



Cálculo numérico da distribuição de velocidades em estatística não-extensiva para o Hamiltoniano HMF

Maury Duarte Correia INCT-SC CBPF 03/03/2010

Organização do seminário

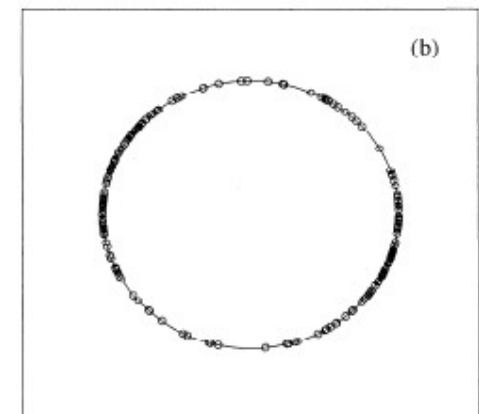
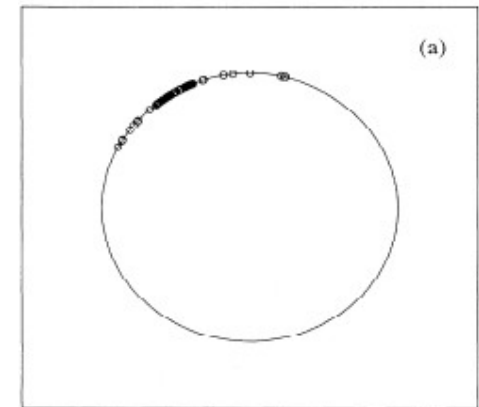
- Modelo HMF (Hamiltonian Mean Field)
- Estatística de BG (Boltzmann-Gibbs) usando HMF
- QSS (Quasi Stationary State)
- Termodinâmica não-extensiva
- Conjectura: ponto fixo não trivial
- Cálculo numérico da pdf (probability distribution function)

Hamiltonian Mean Field (HMF)

- N rotores clássicos com interação de alcance infinito:

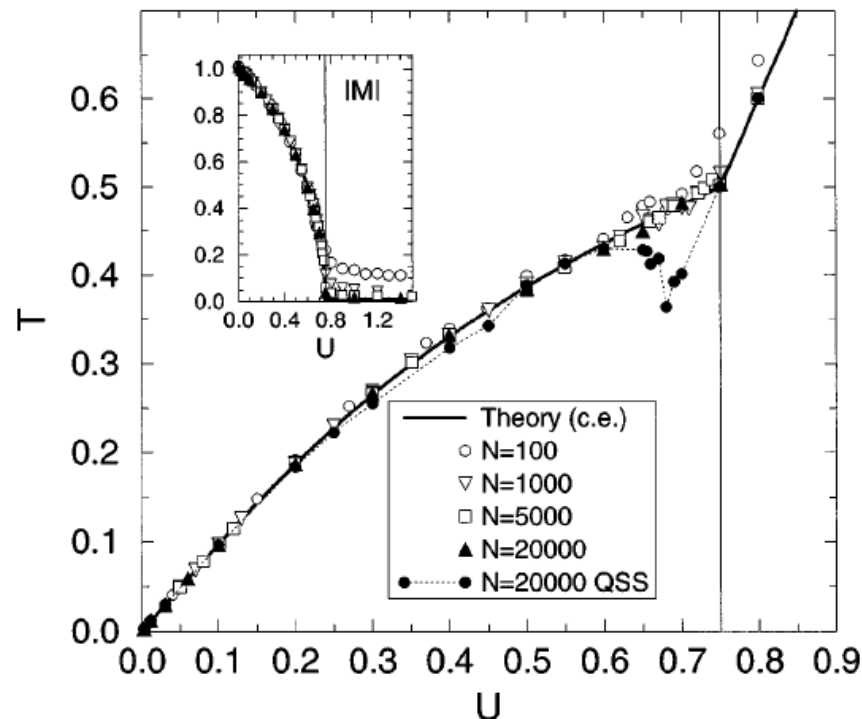
$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$$

- Transição de fase de segunda ordem
- Calor específico negativo
- QSS



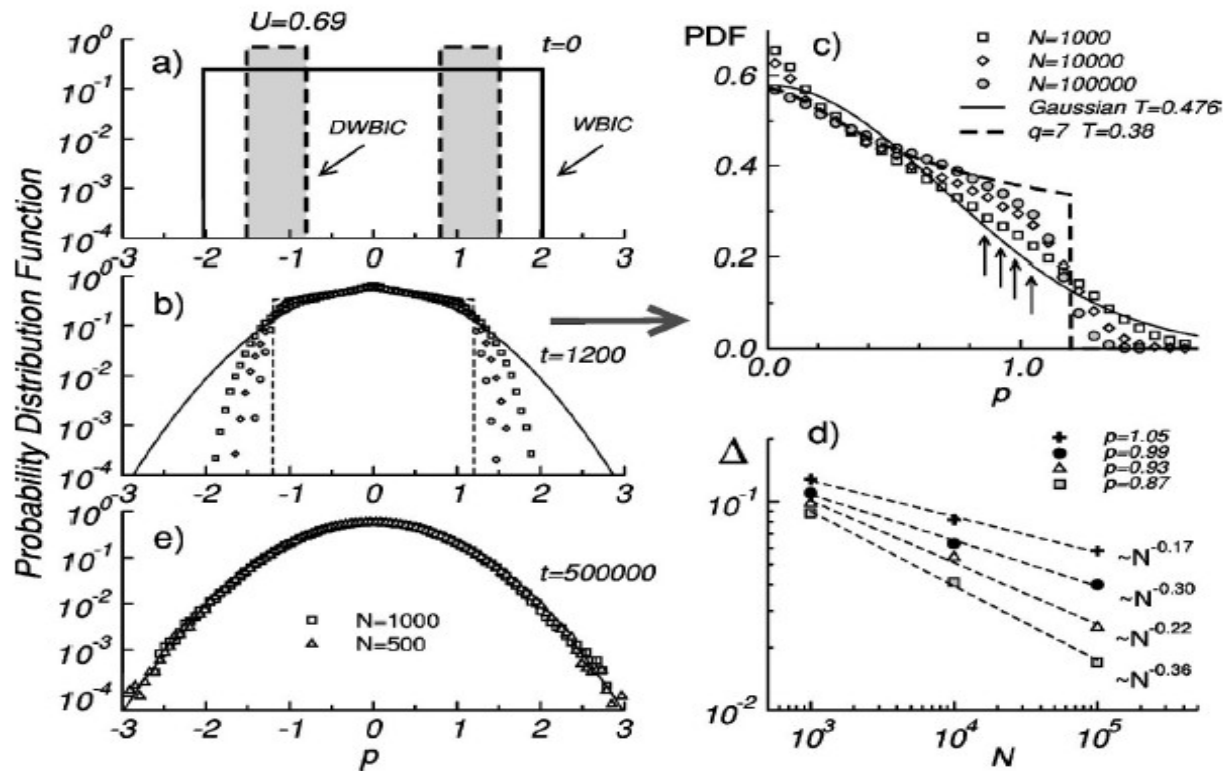
Resultados com estatística de BG:

- Os ensembles canônico e microcanônico não são equivalentes



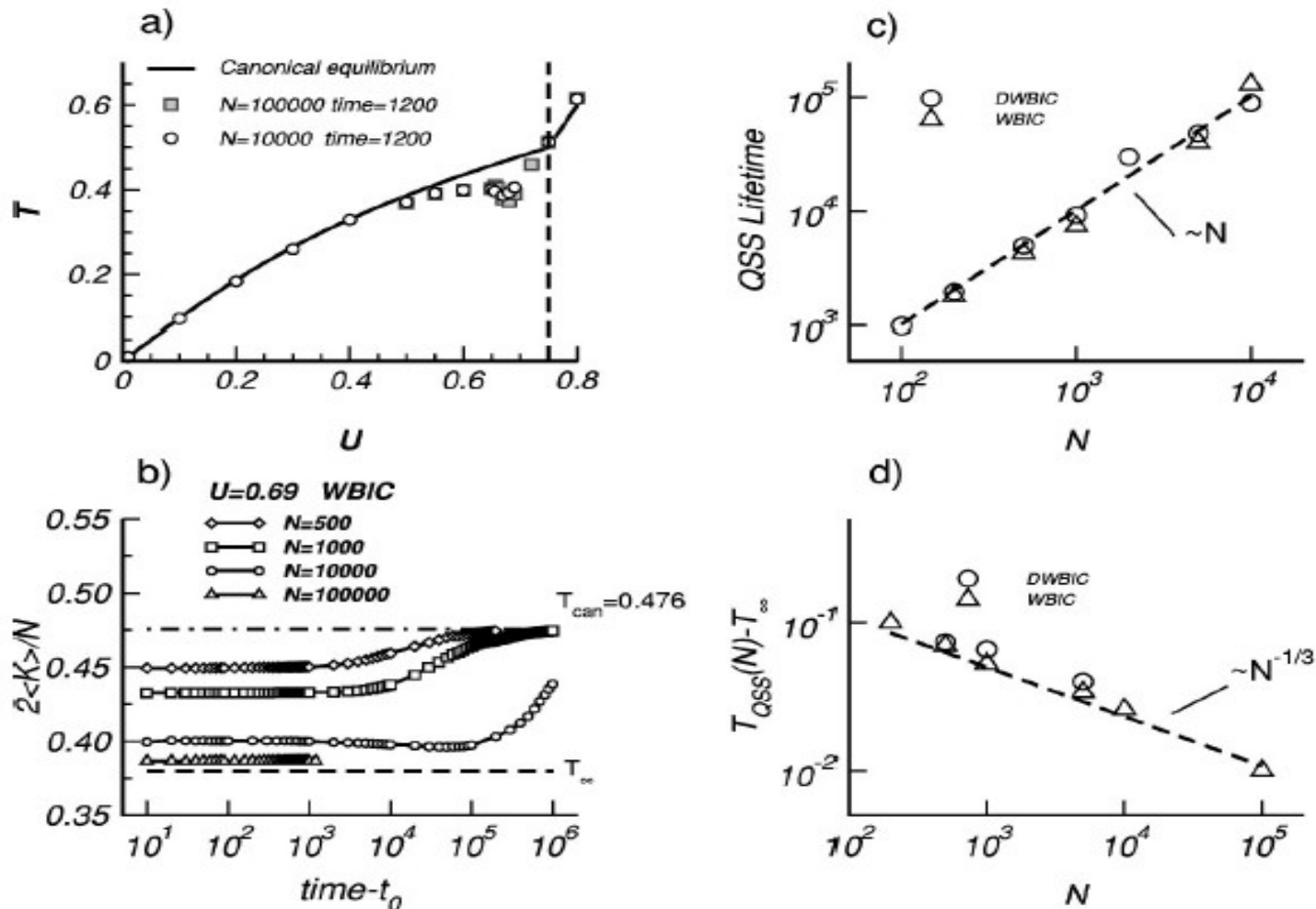
Quasi Stationary State (QSS)

- Estado metaestável para sistema hamiltoniano
- Distribuição de velocidades não Gaussiano
- Condição inicial: *waterbag*



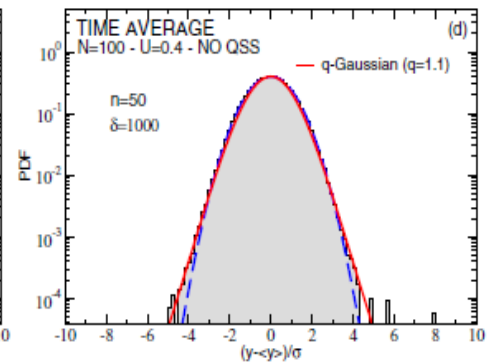
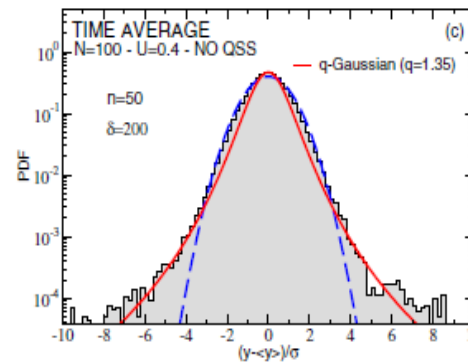
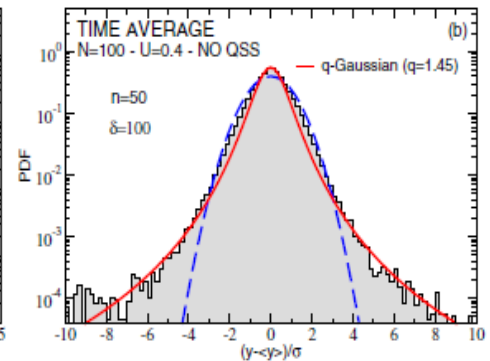
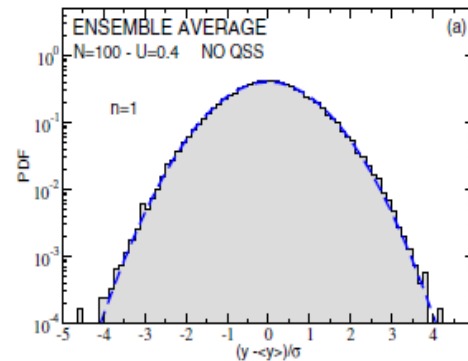
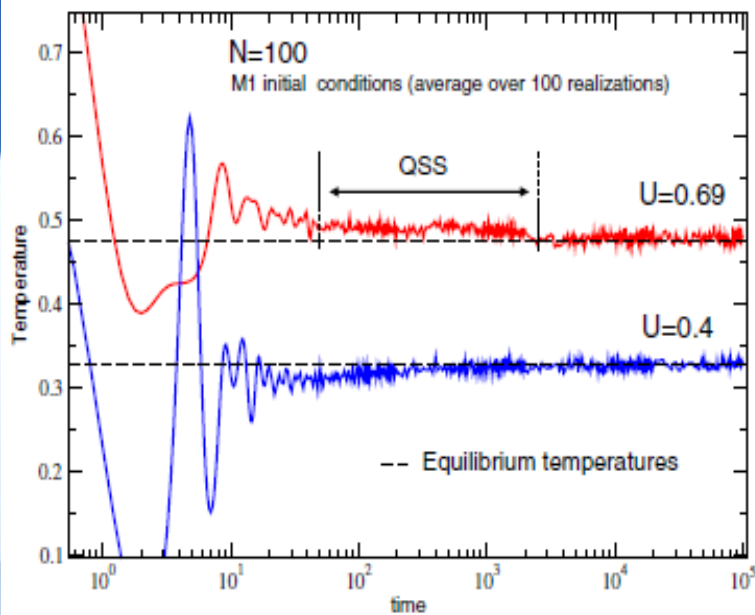
Dependência com N (número de partículas)

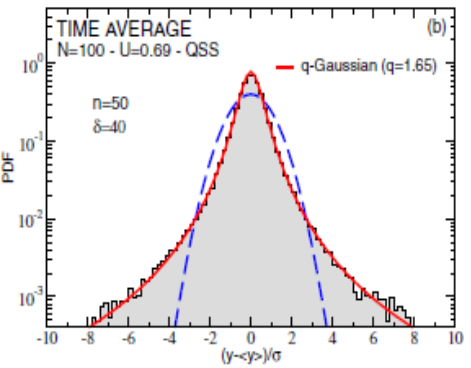
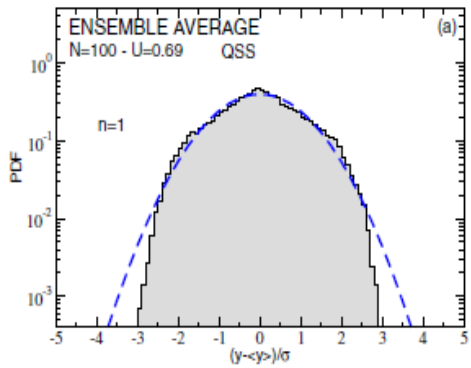
- O tempo de vida QSS aumenta com N



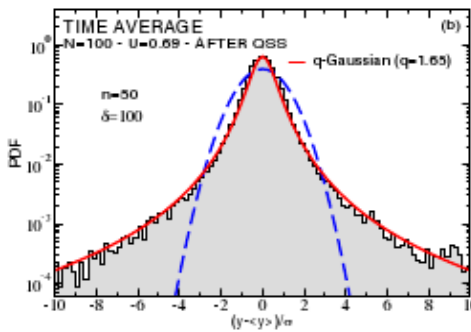
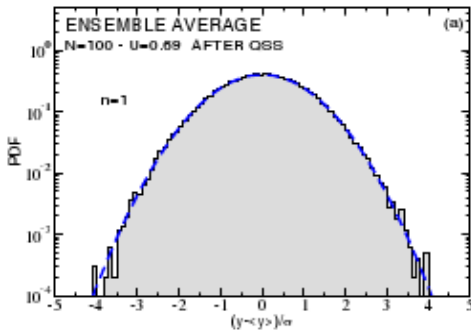
Equilíbrio não Gaussiano

- Média temporal é diferente da média de ensemble
- $U=0.4$, relaxação lenta para equilíbrio Gaussiano

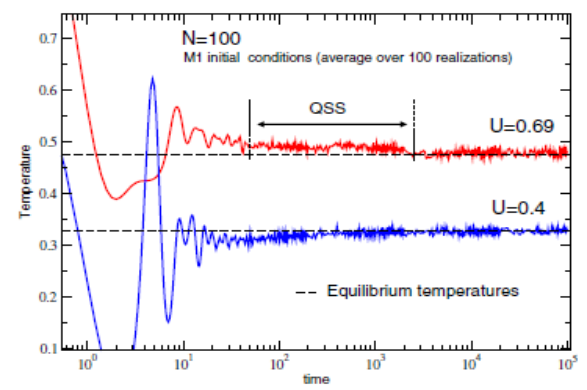
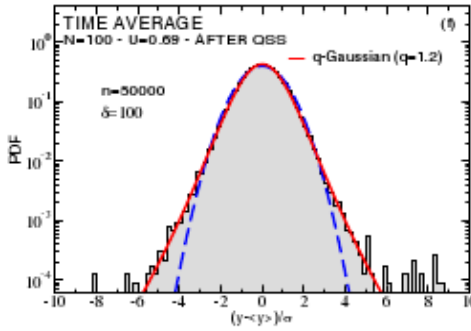
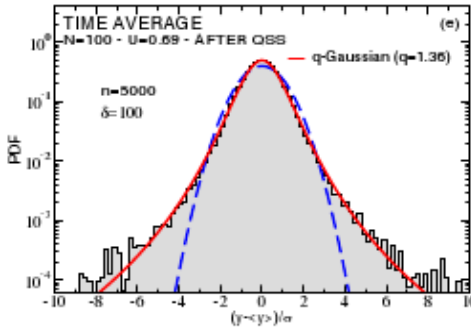
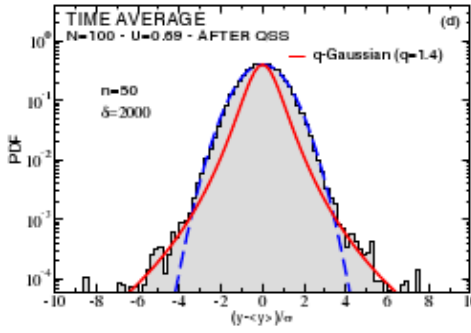
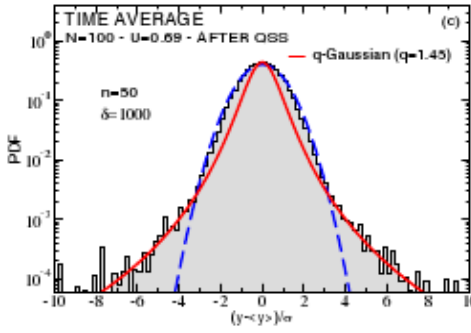




QSS: $U=0.69$; $q=1.65$

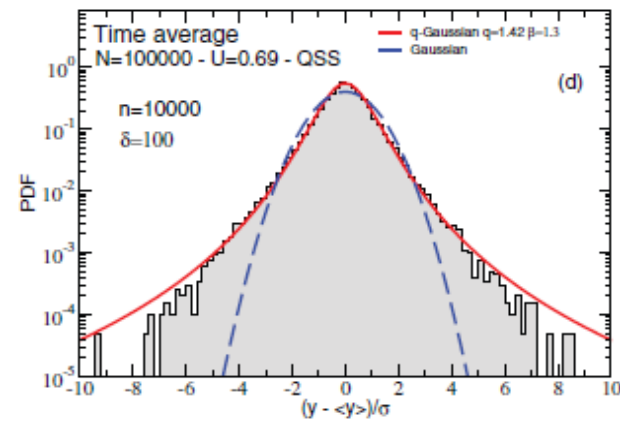
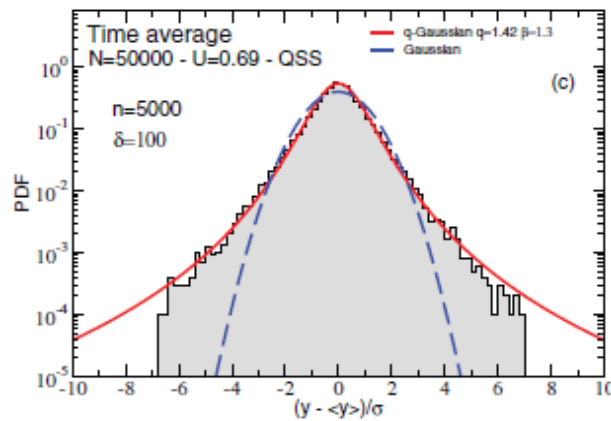
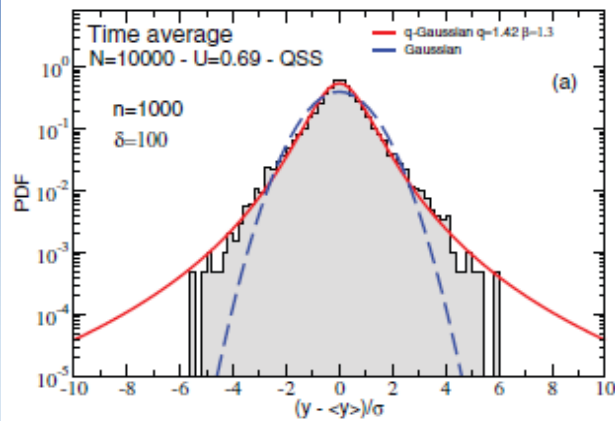
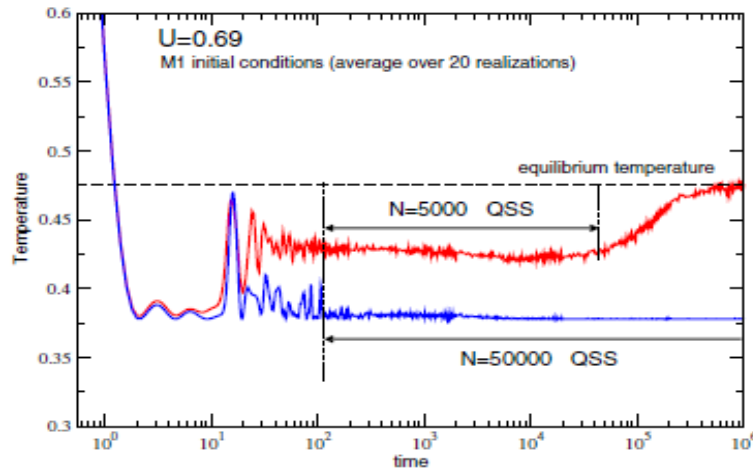


Depois do QSS:
relaxação lenta para o
equilíbrio BG ($q \rightarrow 1$)



EPL 80, 26002 (2007)

Com N maior o QSS é mais pronunciado e a pdf se aproxima mais de uma q -Gaussiana





Termodinâmica não-extensiva: ensemble canônico

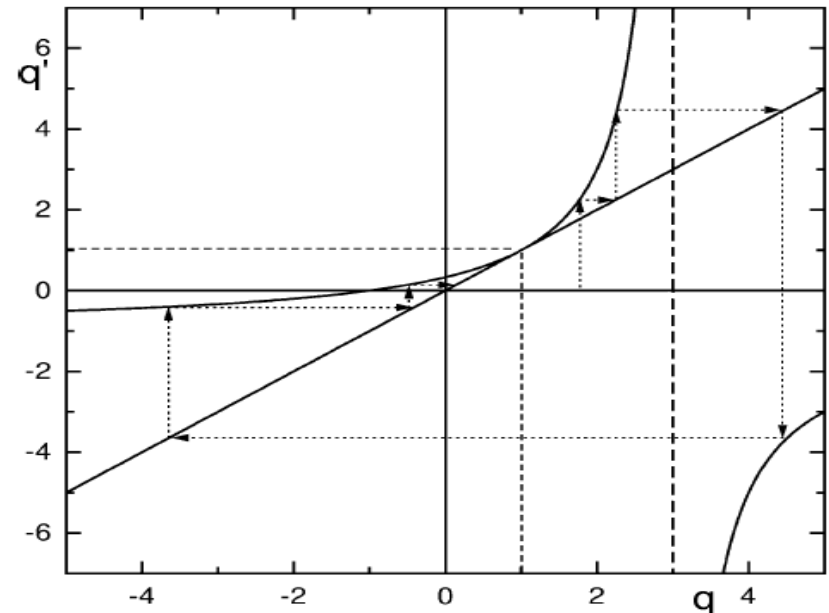
Distribuição de velocidades em estatística não-extensiva (caso 1: sem potencial)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp_2 e_q^{-\frac{\beta}{2}(p_1^2 + p_2^2)} = A e_{q'}^{-\frac{\beta'}{2} p_1^2} \longrightarrow q' = \frac{1+q}{3-q}$$

Fazendo esse processo n vezes obtemos:

$$q^{(n)} = \frac{2q + n(1-q)}{2 + n(1-q)}$$

$$q^{(\infty)} \longrightarrow 1$$



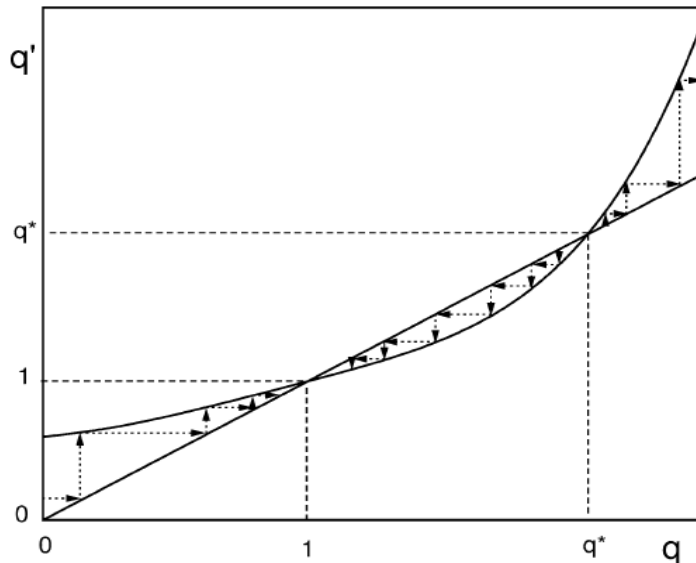
R. S. Mendes and C. Tsallis PLA **285**, 273 (2001)

Em $q=1$ (BG) temos um ponto fixo trivial!

Distribuição de velocidades (caso 2: potencial de longo alcance)

Hamiltoniana:
$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$$

Distribuição de velocidades (pdf):
$$P(p_1) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dp_2 \dots dp_N \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta_1 \dots d\theta_N e^{-\beta H}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dp_1 dp_2 \dots dp_N \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta_1 \dots d\theta_N e^{-\beta H}}$$



Conjectura:

Deve existir um
ponto fixo não
trivial para $q \neq 1$

Objetivo inicial

- Resolver numericamente a integral multidimensional para o cálculo da pdf
- Observar de que forma o potencial de longo alcance interfere na termoestatística não-extensiva (ensemble canônico)
- Verificar a validade da conjectura que prediz a existência de um ponto fixo não trivial

Integral multidimensional via método de Monte Carlo

$$\int_D d\vec{x} f(\vec{x}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\vec{x}_i^{rand}), \quad \vec{x}_i^{rand} \in D$$

O erro no método de monte carlo escala com $\frac{1}{\sqrt{n}}$,
independe da dimensão

Outros métodos, como o de Simpson, são muito caros computacionalmente. O tempo de computação é exponencial com a dimensão.

Cálculo numérico da pdf com monte carlo

Pdf: integração em todas as variáveis exceto em uma

$$P(p_1) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dp_2 \dots dp_N \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta_1 \dots d\theta_N e_q^{-\beta H}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dp_1 dp_2 \dots dp_N \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta_1 \dots d\theta_N e_q^{-\beta H}}$$

Por conveniência vamos reescrever o domínio de integração

$$P(p_1) = \frac{2^{N-1} (2\pi)^N \int_0^{\infty} dp_2 \dots dp_N \int_0^1 d\theta_1 \dots d\theta_N e_q^{-\beta H}}{2^N (2\pi)^N \int_0^{\infty} dp_1 dp_2 \dots dp_N \int_0^1 d\theta_1 \dots d\theta_N e_q^{-\beta H}}$$

Forma compacta

$$P(p_1) = \frac{\int_0^{\infty} \prod_{i=2}^N dp_i \int_0^1 \prod_{j=1}^N d\theta_j e_q^{-\beta H}}{2 \int_0^{\infty} \prod_{i=1}^N dp_i \int_0^1 \prod_{j=1}^N d\theta_j e_q^{-\beta H}}$$

Transformação de coordenadas

$$p_i = x_i^{-\gamma} \rightarrow dp_i = -\gamma \frac{dx_i}{x_i^{\gamma+1}}$$

A integral em p será feita de 0 a 1:

$$\int_0^\infty dp_i = \int_0^1 dp_i + \int_1^\infty dp_i \longrightarrow \int_0^1 \left(dp_i + \gamma \frac{dx_i}{x_i^{\gamma+1}} \right)$$

$$\left(dp_1 + \gamma \frac{dx_1}{x_1^{\gamma+1}} \right) \left(dp_2 + \gamma \frac{dx_2}{x_2^{\gamma+1}} \right) = dp_1 dp_2 + \gamma \frac{dx_1 dp_2}{x_1^{\gamma+1}} + \gamma \frac{dp_1 dx_2}{x_2^{\gamma+1}} + \gamma^2 \frac{dx_1 dx_2}{(x_1 x_2)^{\gamma+1}}$$

Termos binomiais:

$$\left(dp_1 + \gamma \frac{dx_1}{x_1^{\gamma+1}} \right) \left(dp_2 + \gamma \frac{dx_2}{x_2^{\gamma+1}} \right) = dp_1 dp_2 + 2\gamma \frac{dx_1 dp_2}{x_1^{\gamma+1}} + \gamma^2 \frac{dx_1 dx_2}{(x_1 x_2)^{\gamma+1}}$$

Pdf com a transformação de coordenadas em p:

$$P(p_1) = \frac{\int_0^1 \prod_{i=2}^N \left(dp_i + \gamma \frac{dx_i}{x_i^{\gamma+1}} \right) \int_0^1 \prod_{j=1}^N d\theta_j e_q^{-\beta H}}{2 \int_0^1 \prod_{i=1}^N \left(dp_i + \gamma \frac{dx_i}{x_i^{\gamma+1}} \right) \int_0^1 \prod_{j=1}^N d\theta_j e_q^{-\beta H}}$$

Aplicação do método de Monte Carlo:

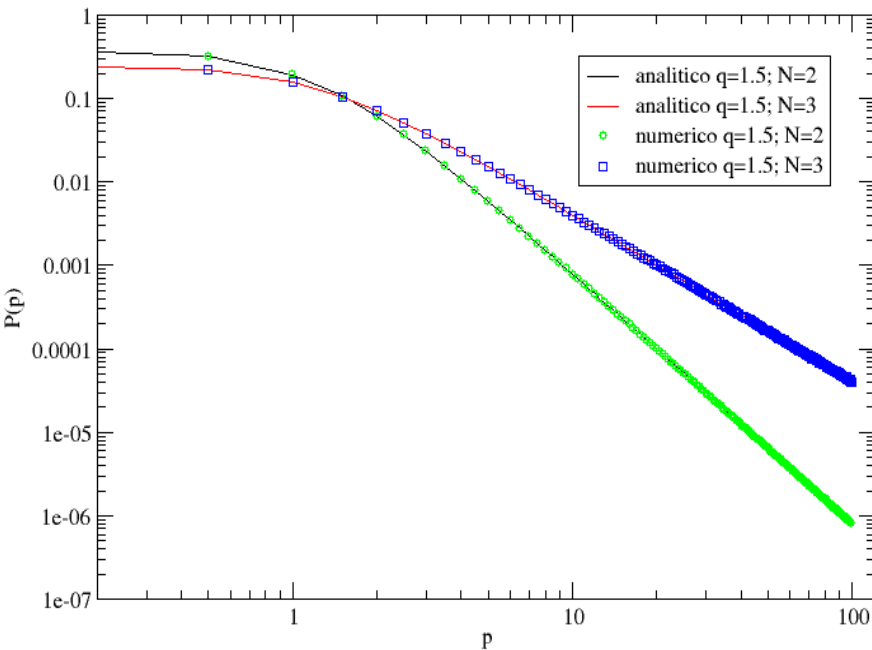
$$P(p_0) = \frac{\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^{N-1} \binom{N-1}{j} J_j e_q^{-\beta \left(\frac{p_0^2}{2} + T'_j + V \right)} \right)}{2 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^N \binom{N}{j} J_j e_q^{-\beta (T_j + V)} \right)}$$

Lembrando que devemos fazer a devida transformação na Hamiltoniana:

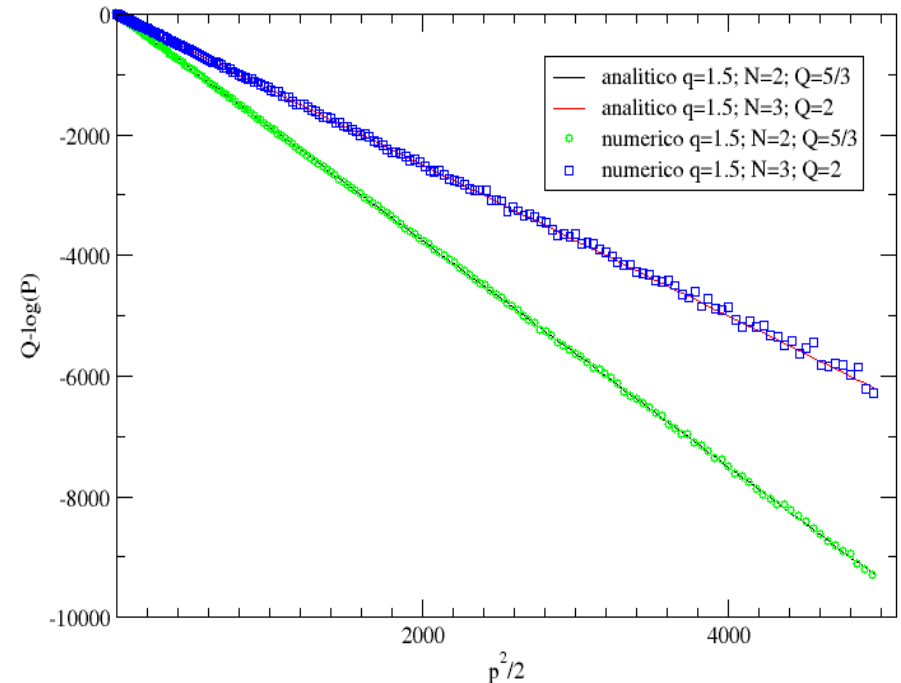
$$T_j = \sum_{k=0}^{N-1-j} \frac{p_k^2}{2} + \sum_{k=N-j}^{N-1} \frac{x_k^{-2\gamma}}{2}; \quad T'_j = \frac{p_0^2}{2} + \sum_{k=1}^{N-1-j} \frac{p_k^2}{2} + \sum_{k=N-j}^{N-1} \frac{x_k^{-2\gamma}}{2}; \quad J_j = \prod_{k=1}^j \frac{\gamma}{x_{N-k}^{\gamma+1}}$$

Resultados de teste: comparação do resultado analítico com o numérico

pdf com monte carlo sem potencial
 $t=0.4; \text{gamma}=2; n=10e5$



pdf com monte carlo sem potencial
 $t=0.4; \text{gamma}=2; n=10e5$

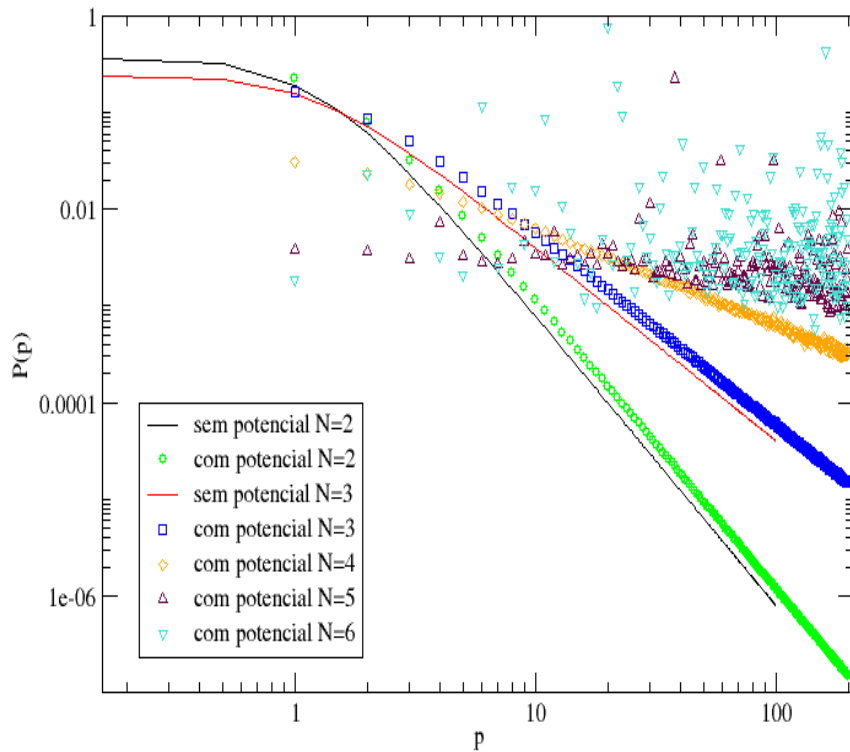


Parâmetros de entrada: q, N, T, gamma, n

Resultados com potencial ligado

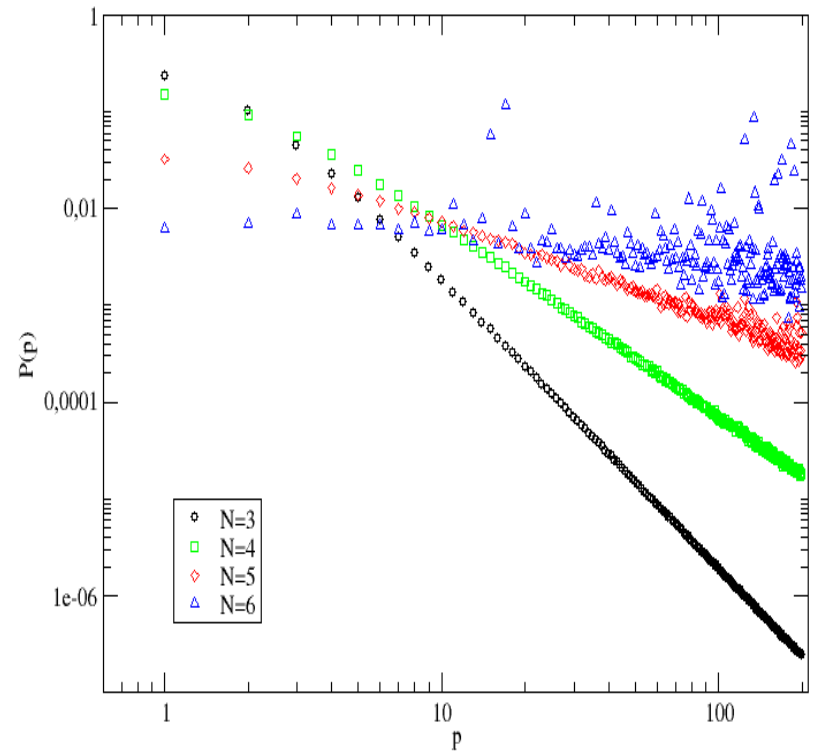
pdf com monte carlo

$q=1.5; t=0.4; \gamma=2; n=10e5$



pdf com monte carlo com potencial

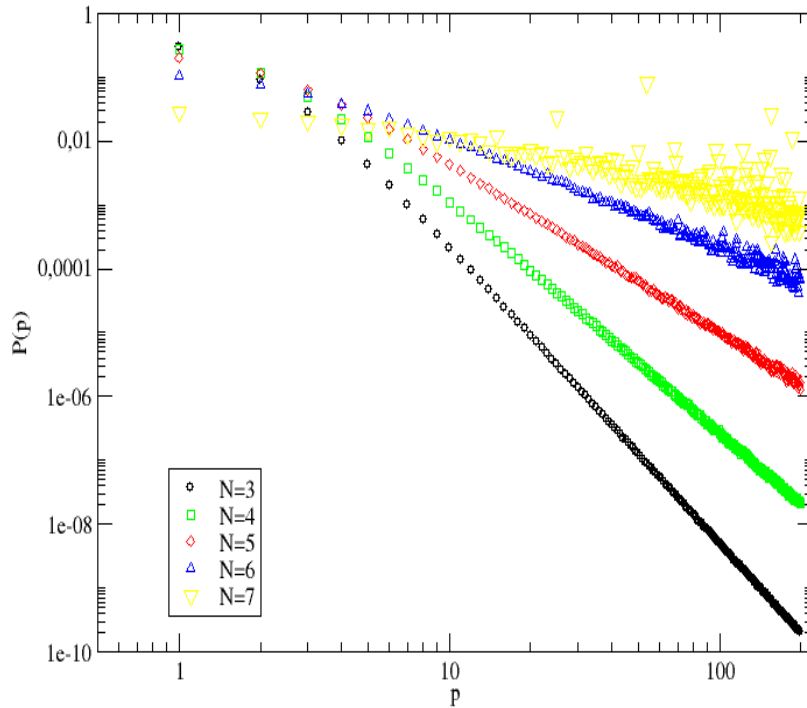
$q=1.4; t=0.4; \gamma=2; n=10e5$



Resultados com potencial ligado

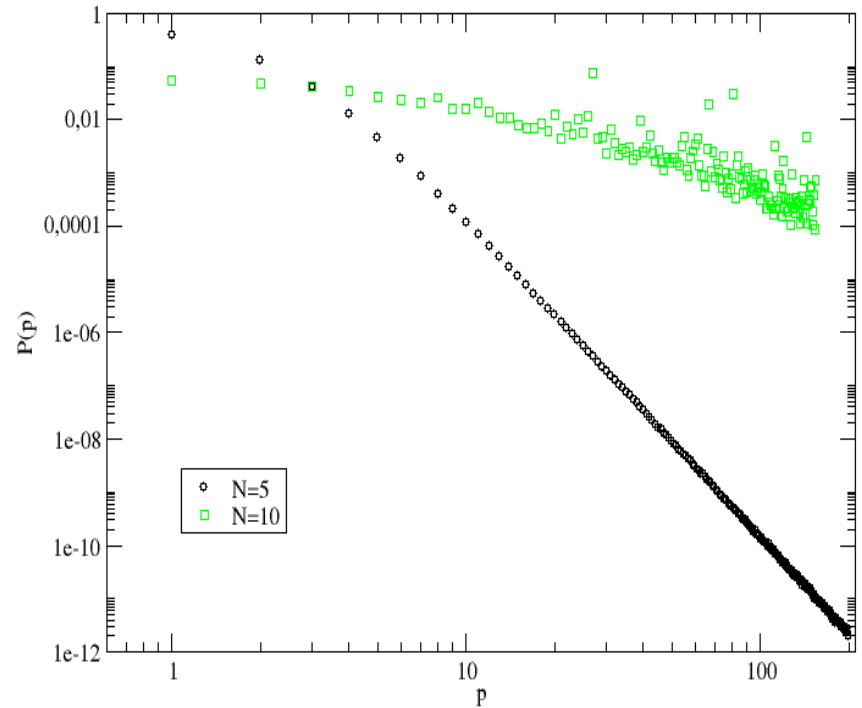
pdf com monte carlo com potencial

$q=1.3; t=0.4; \text{gamma}=2; n=10e5$



pdf com monte carlo com potencial

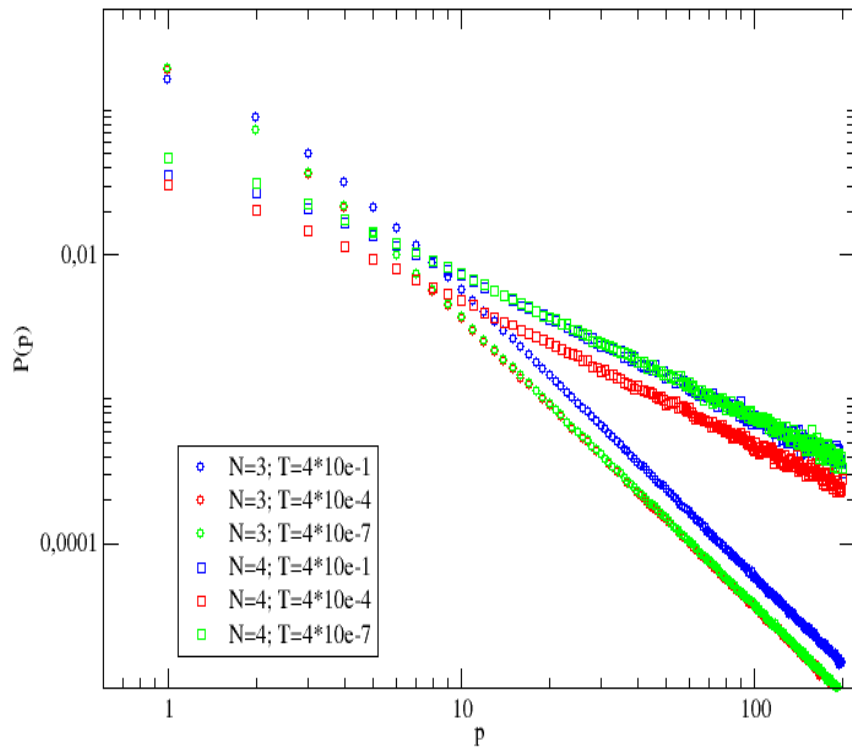
$q=1.2; t=0.4; \text{gamma}=2; n=10e5$



Variando a temperatura e N

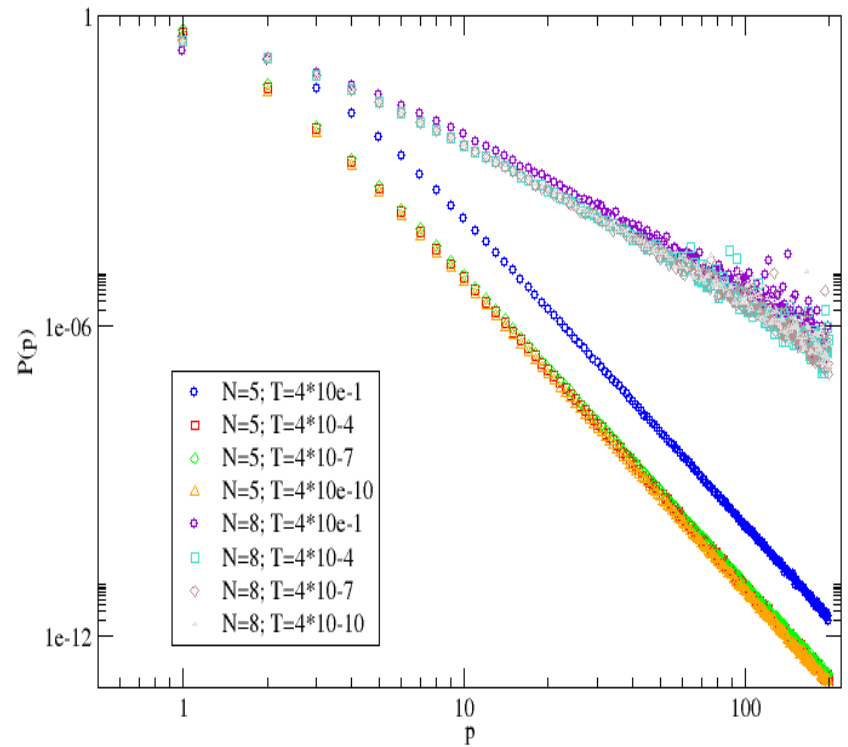
pdf com monte carlo com potencial variando T

$q=1.5$; $\gamma=2$; $n=10e5$



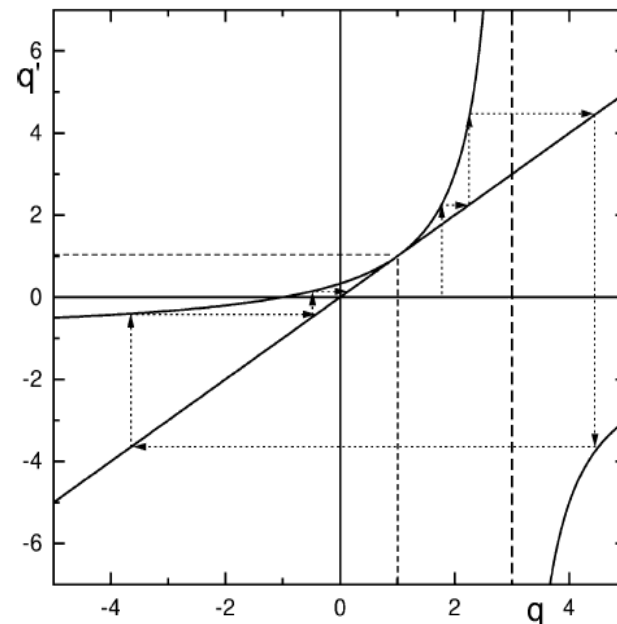
pdf com monte carlo com potencial variando T

$q=1.2$; $\gamma=2$; $n=10e5$



Problemas encontrados

- Mesmo com o potencial, o q de saída continua aumentando
- Dificuldade em aumentar N



Perspectiva:

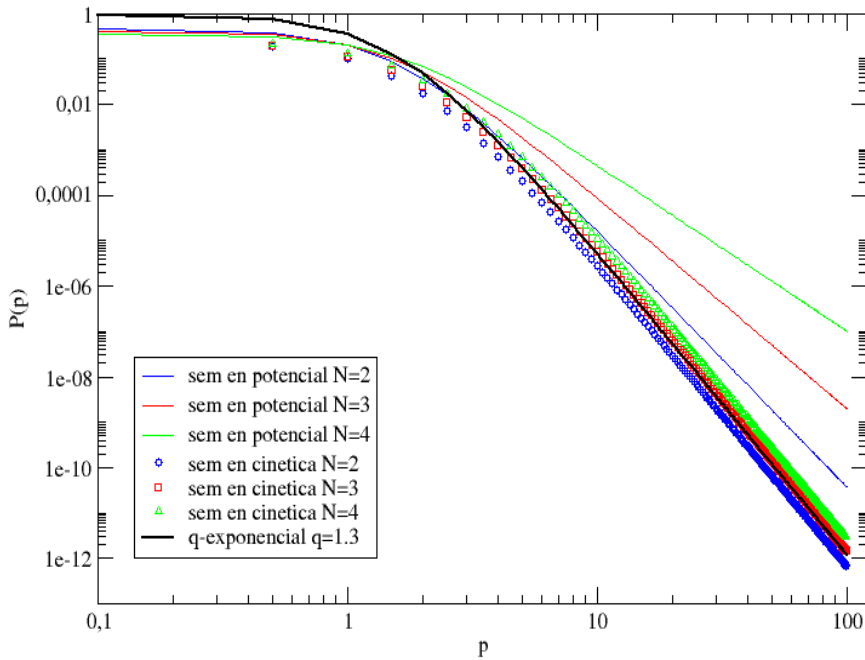
Analisar como a integral em θ influencia nos parâmetros q e β

$$P(p_1) \sim \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta_1 \dots d\theta_N e^{-\frac{\beta^{(n)}}{2} \left(p_1^2 + \frac{1}{N} \sum_{i \neq j}^N (1 - \cos(\theta_i - \theta_j)) \right)}$$

A integral em θ não influencia no q de saída para N pequeno e $q > 1$

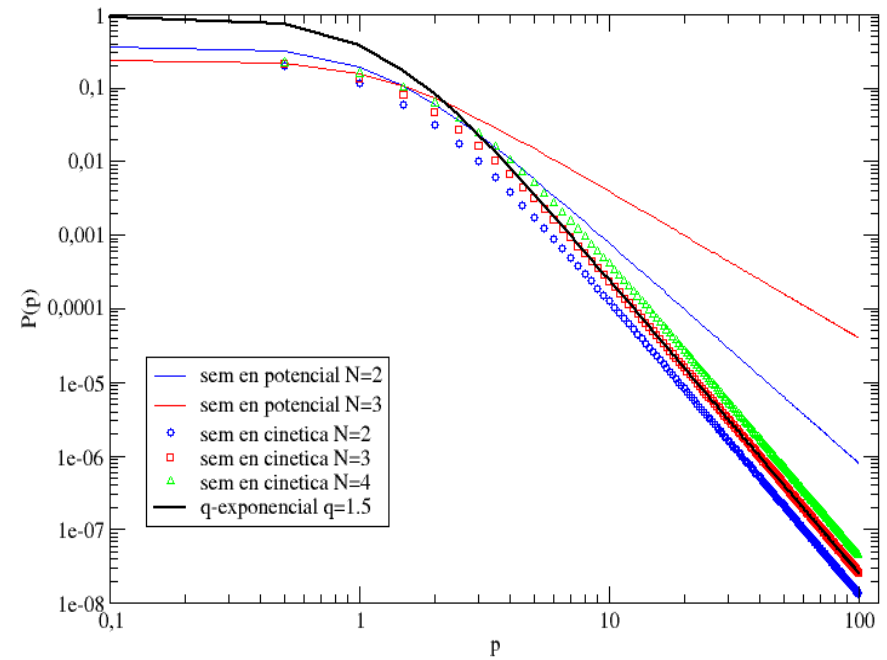
pdf com Monte Carlo

$q=1.3$; $T=0.4$; $\gamma=2$; $n=10^5$



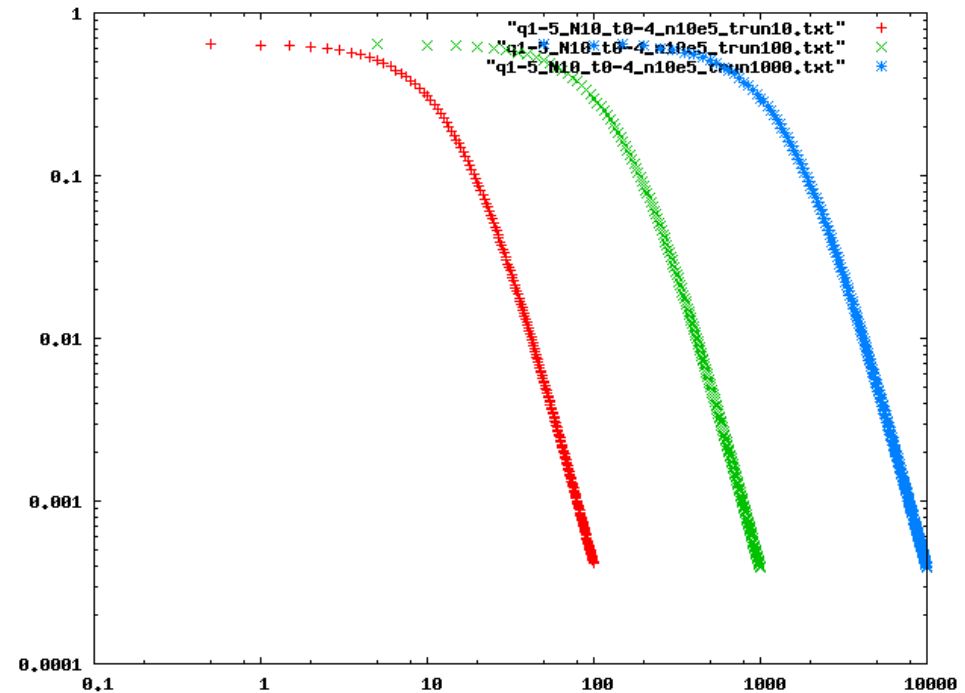
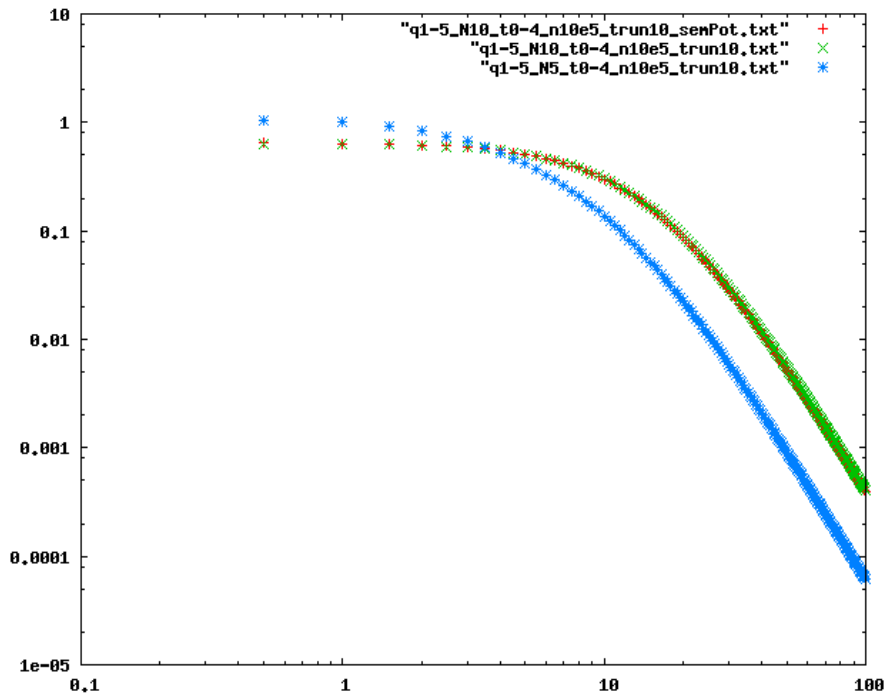
pdf com Monte Carlo

$q=1.5$; $T=0.4$; $\gamma=2$; $n=10^5$



A variável θ é cíclica e integramos em 1 período. Para haver mudança no q de saída, devemos ter efeitos de cauda

Resultado truncando a cauda: o q de saída não depende de N



O número de termos do tipo cosseno aumenta com N^2 , e os termos em p aumenta com N . Talvez com N grande haja algum efeito de θ em q .

Agradecimento: