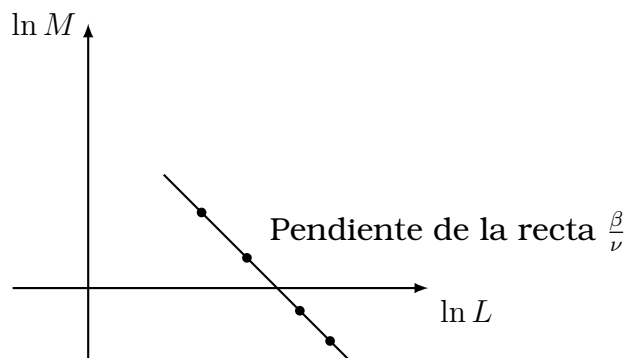
$$\implies \gamma = 2 - 2\beta - \alpha$$

Como $\chi(t, L, H = 0) \sim t^{-\gamma} \implies \chi \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}}$

Tengo la dependencia de C , M y χ con L cerca del punto crítico. **Esto va a permitir calcular los exponentes críticos** \rightarrow Técnica de ‘‘Finite Size Scaling’’

Por ejm: $M \sim L^{-\frac{\beta}{\nu}} M_0$ cerca de T_c (M_0 constante)

$$\ln M \sim -\frac{\beta}{\nu} \ln L + \ln M_0$$





Como a T_c $C \sim L^{\frac{\alpha}{\nu}} \implies \ln C \sim \frac{\alpha}{\nu} \ln L + \text{constante}$

