

Univerza v Ljubljani
Fakulteta *za matematiko in fiziko*



Klasični Monte Carlo

Avtor: Simon Perovnik

Predavatelj: prof. dr. Tomaž Prosen

Asistent: Jaš Bensa

Šesta domača naloga pri Višjih računskih metodah

Ljubljana, april 2023

1 Uvod

V nalogi bomo obravnavali Pottsov model, katerega stacionarna stanja bomo poskusili najti s pomočjo Metropolisovega algoritma, ki temelji na metodi Monte Carlo. Pottsov model je model, ki opisuje interakcijo med spini na mreži. Zamislimo si $N \times N$ dvo-dimenzionalno mrežo gradnikov, katerih spin je vseskozi med 1 in q (q je parameter modela). V odsotnosti zunanega polja je energija takšnega sistema (v okviru Pottsovega modela) enaka

$$E = -J \sum_{\langle r, r' \rangle} \delta_{\sigma_r, \sigma_{r'}}. \quad (1)$$

Energija bo torej minimalna, ko bodo sosednji spini med seboj točno enaki. J je sklopitvena konstanta med spini, vsota pa teče po najbližjih sosedih. V tem modelu lahko definiramo tudi magnetizacijo

$$M = \sum_r e^{2\pi i(\sigma_r - 1)/q}. \quad (2)$$

Zanimala nas bosta tudi susceptibilnost in specifična toplota sistema, ki sta podani z zvezama

$$\begin{aligned} \chi(\beta) &= \beta \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right), \\ c_V(\beta) &= \beta^2 \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right). \end{aligned} \quad (3)$$

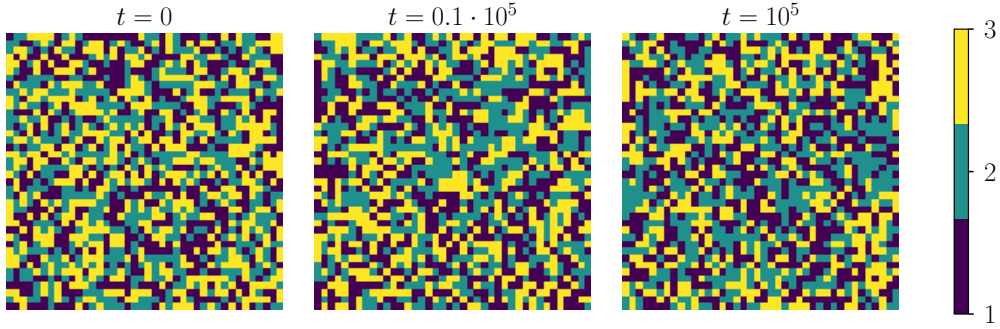
Kot rečeno, bomo sistem simulirali s pomočjo Metropolisovega algoritma, ki poteka nekako tako:

1. Izberemo q in $\beta (= 1/T)$ sistema, ter žrebamo naključno začetno stanje sistema - naključno določimo spin vseh gradnikov, ki pa mora biti znotraj intervala $[1, q]$. Določimo še, koliko časovnih korakov bomo simulirali sistem.
2. V vsakem koraku žrebamo en delec z mreže in mu spin spremenimo v poljubno vrednost z intervala $[1, q]$.
3. Izračunamo ΔE (ker je interakcija lokalna, je dovolj če pogledamo kako se spremenijo prispevki k energiji s štirimi sosedji naključno žrebanega gradnika).
4. V kolikor je $\Delta E < 0$ spremembo sprejmemo in posodobimo vrednost spina v mreži.
5. V kolikor pa je $\Delta E > 0$ žrebamo še eno število z intervala $[0, 1]$ in primerjamo z $e^{(-\Delta E \beta)}$. V kolikor velja, da je žrebano število manjše od omenjenega izraza, korak vseeno sprejmemo in posodobimo vrednost spina v mreži. V nasprotnem primeru korak zavrnemo in se znova vrnemo na korak 2.

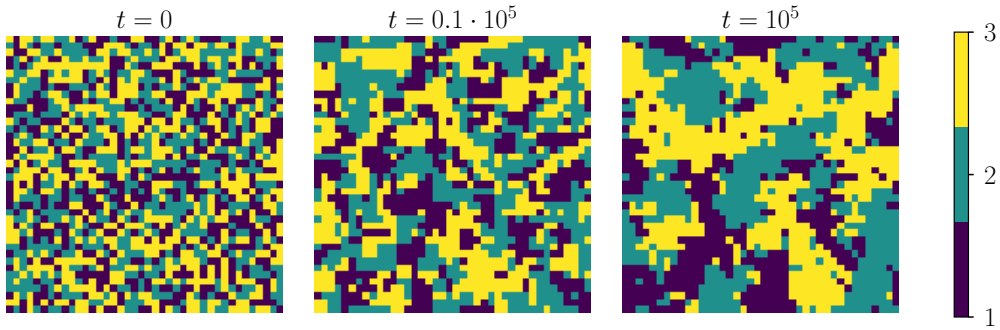
2 Rezultati simulacij

Algoritem deluje tako na osnovi iskanja globalnega minimuma energije preko žrebanja naključnih sprememb, dodatno pa je opremljen z mehanizmom, ki mu pomaga skočiti iz lokalnih minimumov, to je preko načina s katerim sprejmemo tudi korake, ki nam ne znižajo energije. Parameter $\beta = 1/T$ je tako ključnega pomena, saj določi jakost teh termičnih fluktuacij, ki peljejo sistem iz lokalnih minimumov. Če je sistem prehladen (velik β) bo sistem "obtičal" v lokalnem minimumu, če pa bo prevroč (majhen β) pa sistem ne bo našel nobenega minimuma, saj bo ves čas škakal iz njih. Nekaj primerov simulacije je prikazanih na sliki (1). Na začetku je razporeditev velikosti spinov povsem naključna, nato pa se med samo simulacijo začnejo formirati otoki enakega spina, ki nižajo energijo sistema. V kolikor bi sistem razvili do dovolj velikih časov, bi imel pri višjih β celoten sistem enak spin q . Zaradi časovne zahtevnosti takšne simulacije bomo namesto povečanja časa sistem rajši reducirali (izbrali manjšo število gradnikov), saj bomo tako potrebovali manj korakov, da bomo dosegli končno ravnovesno stanje.

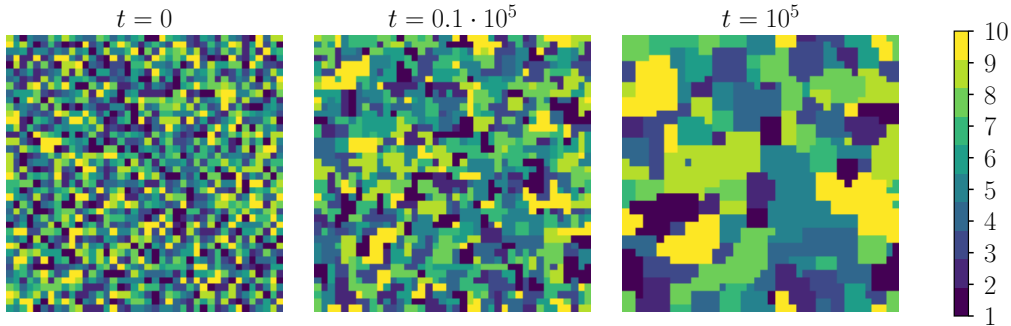
Pottssov model : $q = 3, J = 1, \beta = 0.1, N = 40$



Pottssov model : $q = 3, J = 1, \beta = 1, N = 40$



Pottssov model : $q = 10, J = 1, \beta = 5, N = 40$

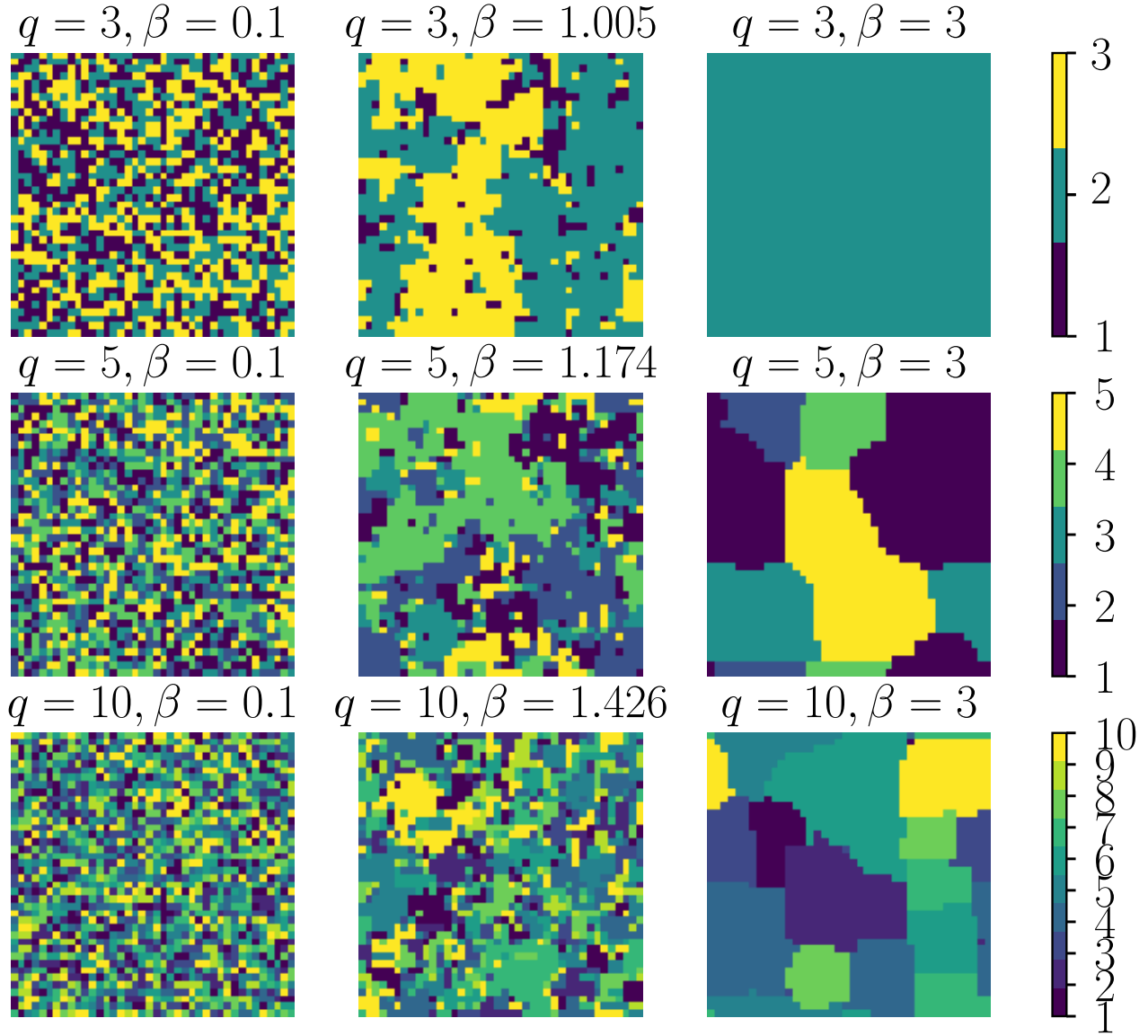


Slika 1: Primeri treh simulacij Pottsovega modela na mreži velikosti $N \times N$ za nekaj različnih β in q . V vsaki vrstici se nahajajo tri slike iz simulacije - prva ustreza začetni inicializaciji.

Na sliki (2) je prikazanih nekaj končnih stanj sistema do katerih smo prišli po 10^6 korakov. Levi stolpec prikazuje sisteme pri $\beta = 0.1$ - sistem je "prevroč", termične fluktuacije so močnejše od težnje sistema po minimizacije energije, ki jo določa Hamiltonian. V sredinskem stolpcu se sistemi nahajajo pri lastni kritični temperaturi (oziroma kritičnem β), ki ga določa enačba

$$\beta_c = \ln(\sqrt{q} + 1). \quad (4)$$

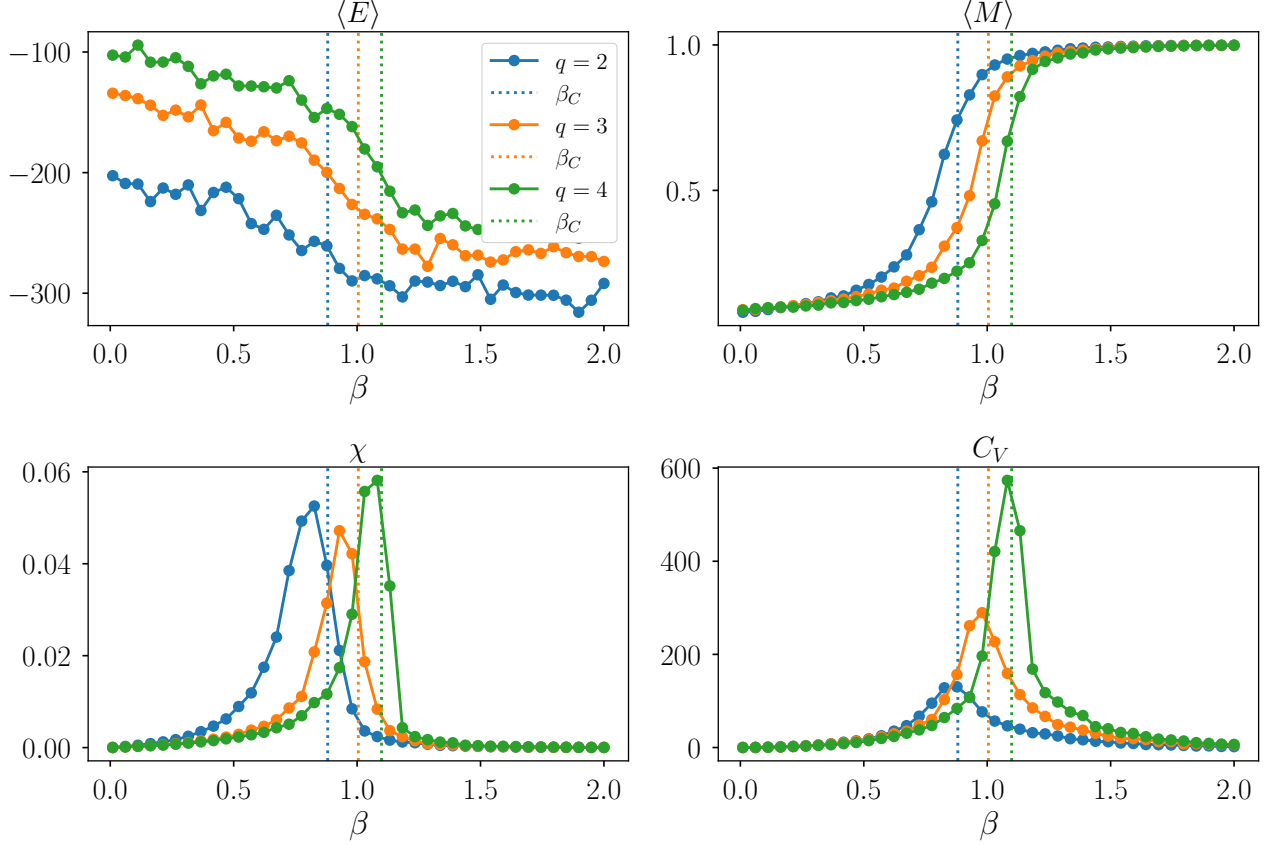
Pri β_c gre sistem čez fazni prehod, kar se vidi tudi s slik - v končnih konfiguracijah se začnejo pojavljati otoki enakega spina, še vedno pa lahko opazimo precej termičnih fluktuacij, ki nekako "luknjajo" območja enakega spina. Ko dalje povečujemo parameter β se pojavi tip rešitev, ki smo jih napovedali tudi prej, celoten sistem prevzame enak spin. To vidimo pri primeru ko je $q = 2$. Pri višjih q bi sicer pričakovali enako ravnovesno stanje, a je tu konvergenca mnogo počasnejša, saj je prostor možnih rešitev precej višje-dimenzionalen. V drugi in tretji vrstici se dobro vidi tudi, da smo privzeli periodične robne pogoje, in se tako območja enakega spina nadaljujejo tudi na drugem robu.



Slika 2: Končna stanja (po 10^6 korakih) simulacij sistemov z različnim maksimalnim q (različne vrstice) in pri različnih vrednostih parametra β (različni stolpci). Prikazana so tudi barvna mapiranja velikosti spinov pri izbranih q .

Poleg končne konfiguracije spinov lahko spremljamo tudi, kakšne so končne vrednosti nekaterih opazljivk sistema. V ta namen bomo pogledali, kako se glede na vrednost parametra β spreminjajo končna energija E , magnetiza-

cija M , susceptibilnost χ in specifična toplota c_V . Slednji dve smo definirali v uvodu naloge. Ker so simulacije intrinzično stohastične bomo gledali časovna povprečja teh spremenljivk. Sistem bomo najprej razvili do časa 10^5 , nato pa na vsakih 500 korakov zapisali vrednosti energije in magnetizacije sistema, nato pa za potrebe izračuna vzeli njihovo povprečje. Primerjali bomo, kako se omenjene količine spreminjajo pri različnih maksimalnih spinih sistema q .



Slika 3: Povprečna končna energija, magnetizacija, susceptibilnost in specifična toplota sistemov pri različnih q in β za mrežo velikosti 10×10 . Z vertikalno črtkano črto so prikazane β_c .

Na sliki (3) so prikazane temperaturne odvisnosti že zgoraj omenjenih količin sistema. Vidimo lahko, da so v splošnem rezultati smiselni, saj se dobro ujemajo s teoretično izračunano β_c , v okolici katerega se odziv sistema vedno spremeni. Z grafa povprečne končne energije (zgoraj levo) lahko vidimo da pri vsaki krivulji v okolici β_c pride do prevoja, podobno se zgodi tudi pri grafu magnetizacije (zgoraj desno), kjer so prehodi iz povprečne magnetizacije 0 na 1 še bolj jasni. Ko je povprečna magnetizacija enaka 1 to pomeni, da so vsi spini enako veliki, kar se zgodi pri $\beta > \beta_c$, kar smo opazili tudi že iz prej izvedenih simulacij. Z grafa energije lahko preberemo tudi, da končne energije vseh sistemov niso enake, kar je smiselno, saj se stanja ne relaksirajo nujno v stanja z enakim spinom.

Grafa susceptibilnosti in specifične toplote (spodaj) se prav tako zelo lepo ujemata z β_c , kjer dobimo v obeh primerih maksimum. Ujemanje je sploh dobro pri grafu $c_V(\beta)$, medtem ko dobimo pri susceptibilnosti nekoliko slabše ujemanje. Zanimivo je opaziti tudi, da je c_V pri $q = 4$ veliko višja kot pri ostalih dveh, kar je verjetno povezano z dejstvom, da je v tem primeru fazni prehod nezvezen.