

Simulaciones Monte Carlo en el modelo de Potts de q estados en una red cuadrada

Proyecto final de Simulaciones computacionales
Inés Corte

15 de noviembre de 2019

1. Resumen

Con el fin de explorar algoritmos más allá del tradicional Metrópolis-Hastings, utilizamos el algoritmo Heat Bath para realizar simulaciones de Monte Carlo en el modelo de Potts de q estados en una red cuadrada. Estudiamos el orden de las transiciones de fase para distintos valores de q y verificamos que para $q = 2$ se reobtiene lo observado en el modelo de Ising 2D. Por último, comparamos la eficiencia de este algoritmo frente a la de Metrópolis para este sistema en particular.

2. Modelo de Potts

El modelo de Potts es una generalización del modelo de Ising y la diferencia entre ellos radica en que los espines s_i de en cada sitio de la red puede tomar más de dos valores discretos. Estos valores usualmente son representados con números naturales, de modo que un modelo de Potts de q estados es aquel donde cada espín puede tomar los valores enteros $s_i = 1, \dots, q$. Cada par de espines vecinos contribuye en $-J$ al hamiltoniano si poseen el mismo valor, y en cero en caso contrario. El hamiltoniano de este modelo a campo nulo puede escribirse como

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j}, \quad (1)$$

Podemos ver que para $q = 2$ el modelo de Potts es equivalente al modelo de Ising a menos de una constante aditiva en el hamiltoniano reescribiendo (1) como

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} 2 \left(\delta_{s_i s_j} - \frac{1}{2} \right) - \sum_{\langle ij \rangle} \frac{1}{2} J. \quad (2)$$

Resulta entonces que $2(\delta_{s_i s_j} - \frac{1}{2}) = \pm 1$, donde el positivo (negativo) corresponde al caso donde s_i y s_j son iguales (distintos), mostrando la equivalencia de ambos modelos. A partir de (2), observando la relación

$$-\beta H = K_{Ising} \sum_{\langle ij \rangle} \left(2\delta_{s_i s_j} - \frac{1}{2} \right) = K_{Potts} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j}$$
$$2K_{Ising} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j} - zK_{Ising} = K_{Potts} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j}$$

donde z es el número de coordinación de la red, obtenemos que $T_{Potts} = \frac{1}{2} T_{Ising}$. En este modelo es que existe un valor crítico q_c a partir del cual la transición de fase pasa de ser de segundo orden a primer orden.

Para temperaturas por debajo de la temperatura crítica T_c se rompe la simetría Z_q , de modo que por debajo los espines se encontrarán mayoritariamente en algún estado (no necesariamente el que corresponda a menor energía). Es por esto último que se define el parámetro de orden como

$$\psi = \frac{q\rho_{max} - 1}{q - 1} \quad (3)$$

donde ρ_{max} es la proporción de espines que están en el estado más poblado. Luego, para temperaturas mayores a T_c , donde todos los estados son equiprobables, $\psi = 0$ mientras que para temperaturas por debajo existirá un estado más poblado que el resto haciendo $\psi \neq 0$.

La solución exacta es conocida para el modelo de Potts en una red 2D de geometría arbitraria y la temperatura crítica T_c [1] (con $J = 1$) resulta

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

En este caso, se estudió el modelo de Potts 2D para una red cuadrada, en la que $z = 4$. Para realizar las simulaciones de Monte Carlo se tomaron $J = 1$ y $k = 1$ y se utilizó el algoritmo Heat Bath.

3. Heat Bath

Este algoritmo es *single-spin flip*, al igual que el Metrópolis-Hastings, pero que es más eficiente en hallar los estados energéticamente deseados de los espines. En primer lugar, se elige un espín k al azar de la red, y luego se elige un nuevo valor s_k independientemente de su valor inicial. Esta elección se realiza comparando un número aleatorio entre 0 y 1 con la probabilidad acumulada de los pesos de Boltzmann asociados a los distintos valores de espín. De este modo, a cada espín n entre 1 y q se le asigna una probabilidad

$$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_{m=1}^q e^{-\beta E_m}},$$

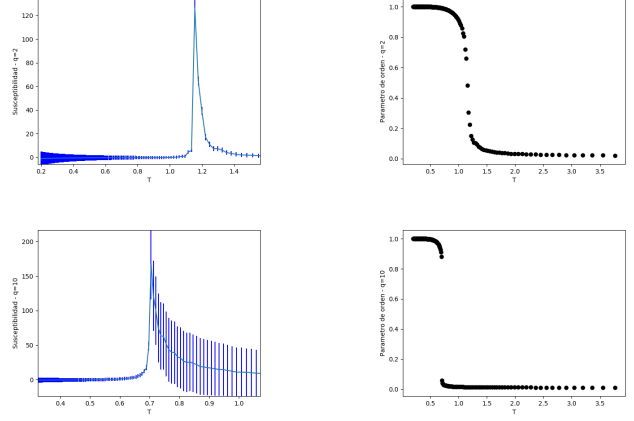
siendo E_n la energía del sistema cuando $s_k = n$.

Este algoritmo es mucho más eficiente que el de Metropolis para valores grandes de q ya que elige más seguido aquellos estados que tienen mayores pesos de Boltzmann.[2]

Utilizando este algoritmo, se hicieron simulaciones para $q = 2, 10$ y tamaños $L = 20, 50, 100$ para ver cómo se modifica el orden de la transición de fase en base al número q de estados. A su vez, se compara la eficiencia de Heat Bath frente a Metropolis-Hastings a una dada temperatura comparando los pasos Monte Carlo necesarios en cada caso para que el sistema termalice.

4. Resultados

Se presentan los gráficos de la energía por sitio, el parámetro de orden y la susceptibilidad χ para distintos tamaños y distintos valores de q para mostrar el orden de la transición de fase en cada caso. Las incertezas para χ fueron calculadas utilizando el método *bootstrap* visto en clase y presente en la bibliografía de referencia [2].

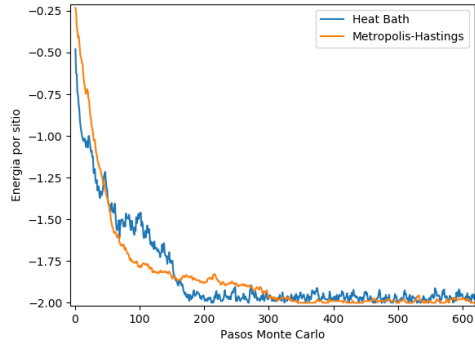


Podemos ver que la transición para $q = 2$ es de segundo orden, ya que la energía no presenta discontinuidades pero χ posee un pico cuyo máximo aumenta con el tamaño de la red.

Para $q = 10$, en cambio, se observa una marcada transición de primer orden, teniendo en cuenta que en χ el pico no crece notablemente con el número de sitios en la red entre $L = 50$ y $L = 100$.

Las temperaturas de transición observadas para $q = 2$ y $q = 10$ fueron 1,15 y 0,7 respectivamente. Al calcular los valores analíticos de estas a partir de (2), se obtienen para cada caso aproximadamente 1,135 y 0,701. Luego, los resultados obtenidos en las simulaciones son consistentes con los valores obtenidos en la solución exacta.

Por último, en la figura 4 se comparan el desempeño del algoritmo Metropolis-Hastings con el de Heat Bath para un número grande de estados (en este caso, $q = 20$) en una red de 20×20 a $\beta = 2$ vemos que Heat Bath termaliza en los 180 pasos de Monte Carlo completos a la red mientras que la energía medida utilizando Metropolis-Hastings requiere 350 pasos Monte Carlo. Esto nos indica que al aumentar el número de estados del modelo de Potts es preferible utilizar el algoritmo Heat Bath pues posee menor tiempo de cómputo.



5. Conclusiones

Finalmente, al comparar el desempeño del algoritmo Metropolis-Hastings con el de Heat Bath para un número grande de estados, vemos que es preferible utilizar el algoritmo Heat Bath ya que requiere menos pasos Monte Carlo para llegar al equilibrio.

Referencias

- [1] F. Y. Wu, “The potts model,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 54, pp. 235–268, Jan. 1982.
- [2] M. Newman and G. Barkema, *Monte carlo methods in statistical physics chapter 1-4*. Oxford University Press: New York, USA, 1999.