

Projekt 2

Ising Modell: Monte Carlo Sampling auf dem Gitter, Phasenübergänge (Kurt Langfeld)

2.1 Das Ising Modell

2.1.1 Allgemeines

Das Ising Modell realisiert eine sehr vereinfachte Vorstellung von einem Ferromagneten in einem Modell. Wir werden untersuchen, inwieweit das vereinfachte Bild bereits in der Lage ist, komplexe Eigenschaften des Ferromagneten wie “permanente Magnetisierung (Stabmagnet)” und “Phasenübergang” zu beschreiben. Es geht dabei darum, mit möglichst einfachen Mitteln (Modell) ein vielfältiges physikalisches System zu verstehen, und weniger darum, ein konkretes Material genau zu beschreiben. Wir werden sehen, dass obwohl die zugrundeliegende physikalische Beschreibung sehr leicht zu verstehen ist, für die konkrete mathematische Berechnung ein numerisches Verfahren –das Monte Carlo Sampling– angebracht ist.

Das Ising Modell ist also ein einfaches Modell für ein ferromagnetisches Material in 2 Raumdimensionen. Wir nehmen dazu ein quadratisches Gitter mit jeweils n Gitterplätzen in x und y Richtung an. Auf jedem dieser Gitterplätze α befindet sich ein Spin S_α (ein magnetisches Moment), der sich entweder parallel $S_\alpha = 1$ oder antiparallel zur z -Achse $S_\alpha = -1$ orientieren kann. Ein komplettes System von Spins mit gegebener Ausrichtung heißt *Konfiguration*. Um jetzt unsere Vorstellung von einem ferromagnetischen Material zu realisieren, nehmen wir für eine Spinkonfiguration folgende Energie an:

$$H(S) = -B \sum_{\alpha} S_{\alpha} - J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} S_{\alpha} S_{\beta} \quad (2.1)$$

Dabei bezeichnet der Summationsindex $\langle \alpha \beta \rangle$ die Summation über alle Paare von Gitterplätzen, die direkt benachbart sind. Anschaulich bedeutet diese Gleichung, dass energetisch günstiger ist, wenn zwei benachbarte Spins gleich orientiert sind (egal ob in positive oder negative z -Richtung). Zusätzlich kann man Energie gewinnen, wenn die Spins parallel zu einem äußeren Magnetfeld B ausrichtet, das in positive z -Richtung

zeigt. Wir werden sehen, dass diese einfache Vorstellung von einem Ferromagneten bereits viele seiner Eigenschaften beschreiben kann.

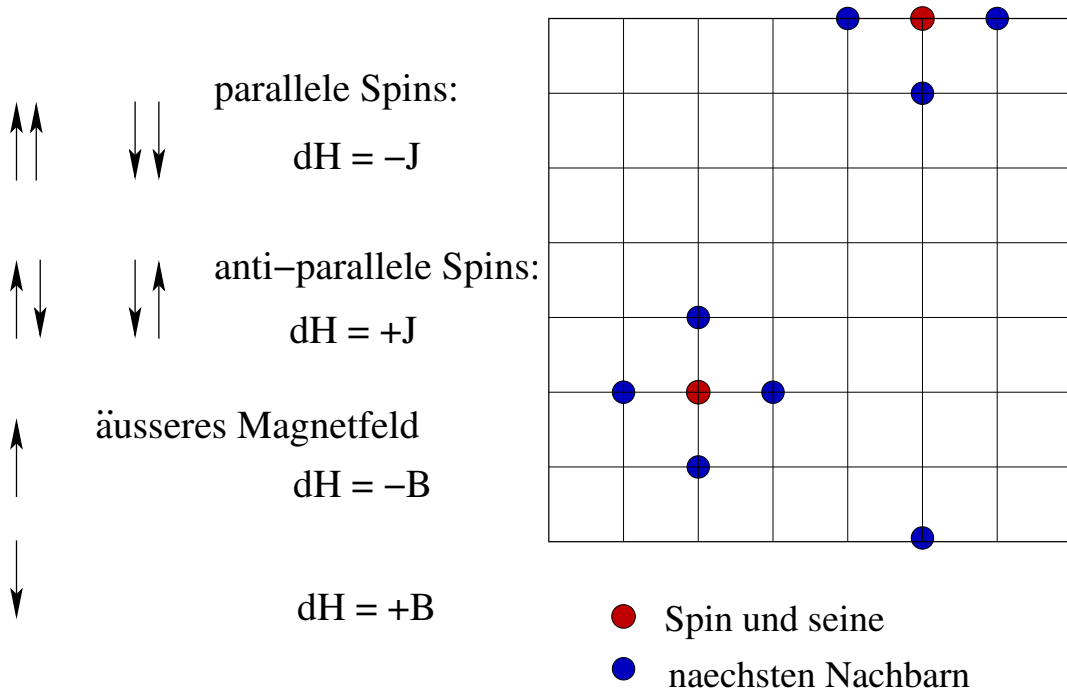


Abbildung 2.1: Wechselwirkungen der Spins (links), und eine Illustration der periodischen Randbedingungen (rechts).

Um Effekte zu Minimieren, die vom Rand des Gitters stammen, nehmen wir zusätzlich periodische Randbedingungen an, d.h.: Ein Spin am unteren Rand des Gitters besitzt einen direkten Nachbarn am entsprechenden Gitterplatz des oberen Randes. Das gleiche gilt für den linken und den rechten Rand. Eine Illustration der nächsten Nachbar Wechselwirkung findet man in Abbildung 2.1.

Bei vorgegebener Temperatur T und Magnetfeld B in z -Richtung ist die Magnetisierung dieses Spingitters durch

$$M = \sum_S w(S) \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha} \right) \quad (2.2)$$

gegeben. Dabei geht die erste Summe über alle möglichen Spinkonfigurationen S des Gitters und die zweite Summe berechnet bei vorgegebener Konfiguration S die gesamte Spinprojektion in z -Richtung. Die Größe $w(S)$ lässt sich als Wahrscheinlichkeit interpretieren, dass man eine gegebene Spinkonfiguration antrifft. Diese Gewichtsfunktion ergibt sich aus den Regeln der Thermodynamik zu

$$w(S) = \frac{\exp(-H(S)/T)}{\mathcal{Z}} \quad (2.3)$$

mit der Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \sum_S \exp(-H(S)/T) . \quad (2.4)$$

Entsprechend kann man auch die mittlere Energie des Systems ausrechnen:

$$E = \sum_S w(S) H(S). \quad (2.5)$$

2.1.2 Die Mean-field Näherung

Im folgenden werden wir die Magnetisierung näherungsweise berechnen, um eine Idee über die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung zu bekommen. Ausgangspunkt der sogenannten Mean-field Näherung ist die Energie (2.1):

$$H(S) = -B \sum_{\alpha} S_{\alpha} - J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} S_{\alpha} S_{\beta} \approx -B \sum_{\alpha} S_{\alpha} - J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} S_{\alpha} \langle S \rangle \quad (2.6)$$

$$= -(B + 4J \langle S \rangle) \sum_{\alpha} S_{\alpha}. \quad (2.7)$$

Dabei haben wir die Spins der “nächsten Nachbarn” durch den Erwartungswert

$$\langle S \rangle = \frac{1}{n} \sum_{\alpha} S_{\alpha}$$

ersetzt (n ist die Gesamtzahl der Spins). Die Zustandssumme läßt sich nun analytisch ausrechnen:

$$\mathcal{Z} = \left[\sum_{S=\pm 1} \exp\left\{ \frac{(B + 4J \langle S \rangle)}{T} S \right\} \right]^n = \left[2 \cosh \frac{B + 4J \langle S \rangle}{T} \right]^n.$$

Ein Vergleich von (2.2) und (2.4) zeigt, dass die Magnetisierung leicht berechnet werden kann, wenn die Zustandssumme bekannt ist:

$$M = T \frac{d \ln \mathcal{Z}}{dB}.$$

Setzen wir hier die Meanfield Näherung für die Zustandssumme ein, so erhalten wir die sogenannte Selbstkonsistenzbedingung

$$\langle S \rangle = \tanh \left(\frac{B + 4J \langle S \rangle}{T} \right). \quad (2.8)$$

Diese nichtlineare Gleichung dient der Berechnung des Erwartungswerts $\langle S \rangle$ als Funktion der Temperatur T und des äußeren Magnetfeldes B .

2.2 Importance Sampling

2.2.1 Generierung von Zufallszahlen

Typischerweise wird zunächst einmal eine Folge von Zufallszahlen aus dem Bereich der natürlichen Zahlen zwischen 0 und $M - 1$ generiert durch die Vorschrift

$$J_{n+1} = \text{Mod}(J_n * I_1 + I_2, M) \quad (2.9)$$

daraus ergeben sich dann Zufallszahlen im Intervall $[0, 1]$ durch

$$x_n = \frac{J_n}{M-1}$$

Die Qualität des Zufallszahlengenerators hängt natürlich von der Wahl der Konstanten I_1, I_2, M in (2.9) ab. Dazu stellen wir Ihnen Programme zur Verfügung: `ran3.x` für FORTRAN77 (`x=f`), FORTRAN90 (`x=f90`) und C (`x=c`) für einen Zufallszahlengenerator, der Zufallszahlen im Bereich $[0,1]$ generiert z.B. durch den F77 Funktionsaufruf

```
x = RAN3(ISEED)
```

Dabei ist ISEED eine (negative) Integer Zahl, die zum Start einzugeben ist und dann immer wieder "upgedatet" wird.

2.2.2 Monte-Carlo Berechnung von Integralen

Betrachten wir Integrale der Form

$$I = \frac{\int f(x) w(x) dx}{\int w(x) dx}, \quad w(x) \in [0, 1].$$

Da $w(x)$ positiv definit ist, kann $w(x) dx$ als die Wahrscheinlichkeit interpretieren, dass ein Wert x im Intervall $[x, x+dx]$ auftaucht, und I erhält Bedeutung als Erwartungswert:

$$I = \langle f \rangle.$$

Man erzeugt nun ein Folge von Werten, $x_1 \dots x_N$, die gemäß der Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x)$ verteilt sind, und findet eine Näherungswert (Estimator) für das Integral durch:

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i).$$

Der Fehler ϵ_f für den Wert I läßt sich ebenfalls abschätzen mit:

$$\epsilon_f^2 = \sigma_i^2 \approx \frac{1}{N} \sigma_f^2 = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^2(x_i) - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right)^2 \right] \quad (2.10)$$

Betrachten wir das Beispiel

$$I = 4 \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx = \pi \quad (2.11)$$

und wählen:

$$w(x) = 1, \quad f(x) = \sqrt{1-x^2}.$$

Um nun eine Folge von x Werten zu erzeugen, geht man in der Praxis folgendermaßen vor: man bestimmt ein x_i (mit gleicher Wahrscheinlichkeit, $w(x) = 1$) aus dem Intervall $[0, 1]$ (siehe vorheriges Unterkapitel). Für eine Folge $x_1 \dots x_N$ berechnen man $\langle f \rangle, \langle f^2 \rangle$ und somit eine Abschätzung für I und den zugehörigen statistischen Fehler ϵ_f .

Etwas komplizierter ist das Beispiel:

$$I = \frac{\int_0^{\pi/2} \sin x \cos x dx}{\int_0^{\pi/2} \cos x dx} = \frac{1}{2}. \quad (2.12)$$

Hier setzen wir:

$$f(x) = \sin x, \quad w(x) = \cos x.$$

Um die Folge $x_1 \dots x_N$ zu erzeugen, wähle man zunächst einen Kandidaten x (mit gleicher Wahrscheinlichkeit) aus dem Intervall $[0, \pi/2]$, und berechne $p = w(x)$. Nun bestimme man eine gleichverteilte Zufallszahl q aus dem Intervall $[0, 1]$. Wenn $q < p$ gilt, akzeptieren wir den Vorschlag x als zulässiges Glied der Folge. Wenn nicht, wiederholen wir die Prozedur bis wir ein neues Glied der Folge gefunden haben.

Der Vorteil der Monte-Carlo Integration ist, dass diese sich sehr einfach auf hochdimensionale Integrale erweitern läßt. Der Nachteil besteht in der geringen Genauigkeit des Verfahrens: während eine Integral-Diskretisierung eine Genauigkeit der Ordnung $\mathcal{O}(1/N)$ liefern, ist die Genauigkeit des MC Verfahrens nur von der Ordnung $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$.

2.2.3 Der Heat-Bath Algorithmus

Ausgangspunkt für die statistische Beschreibung des Ising Spin Systems ist die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \sum_{S=\{S_x\}} \exp \left(b \beta \sum_x S_x + \beta \sum_{\langle xy \rangle} S_x S_y \right) \quad (2.13)$$

wobei wir folgende Abkürzungen eingeführt haben:

$$\beta = \frac{J}{T}, \quad b = \frac{B}{J}.$$

Wir betrachten ein quadratische Gitter, das $n = L^2$ Spinplätze trägt. Zusätzlich nehmen wir periodische Randbedingungen an.

Der Heat-Bath Algorithmus gehört wie der Metropolis Algorithmus zur der Klasse der *Local-Update* Algorithmen. Man geht wie folgt vor:

1. Man wählt zufällig einen Gitterpunkt x_0 . Der Update des zugehörigen Spins S_{x_0} wird im folgenden studiert.
2. Alle anderen Spins werden für den Update Schritt als "fest" betrachtet. Diese bilden das sogenannte Heat-Bath. Der Anteil, der der Spin S_{x_0} zur Gesamtenergie beiträgt, ist gegeben durch:

$$H = \text{const.} - \beta h_0 S_{x_0}, \quad h_0 = \sum_{x \in \langle xx_0 \rangle} \sigma_x + b \quad (2.14)$$

3. Mit der Wahrscheinlichkeit

$$p = \frac{\exp\{\beta h_0\}}{\exp\{-\beta h_0\} + \exp\{\beta h_0\}} \quad (2.15)$$

wird der Spin σ_{x_0} auf 1 gesetzt. Dazu wird eine Zufallszahl $z \in [0, 1]$ erzeugt. Gilt $z < p$, wird σ_{x_0} auf 1 gesetzt, andernfalls auf -1 .

4. Man wähle einen neuen Gitterpunkt x_0 und mache mit Punkt 1 weiter. Wenn der Update an jedem Gitterpunkt vollzogen ist, spricht man von einer Iteration.

Üblicherweise werden zu Beginn Iterationen ausgeführt, um das Spinsystem ins Gleichgewicht zu bringen ("Thermalisieren"). Desweiteren werden "dummy" Iterationen zwischen zwei Messungen ausgeführt, um die Korrelationen zwischen den Spinsamples zu reduzieren.

Würde man versuchen, die Summe über alle Spinkonfigurationen in (2.13) direkt auszuführen, würde man schnell an die Grenze des machbaren stoßen: da jeder Gitterplatz zwei Spineinstellungen tragen kann, gibt es insgesamt 2^n Spinkonfigurationen. Für ein nicht allzugroßes Gitter von $n = L^2 = 50^2 = 2500$ Spinplätzen sind das immerhin $\approx 10^{15}$ Spinkonfigurationen. Man stellt jedoch fest, dass das statistische Gewicht für die meisten der Konfigurationen verschwindend gering ist. Die Idee des "Importance Sampling" besteht nun darin, nur Konfigurationen zu berücksichtigen, die über ein signifikantes Gewicht verfügen. Der Heat-Bath Algorithmus leistet nun gerade dies: aus einer relevanten Konfigurationen wird durch den Update-Schritt eine weitere relevante erzeugt. Natürlich muß man sicherstellen, dass die erzeugten Konfigurationen statistisch unabhängig sind, und dass *alle* relevanten Konfigurationen erzeugt werden. Wir werden sehen, dass dieses in der Nähe des Phasenübergangs keine leichte Aufgabe ist.

2.3 Aufgaben:

2.3.1 Meanfield Näherung

Gehen Sie von der Meanfield-Gleichung (2.8) aus und betrachten Sie zunächst den Fall $B = 0$. Für welchen Temperaturbereich besitzt die Selbstkonsistenzgleichung außer $\langle S \rangle = 0$ eine weitere Lösung $\langle S \rangle \neq 0$? Lösen Sie die Selbstkonsistenzgleichung (beispielsweise mit einem Newton-Verfahren), und bestimmen Sie $\langle S \rangle$ als Funktion von $\beta \in [0.1, 1]$ für die Fälle $b = 0$, $b = 0.1$ und $b = 0.5$. [Hinweis: $\beta = J/T$, $b = B/J$]

2.3.2 MC Integrale

Berechnen Sie mit MC-Methoden eine Näherung für die Integrale I in (2.11) und (2.12). Bestimmen Sie jeweils den Estimator I und den zugehörigen Fehler ϵ_f für $N = 10, 100, 1000, 10^4$. Vergleichen Sie jeweils mit dem exakten Resultat.

2.3.3 Heat-Bath Algorithmus

Schreiben Sie ein Programm, das den Heat-Bath Algorithmus zur Simulation des 2-dimensionalen Ising Modells implementiert. Verwenden Sie ein 30×30 Gitter und periodische Randbedingungen. Eingabeparameter sind β und b .

- Setzen Sie zunächst $b = 0$. Sei $s_k = \frac{1}{n} \sum_x S_x^{(k)}$ der über das Volumen gemittelte Spinerwartungswert, ausgewertet mit dem Spinensemble der k -ten Iteration. Plotten Sie s_k als Funktion von k für $\beta = 0.3, 0.34, 0.38, 0.4, 0.44$ und schätzen Sie ab, wann das Spinsystem das "thermische" Gleichgewicht erreicht hat. Starten Sie dazu einmal mit einem Spinensemble $S_x = 1, \forall x$ (cold ensemble) und einmal mit einem Ensemble aus zufallsverteilten Spins (hot ensemble) und beobachten Sie, ab welchem k beide Ensembles etwa das gleiche s_k liefern.
- Bestimmen Sie mit dem Heat-Bath Algorithmus $\langle S \rangle$ als Funktion von $\beta \in [0.1, 1]$ für die Fälle $b = 0, b = 0.1$ und $b = 0.5$. Vergleichen Sie mit den Ergebnissen der Meanfield-Näherung.

2.4 Theorie der Phasenübergänge

Man spricht von einem Phasenübergang, wenn sich der Zustand von Materie qualitativ ändert, sobald ein äußerer Parameter einen kritischen Wert erreicht. Ein allgemein bekanntes Beispiel ist der Phasenübergang von flüssigem Wasser zu Wasserdampf, wenn die Temperatur einen kritischen Wert von $\approx 100^0 C$ erreicht. Ein anderes Beispiel bietet der Ferromagnet: die Wechselwirkung zwischen den Spins bevorzugt eine Gleichausrichtung. Bei kleinen Temperaturen liegt der Ferromagnet daher in einer geordneten Phase vor: Der Magnet besteht aus Weißchen Bezirken, in denen die Spins praktisch in die gleiche Richtung zeigen. Wird eine kritische Temperatur (Curie-Temperatur) überschritten, so findet ein Übergang zu einer ungeordneten Phase statt: die Spins sind willkürlich orientiert; die permanente Magnetisierung des Magneten verschwindet. Wir werden sehen, wie man auf der Basis von numerischen Simulationen das Verhalten des Ferromagneten qualitativ verstehen kann.

Stellen wir uns vor, wir befinden uns in der ungeordneten Phase des Magneten in der Nähe der kritischen Temperatur T_c . Wenn wir die Temperatur etwas vermindern, breitet sich die Information der Gleichorientierung der Spins über das ganze Spingitter aus. Dieses Gedankenexperiment macht uns klar, dass die räumliche Korrelation der Spins groß wird, wenn wir die kritische Temperatur erreichen. Um dieses Phänomen zu quantifizieren, führt man die Korrelationslänge ξ mit Hilfe der Korrelationsfunktion ein:

$$\langle \sigma(x) \sigma(y) \rangle \propto \exp \left\{ -\frac{|x - y|}{\xi} \right\}. \quad (2.16)$$

Die Korrelationslänge ξ ist offensichtlich ein Maß für die räumliche Entfernung, innerhalb derer die Spins noch ungefähr gleich ausgerichtet sind. Nahe des Phasenübergangs $T \gtrsim T_c$ wird ξ sehr groß. Im Falle des Ferromagneten wird die Grösse von ξ jedoch

durch die Grösse der Weißschen Bezirke beschränkt: Die Korrelationslänge bleibt endlich; man spricht von einem Phasenübergang *1. Ordnung*. Bei einem Phasenübergang zweiter oder höherer Ordnung divergiert ξ für $T \rightarrow T_c$,

$$\xi \approx \xi_+ \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|^{-\nu}, \quad (T \gtrsim T_c). \quad (2.17)$$

Durch das Anwachsen von ξ für $T \approx T_c$ kommt es oft vor, dass ξ am Phasenübergang die dominante Längenskala ist: das Anwachsen der Korrelationslänge wird somit in vielen "abgeleiteten" Größen, wie der Wärmekapazität C oder der magnetischen Suszeptibilität χ , beobachtet. Im Falle eines Phasenübergangs *2. Ordnung* findet man beispielsweise

$$C \approx C_0 \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|^{-\alpha}, \quad \chi \approx \chi_0 \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|^{-\gamma}, \quad (T \gtrsim T_c).$$

Die sogenannten "kritischen" Exponenten ν , α , γ sind charakteristisch für die Natur der Freiheitsgrade (und der Anzahl der Raum-Zeit Dimensionen). Aufgabe der Physik ist es nun, ausgehend von der mikroskopisch bekannten Spin-Spin Wechselwirkung, die kritische Temperatur T_c , die Grösse der Weißschen Bezirke, beziehungsweise die kritischen Exponenten vorherzusagen. Dabei spielen numerische Simulationen, wie wir sie in den nächsten Abschnitten kennenlernen werden, eine große Rolle.

2.5 Die Krankheit: Autokorrelationen

Damit diese numerische Prozedur zur Bestimmung der Spinensembles die Zustandssumme korrekt widerspiegelt, ist es notwendig, dass die verschiedenen Spinensembles *statistisch unabhängig* sind. Um die Abhängigkeit der verschiedenen Spinensembles voneinander zu quantifizieren, führen wir die über den Raum gemittelte Magnetisierung M^k ein, die mit dem Spinensemble der k -ten Iteration erzeugt wurde. Ein Maß für die statistische Abhängigkeit liefert die Autokorrelationsfunktion

$$A(j) = \left\langle M^k M^{k+j} \right\rangle - \left\langle M^k \right\rangle \left\langle M^{k+j} \right\rangle, \quad (2.18)$$

wobei die Mittelung in (2.18) jetzt über die verschiedenen Spinensembles zu nehmen ist. Die Autokorrelationsfunktion ist unabhängig von k , wenn das Spinsystem hinreichend thermalisiert wurde. Im Idealfall sind die Konfigurationen statistisch unabhängig, und $A(j > 0) = 0$. In der Praxis lassen sich Korrelationen der Ensembles nicht vermeiden. Um diese Korrelationen abzuschätzen, definieren wir die Autokorrelationszeit τ über

$$A(j) \propto \exp\left\{-j/\tau\right\}. \quad (2.19)$$

Damit der Heat-Bath Algorithmus zuverlässige Werte liefert, müssen mindestens $k \gtrsim \tau$ "dummy" Iterationen durchgeführt werden, um zu garantieren, dass die Spinkonfigurationen statistisch unabhängig sind.

Abbildung 2.2 zeigt eine numerisch ermittelte Abschätzung der Autokorrelationsfunktion $A(j)$. Die Simulation wurde auf einem 50×50 Gitter durchgeführt. Insgesamt kamen

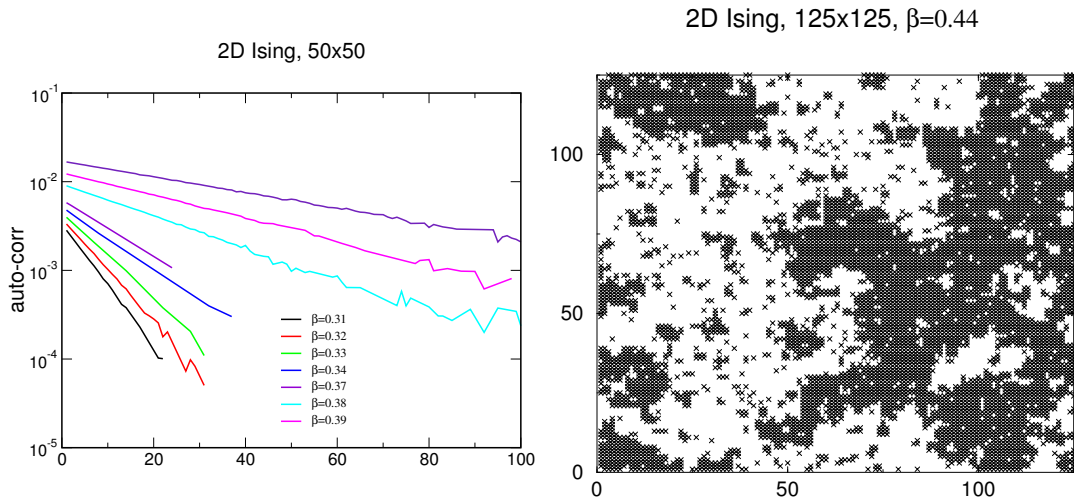


Abbildung 2.2: Autokorrelationsfunktion (links) und ein Beispiel für eine Ising Spin-konfiguration nahe des Phasenübergangs (rechts).

500000 Konfigurationen zur Auswertung. Wir sehen deutlich, dass die Autokorrelationen mit zunehmenden j exponentiell abklingen. Es zeigt sich jedoch, dass die Autokorrelationszeit τ stark anwächst, wenn wir uns dem kritischen Wert $\beta_c = 0.4406867\dots$ nähern. Der Bereich nahe des Phasenübergangs, für den wir uns hier interessieren, ist mit dem Heat-Bath Algorithmus nur schwer zugänglich.

Die Ursache für das Anwachsen der Autokorrelationszeit (*critical slowing down*) läßt sich anschaulich verstehen. In Abbildung 2.2 ist ebenfalls eine Beispiel-Spinkonfiguration eines 125×125 Gitter bei $\beta = 0.44$ dargestellt. Schwarz markiert sind Gitterpunkte x mit $\sigma_x = -1$. Deutlich sind die Bereiche von Spins gleicher Orientierung zu erkennen. Die räumliche Korrelationslänge ξ nimmt in Einheiten des Gitterabstandes sehr große Werte an. Die Physik des Magneten wird durch fluktuierende Cluster beschrieben. Die Local Update Algorithmen (Metropolis, Heat Bath etc.) beschränken sich bei einem Gitterdurchlauf auf den Update eines einzelnen Spins im mittleren Feld der anderen Spins. Betrachten wir nun einen Spin innerhalb einer Domäne. Dieser Spin wird durch das mittlere Feld der angrenzenden, gleichorientierten Spins bestimmt, und der Local Update Algorithmus wird kaum eine andersartige Orientierung des Spins akzeptieren. Lediglich Spins am Rand von Clustern sind signifikanten Änderungen unterworfen. Eine Iteration wird somit lediglich die Clustergrenzen verändern. Um einen Cluster vom Durchmesser ξ komplett zu ändern, sind somit ungefähr ξ^2 Iterationen notwendig. Wenn wir davon ausgehen, dass mindestens eine Clusterstruktur geändert werden muß, um Autokorrelationen zu vermeiden, finden wir die Abschätzung

$$\tau \approx \xi^z, \quad \text{mit} \quad z = 2. \quad (2.20)$$

Die Größe z heißt *dynamisch kritischer Exponent*. In der Tat findet man empirisch für den Metropolis Algorithmus $z_{Metro} \approx 2.125$. Spinsysteme nahe des Phasenübergangs lassen sich durch Local Update Algorithmen nicht beschreiben.

2.6 Das Heilmittel: Cluster Update Algorithmen

Wir beginnen mit einer Umformulierung der Zustandssumme (2.13)

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_x\}} \exp \left(\beta \sum_{\langle xy \rangle} \sigma_x \sigma_y \right) = \sum_{\{\sigma_x\}} \prod_{\langle xy \rangle} \exp(\beta \sigma_x \sigma_y). \quad (2.21)$$

Wenn die beiden Spins σ_x und σ_y in (2.21) gleich sind, dann beträgt der Wahrscheinlichkeitsfaktor in (2.21) gerade $\exp(\beta)$. Besitzen die beiden Spins entgegengesetztes Vorzeichen, dann ist der Wahrscheinlichkeitsfaktor durch $\exp(-\beta)$ gegeben. Wir können also (2.21) umschreiben

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_x\}} \prod_{\langle xy \rangle} e^\beta \left[(1-p) + p \delta_{\sigma_x \sigma_y} \right], \quad p := 1 - e^{-2\beta}. \quad (2.22)$$

Wir schreiben jetzt diese Darstellung der Zustandssumme komplizierter, indem wird die Identität

$$a + b = \sum_{n=0}^1 \left[a \delta_{n0} + b \delta_{n1} \right]$$

verwenden. Dazu führen wir die Variablen $n_{xy} \in \{0, 1\}$ ein, die mit einem Verbindungsstück (*Link*) zwischen den Punkten x und y korrespondiert. Wir erhalten

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_x\}} \sum_{\{n_{xy}\}} \prod_{\langle xy \rangle} e^\beta \left[(1-p) \delta_{n_{xy},0} + p \delta_{\sigma_x \sigma_y} \delta_{n_{xy},1} \right]. \quad (2.23)$$

Die zentrale Idee ist, einen Heat Bath Algorithmus für den Variablensatz $\{\sigma_x\}$ und $\{n_{xy}\}$ durchzuführen. Was hat das mit Updates von Clustern zu tun?

Swendsen-Wang Cluster Update

Abwechselnd werden nun Updates der Spin Variablen σ_x und der Link-Variablen n_{xy} durchgeführt. Das Heat Bath Verfahren bedeutet, dass wir eine Variable (σ_x oder n_{xy}) herausgreifen, die übrigen Variablen als konstant betrachten (heat bath), und die gewählte Variable gemäß ihrer Wahrscheinlichkeit in (2.23) neu wählen.

1. Nehmen wir an, wir hätten die Variable n_{ij} zum Update bestimmt. Ein Blick auf das Wahrscheinlichkeitsmaß in (2.23) zeigt uns folgende Update-Vorschrift: setze $n_{ij} = 0$ falls die angrenzenden Spins verschieden sind. Sind die angrenzenden Spins gleich, so wähle $n_{ij} = 1$ mit Wahrscheinlichkeit p und $n_{ij} = 0$ sonst.

Für große Werte β , liegt p in der Nähe von 1. Das bedeutet, dass im wesentlichen alle Spins, die zu einem Weißchen Bezirk gehören, d.h. innerhalb einer Domäne gleich ausgerichtet sind, mit Link-Variable n_{ij} verbunden sind. Die Variablen n_{ij} markieren somit die Weißchen Bezirke.

2. Für den Spin-Update identifizieren wir nun alle Spins, die zu einem Weißchen Bezirk gehören, d.h. wir identifizieren alle Spins, die durch Link-Variable $n_{ij} = 1$ verbunden sind. Für diese Spins ist der Wahrscheinlichkeitsfaktor in (2.23) nun proportional zu $\delta_{\sigma_x \sigma_y}$, d.h. dass alle Spins einer Domäne gleichzeitig ihr Vorzeichen ändern müssen, ansonsten ist die Wahrscheinlichkeit für den Update null.

3. Wähle eine Zufallszahl $z = \pm 1$ für jeden Cluster (1-Spin-Cluster nicht vergessen!), und weise allen Spins des Cluster den Wert z zu.

Empirisch zeigt sich, dass mit dem Cluster Update Algorithmus das Problem des *critical slowing down* gelöst werden kann. Man findet numerisch für das Swendsen-Wang Verfahren:

$$\tau \approx \xi^z, \quad \text{mit} \quad z \approx 0.2. \quad (2.24)$$

2.7 Aufgaben:

2.7.1 Cluster Update Algorithmus

Schreiben Sie ein Programm, das den Swendsen-Wang Cluster Update Algorithmus zur Simulation des 2-dimensionalen Ising Modells implementiert.

- a. Erzeugen Sie sich mit Hilfe des Swendsen-Wang Cluster Update Algorithmus für ein 50×50 Gitter und $\beta = 0.44$ eine thermalisierte Konfiguration von Ising Spins und visualisieren Sie diese. Markieren Sie nach Eingabe eines Punktes (Wahl eines Spins) den zugehörigen Swendsen-Wang Cluster.
- b. Berechnen Sie die Magnetisierung als Funktion von β .
- c. Schätzen Sie die Autokorrelationsfunktion $A(j)$ für den Swendsen Cluster Update Algorithmus ab, und verifizieren Sie, dass die Autokorrelationszeit praktisch von β unabhängig ist.

2.8 Literatur:

- 1 Wolfhard Janke, *Nonlocal Monte Carlo Algorithms for Statistical Physics Applications*, Proceedings of the IMACS workshop, Brussels, April 1-3,1997.
- 2 R. H. Swendsen and J. Wang, *Nonuniversal Critical Dynamics In Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 86.