Projekt 5

Monte-Carlo-Simulation des Ising-Modells

M. Quandt & G. Burgio

5.1 Problemstellung

Das Ziel der Statistischen Physik ist die Beschreibung von Systemen mit sehr vielen Freiheitsgraden, in denen die detaillierte Untersuchung der *mikroskopischen* Dynamik jedes einzelnen Konstituenten weder praktikabel noch wünschenswert ist. Stattdessen wird das System effektiv durch einige wenige *makroskopische* Größen charakterisiert, die sich aus einer geeigneten Mittelung über die mikroskopischen Freiheitsgrade ergeben. Hiermit einher geht einerseits eine enorme Reduktion der verfügbaren Information über das System und eine Konzentration auf die wesentlichen physikalischen Aspekte. Andererseits zeigen solche Systeme selbst in den gemittelten Kenngrößen oft ein komplexes Bild, das durch ein *kollektives* Verhalten aller – oder zumindest sehr vieler – Freiheitsgrade zustandekommt.

Beispiele für ein solches kollektives Verhalten sind vielfältig: So gibt es z.B. sehr komplexe Bewegungsmuster in Fisch- oder Vogelschwärmen, die auf einem relativ simplen lokalen Verhalten jedes einzelnen Tieres beruhen. Auch die Ausbreitung von Wildfeuern oder Krankheiten, die Verbreitung von Nachrichten in Kommunikationsnetzwerken, die Entstehung von Verkehrsstaus, das Verhalten von Spekulanten an den Börsen und viele weitere Phänomene folgen einem solchen Muster. In all diesen Fällen ergibt sich aus einem simplen Verhalten jedes einzelnen Konstituenten ein komplexes kollektives Verhalten, das sich mit statistischen Methoden verstehen und beschreiben läßt.

Das Standardbeispiel für ein kollektives Verhalten vieler Freiheitsgrade in der Physik ist der *Magnetismus*. Hierbei richten sich die atomaren magnetischen Momente aneinander aus und erzeugen so kollektiv den makroskopischen Magnetismus des Materials. Dieses Beispiel ist vor allem deshalb von Bedeutung, weil sich die atomare Dynamik sehr stark vereinfachen lässt: Für die magnetischen Eigenschaften eines Festkörpers ist lediglich die Ausrichtung der atomaren magnetischen Momente zueinander (und zu einem externene Magnetfeld) relevant. Alle weiteren mikroskopischen Prozesse, die die Bindung der Atome in Kristallgittern, die thermischen und elektrischen Leitfähigkeiten sowie die mechanischen und elastischen Eigenschaften eines Körpers bestimmen, können für den Magnetismus vernachlässigt werden. Darüberhinaus wird das magnetische Moment eines Atoms fast ausschließlich durch den Gesamtspin der Elektronenhülle bestimmt, so daß man sich auf die Untersuchung atomarer Spinfreiheitsgrade auf fixen Positionen eines Kristallgitters konzentrieren kann. Solche Modelle des Magnetismus nennt man *Spinmodelle*.

Das einfachste und bekannteste Spinmodell wurde 1920 von Wilhelm Lenz vorgeschlagen und in der Doktorarbeit von Ernst Ising erstmals untersucht; es trägt seither Isings Namen. Hierbei betrachtet man zunächste den einfachsten Fall eines atomaren Spins $s = \frac{1}{2}$. Das zugehörige lokale magnetische Moment regiert sowohl auf das magnetische Dipolfeld seiner Gitternachbarn, als auch auf ein extern angelegtes (homogenes) Magnetfeld; weitere Wechselwirkungen bestehen nicht. Aus dieser simplen Dynamik entsteht durch kollektives Verhalten der atomaren Spins ein brauchbares Modell des (ferromagnetischen) Magnetismus, das auch komplexere Zusammmenhänge wie etwa den Phasenübergang in den paramagnetischen Zustand oberhalb der Curie-Temperatur beschreiben kann. Im vorliegenden Praktikumsversuch soll das *Ising-Modell* in $d = 2$ und $d = 3$ Raumdimensionen numerisch mit Hilfe des*Monte-Carlo*-Verfahrens untersucht werden.

5.2 Klassische Spinmodelle

Wie in der Einleitung dargelegt, betrachten wir ein Modell aus Spinfreiheitsgraden $\{s_x\}$, die auf den Punkten (*sites*) eines regulären Kristallgitters $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ in d Raumdimensionen lokalisiert sind, vgl. Abbd. 5.1. Die Spins sind hierbei *klassisch*, d.h. zahlenwertige Funktionen anstelle quantenmechanischer Operatoren. Hierbei geht man von der Vorstellung aus, daß das wesentliche Verhalten eines Spinmodells von seinen *thermischen* Fluktuationen herrührt, und über die *Quantenfluktuationen* seiner atomaren Freiheitsgrade effektiv gemittelt werden kann. Auf diese Weise reduziert sich z.B. die Wechselwirkung eines quantenmechanischen Spinoperators $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ mit einem externen magnetischen Feld $\mathbf{B}$ auf den klassischen Energieterm

$$E = \langle \hat{H} \rangle = -\frac{g}{2}\mu_B B \cdot \langle 2\sigma_z/\hbar \rangle \equiv -hs\,, \qquad h \equiv \frac{g}{2}\mu_B\, B_z\,,$$

wobei das externe Magnetfeld in z-Richtung gelegt wurde und irrelevante Konstanten im Magnetfeld absorbiert wurden. Der *klasssiche* Spin $s \equiv \langle 2\sigma_z/\hbar \rangle$ ist nun kein Operator mehr und nimmt die beiden numerischen Werte $s = \pm 1$ an.

Analog hierzu kann man auch die Wechselwirkung eines atomaren Spins $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_x$ mit dem Dipolfeld eines anderen Spins $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_y$ behandeln. Unter der Annahme, dass die Spins an verschiedenen Gitterpunkten statistisch unabhängig sind, ist der Erwarungswert dieser Wechselwirkung proportional zu $\langle 2\hat{\boldsymbol{\sigma}}_x/\hbar \rangle\, \langle 2\hat{\boldsymbol{\sigma}}_y/\hbar \rangle = s_x\, s_y$, wenn man die Quantisierungsachse wiederum in z-Richtung legt. Aus der Kombination der beiden Wechselwirkungen ergibt sich bereits die Hamiltonfunktion der klassischen Spin-Modelle,

$$H = -\sum_{x,y \in \Lambda} J_{xy}\, s_x\, s_y - \sum_{x \in \Lambda} h_x\, s_x\,. \tag{5.1}$$

Das Raumgitter Λ wird üblicherweise *hyperkubisch* angenommen,[1] d.h. jeder Gitter-

[1] Dies ist allerdings nicht zwingend; so gibt es etwa umfangreiche Studien zu Spinmodellen auf hexagonalen (Bienenwaben-)Gittern in $d = 2$.

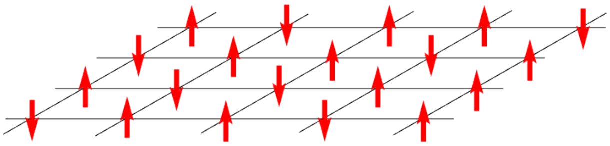


Abbildung 5.1: Ising-Modell in $d = 2$ Raumdimensionen.

punkt $x \in \Lambda$ ist durch ein d-Tupel ganzer Zahlen $\vec{n} = (n_1, \dots, n_d)$ charakterisiert,

$$x = \sum_{i=1}^{d} a_i \, (n_i \, \mathbf{e}_i) = a \sum_{i=1}^{d} n_i \, \mathbf{e}_i = a\vec{n} \,, \qquad\qquad n_i \in \mathbb{Z} \,, \tag{5.2}$$

wobei der Gittterabstand a in allen Raumrichtung gleich angesetzt wurde und die Basisvektoren $\mathbf{e}_i$ des kubischen Gitters karthesisch sind. Falls der Gitterabstand a explizit auftritt, kann man ihn in den Kopplungen des Modells (5.1) absorbieren; man unterscheidet daher nicht mehr zwischen dem tatsächlichen räumlichen Gitterpunkt x und seinem Index $\vec{n}$, d.h. $\Lambda = a\mathbb{Z}^d \sim \mathbb{Z}^d$. Jeder Gitterpunkt x hat $2d$ nächste Nachbarn und $2d$ Gitterkanten (*bonds*), die zu diesen Nachbarn führen.

In der Realität (und noch mehr in Computersimulationen) ist die tatsächliche Zahl von Freiheitsgraden natürlich endlich, d.h. das Gitter $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ verfügt nur über eine endliche Zahl L_i von Gitterpunkten in der i-ten Raumdimension, und die Zahl der Spins ist $L \equiv L_1 \cdots L_d$. Um ein mathematisch definiertes Modell zu bekommen muss man an den Rändern des Gitters in jeder Raumdimension geeignete Randbedingungen stellen. Die genaue Form dieser Randbedingungen sollte für ein ausreichend großes System unerheblich sein; um die Homogenität und (Gitter-)Translationsinvarianz des unendlichen Kristalls $\mathbb{Z}^d$ zu erhalten, wählt man aber üblicherweise *periodische Randbedingungen*,

$$s_x = s_{x'} \qquad\qquad x' = x + L_k \, \mathbf{e}_k \qquad \forall \, k = 1, \dots, d \,. \tag{5.3}$$

Die endliche Gittergröße L führt natürlich auch bei periodischen Randbedingungen zu systematischen Abweichungen vom Idealfall des unendlich ausgedehnten Kristalls $\mathbb{Z}^d$, und eine sorgfältige Analyse solcher *finite size* Effekte ist für den thermodynamischen Limes $\Lambda \to \mathbb{Z}^d$ unerläßlich, insbesondere in der Nähe möglicher Phasenübergänge.

Wegen des schnellen Abfalls des Dipolfeldes genügt es oftmals, bei der Spin-Spin-Wechselwirkung in (5.1) nur die Kopplung an die $2d$ nächsten Nachbarn mitzunehmen; hierfür führt man zweckmäßigerweise das Symbol

$$\sum_{\langle x,y \rangle} \equiv \sum_{x \in \Lambda} \sum_{\substack{y \in \Lambda \\ x,y \,\text{Nachbarn}}} \tag{5.4}$$

ein, wobei $\langle x, y \rangle$ eine *Kante* des Gitters bezeichnet. Darüberhinaus ist das System üblicherweise *isotrop* und *homogen* unter Gittertranslationen, so dass die Spin-Spin-Kopplung $J_{xy} \equiv J$ konstant ist. Man erhält somit die Hamilton-Funktion des klassischen Ising-Modells:[2]

$$H = -J \sum_{\langle x,y \rangle} s_x \, s_y - \sum_{x \in \Lambda} h_x \, s_x \,, \qquad\qquad s_x \in \{-1, 1\} \,. \tag{5.5}$$

[2]Oft genügt es, das externe Magnetfeld ebenfalls räumlich konstant zu wählen, $h_x \equiv h$.

Ferromagnetische Wechselwirkungen $J > 0$ bevorzugen parallel ausgerichtete Spins an nächsten Nachbarn, während antiferromagnetische Wechselwirkungen $J < 0$ die gegenteilige Tendenz haben.

5.3 Spinmodelle im thermischen Gleichgewicht

Im isolierten Zustand nimmt das Spinmodell die Konfiguration mit minimaler Energie an. Für ferromagnetische Systeme bedeutet dies, dass alle Spins denselben mikroskopischen Zustand annehmen, d.h. im Falle des Ising-Modells alles Spins parallel sind. Ohne äußeres Magnetfeld $h_x = 0$ sind die beiden möglichen Grundzustände ($s_x = \pm 1$ für alle Gitterpunkte x) gleich wahrscheinlich und würden bei sehr vielen identischen Kopien des Systems tatsächlich jeweils in etwa der Hälfte aller Fälle beobachtet werden. Liegt jedoch nur ein einziges System vor, so wählt dieses System seinen Grundzustand zufällig ("spontan") und bricht damit die Symmetrie $s_x \to -s_x$ der Hamilton-Funktion (5.5) mit $h = 0$. Dieses kollektive Verhalten resultiert also in einer permanenten *Magnetisierung* des Systems und ist einer der Hauptcharakteristika von Ferromagneten.

Entscheidend für die spontane Symmetriebrechung ist offenbar, dass der zufällig gewählte Grundzustand *stabil* ist, obwohl es einen energetisch entarteten Alternativzustand gibt. Dies ist eine Konsequenz der großen Zahl von Freiheitsgraden: Für ein einzelnen Freiheitsgrad gibt es i.A. eine endliche Wahrscheinlichkeit $0 < q < 1$ in einen energetisch entarteten Zustand zu tunneln; der tatsächliche Grundzustand ist dann eine symmetrische Überlagerung aller Möglichkeiten. Im Ising-Modell müssen hingegen *alle* Spins simultan gedreht werden, um den alternativen Grundzustand zu erreichen, und die Wahrscheinlichkeit hierfür verschwindet bei großer Teilchenzahl, $q^N \to 0$.

Die Situation ändert sich grundlegend wenn das vormals isolierte Spinsystem an ein *Wärmebad* gekoppelt wird. Durch den Wärmeaustausch können nun mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit auch höhere Anregungsenergien auftreten, da sie eine größere *Entropie* besitzen, also durch eine größere Zahl von Mikrozuständen realisiert sind. Die Balance zwischen Energie und Entropie wird durch die Temperatur des Wärmebades kontrolliert: Bei hohen Temperaturen dominiert die Entropie der thermischen Fluktuationen, die Symmetrie $s_x \to -s_x$ wird wiederhergestellt und die spontane Magnetisierung verschwindet.

Man bezeichnet die Gesamtheit der aktuellen Werte aller Spinvariablen als *Mikrozustand* oder *Konfiguration* $\omega = \{s_x\}$. Der Zustandsraum Ω des Ising-Modell (5.5) enthält demnach $|\Omega| = 2^L$ mögliche Konfigurationen. Im thermodynamischen Gleichgewicht tragen nun alle Konfigurationen $\omega \in \Omega$ zu den thermischen Mittelwerten mit einer temperaturabhängigen Wahrscheinlichkeit $P_\beta(\omega)$ bei, die unter den gegebenen Bedingungen (feste Teilchenzahl und Temperatur) durch die *Boltzmann-Verteilung* gegeben ist:

$$\begin{aligned} P_\beta(\omega) &= Z^{-1} \exp\big[-\beta\, H(\omega)\big] \\ Z &\equiv \sum_{\omega\in\Omega} e^{-\beta H(\omega)} = \mathrm{tr}\, e^{-\beta H} \end{aligned} \tag{5.6}$$

Die hier auftretende *Zustandssumme* Z hängt von der inversen Temperatur

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T} \tag{5.7}$$

und allen weiteren Parametern der Hamilton-Funktion ab; für das Ising-Modell (5.5) gilt also $Z = Z(\beta, h)$ bzw. $Z = Z_L(\beta, h)$ wenn man endliche Systeme betrachtet. Aus der Zustandssumme erhält man die *freie Energie*

$$F = F_L(\beta, h) = -\beta^{-1} \ln Z \,. \tag{5.8}$$

Die ist eine extensive Größe und divergiert daher für eine große Zahl N von Freiheitsgraden proportional zu N. Es ist somit sinnvoll die *freie Energiedichte*

$$f_L(\beta, h) = \frac{F_L(\beta, h)}{N} \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} f(\beta, h) \tag{5.9}$$

einzuführen, die – wie angegeben – unter recht allgemeinen Voraussetzungen einen thermodynamischen Limes besitzt. Die Kenntnis der Zustandssumme (5.6) bzw. der freien Energiedichte (5.9) entspricht einer vollständigen Lösung des Systems, da sich alle makroskopisch relevanten Observablen daraus berechnen lassen. Zum Beispiel folgt für die innere Energiedichte[3]

$$\epsilon = \epsilon_L(\beta, h) \equiv \frac{\langle H \rangle}{N} = f_L + \beta \, \frac{\partial f_L}{\partial \beta} \,, \tag{5.10}$$

und die Magnetisierung am Gitterpunkt x ergibt sich als

$$m_x = \langle s_x \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial F_L}{\partial h_x} \stackrel{h=\text{const}}{=} \frac{1}{\beta} \frac{\partial f_L}{\partial h} \,. \tag{5.11}$$

Analog lassen sich alles weitere Korrelationsfunktionen aus der freien Energie durch mehrfaches Ableiten nach dem externen Feld h_x gewinnen.

5.4 Analytische Methoden

Das Ising-Modell kann in $d < 3$ Raumdimensionen mit Hilfe der *Transfermatrixmethode* analytisch gelöst werden. Während der Fall der eindimensionalen Ising-Kette noch recht übersichtlich ist, gelang die Lösung des $d = 2$ Problems durch Lars Onsager erst 1944. Wir leiten hier nur die $d = 1$ Lösung her und verweisen für den Fall $d = 2$ auf die Literatur.

In $d = 1$ Raumdimension können die L Gitterpunkte einfach abgezählt werden, $x \in \{1, \ldots, L\}$, und die periodischen Randbedingungen haben $s_{L+1} = s_1$ sowie $s_0 = s_L$ zur Folge. Somit besteht eine Konfiguration aus L *bits* $\omega = \{s_1, \ldots, s_L\}$, und die

[3] Hier und im Folgenden bezeichnet $\langle \cdots \rangle$ den thermischen Mittelwert.

Zustandssumme (5.6) des Ising-Modells kann explizit berechnet werden:[4]

$$
\begin{aligned}
Z_L(\beta,h) &= \sum_{\omega} e^{-\beta H(\omega)} \\
&= \sum_{s_1,\dots,s_L} e^{\beta J s_1 s_2 + \beta h(s_1+s_2)/2} \cdot e^{\beta J s_2 s_3 + \beta h(s_2+s_3)/2} \cdots e^{\beta J s_L s_1 + \beta h(s_L+s_1)/2} \\
&= \sum_{s_1,\dots,s_L} T_{s_1 s_2}\, T_{s_2 s_3} \cdots T_{s_L s_1} = \operatorname{tr} T^L \,. \qquad (5.12)
\end{aligned}
$$

Die hier eingeführte (2×2) Matrix T wird als *Transfermatrix* bezeichnet:

$$
T_{ss'} = e^{\beta J s s' + \beta h(s+s')/2} \qquad \Longrightarrow \qquad T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} . \qquad (5.13)
$$

Sie ist reell und symmetrisch und kann daher diagonalisiert werden; die beiden positiven Eigenwerte sind

$$
\lambda_\pm = e^{\beta J}\left(\cosh\beta h \pm B\right) \qquad \text{mit} \qquad B \equiv \sqrt{\sinh^2\beta h + e^{-4\beta J}}\,. \qquad (5.14)
$$

Nach dem Spektralsatz ergibt sich somit

$$
Z_L(\beta,h) = \operatorname{tr} T^L = \lambda_+^L + \lambda_-^L = \lambda_+^L\,(1+q^L)\,,
$$

wobei $0 < q \equiv \lambda_-/\lambda_+ < 1$. Im thermodynamischen Limes $L\to\infty$ finden wir die freie und innere Energiedichte,

$$
\begin{aligned}
f(\beta,h) &= \lim_{L\to\infty} \frac{F_L(\beta,h)}{L} = -\frac{1}{\beta}\,\ln\lambda_+ \\
\epsilon(\beta,h) &= \lim_{L\to\infty} \frac{\langle H\rangle_L(\beta,h)}{L} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\,\ln\lambda_+\,. \qquad (5.15)
\end{aligned}
$$

Die Magnetisierung ist der thermische Mittelwert eines einzelnen Spins, also

$$
m = \langle s_x\rangle = \frac{\partial f(\beta,h)}{\partial h} = \frac{\sinh\beta h}{\sqrt{\sinh^2\beta h + e^{-4\beta J}}}\,. \qquad (5.16)
$$

Ohne externes Feld ($h = 0$) verschwindet die Magnetisierung m für *jede* positive Temperatur; lediglich bei Temperatur 0, also $\beta\to\infty$ verbleibt eine spontane Magnetisierung. Die eindimensionale Ising-Kette hat somit keinen Phasenübergang bei endlichen Temperaturen und eine Curie-Temperatur $T^* = 0$ (*van Hove–Theorem*). Bei Temperatur $T = 0$ ergibt sich eine Magnetisierung von $m = \operatorname{sign}(h = \pm 0)$: Ein infinitesimales externes Feld $n \to 0$ legt das Vorzeichen der Magnetisierung fest, und diese Magnetisierung bleibt erhalten auch wenn das externe Feld anschließend adiabatisch abgeschaltet wird (*Hysterese*). Ganz ohne externes Feld wird das Vorzeichen der Magnetisierung spontan gewählt.

[4] Wir nehmen der Einfachheit halber ein konstantes externes Magnetfeld $h_x = h$ an.

Für den Fall des planaren Ising-Modells ($d = 2$) existiert ebenfalls eine exakte Lösung, zumindest für verschwindendes externes Feld $h = 0$ und im thermodynamischen Limes $L \to \infty$. Sie wurde 1944 von Onsager ebenfalls mit Hilfe der Transfermatrixmethode gefunden. Die Details der Herleitung sind jedoch recht kompliziert [3] und können hier aus Platzgründen nicht dargestellt werden. Für die freie Energiedichte bei $h = 0$ findet man

$$-\beta f(\beta) = \ln\cosh(2\beta J) - 2\beta J + \frac{2}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \, \ln\left(1 + \sqrt{1 - \xi^2 \sin^2\theta}\right) \tag{5.17}$$

wobei wir die Abkürzung

$$\xi \equiv 2\,\frac{\tanh(2\beta J)}{\cosh(2\beta J)}\,. \tag{5.18}$$

verwendet haben. Hieraus ergibt sich wie üblich die innere Energiedichte (5.10) zu

$$\epsilon(\beta) = 2J - J\,\coth(2\beta J)\cdot\left[1 + \left(2\tanh^2(2\beta J) - 1\right)\frac{2}{\pi}\,K(\xi)\right], \tag{5.19}$$

mit dem vollständigen elliptische Integral erster Art

$$K(\xi) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - \xi^2\,\sin^2\theta}}\,.$$

Dieses Integral hat in einen Verzweigungspunkt bei $\xi = 1$, wobei aber der beidseitige Limes in der Energiedichte (5.19) existiert, d.h. die Energiedichte ist für alle Temperaturen stetig und endlich. Leitet man nochmals nach der Temperatur ab, so findet man jedoch eine Singularität in der *spezifischen Wärme*

$$\frac{c}{k_B} = \frac{1}{k_B}\,\frac{\partial\epsilon}{\partial T} = -\beta^2\,\frac{\partial\epsilon}{\partial\beta}\,. \tag{5.20}$$

Wir haben somit bei $\xi = 1$ einen Phasenübergang zweiter Ordnung von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase. Aus (5.18) folg für die inverse kritische Temperatur[5]

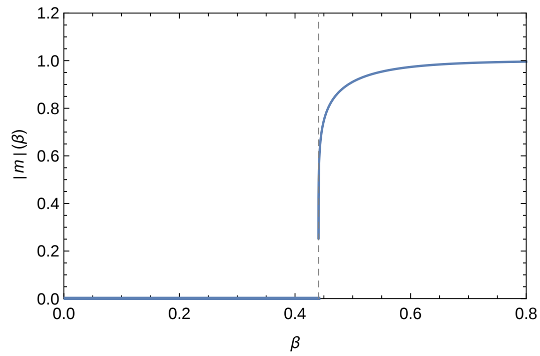
$$\beta^* J = \frac{1}{2}\,\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.440687 \tag{5.21}$$

entsprechend einer Curie-Temperatur von $T^* = 2.2692\,J$. Für die spontane Magnetisierung in der ferromagnetischen Phase $\beta > \beta^*$ lautet das exakte Resultat

$$|m|(\beta) = \langle s\rangle = \Big[1 - \sinh^{-4}(2\beta J)\Big]^{\frac{1}{8}}\,. \tag{5.22}$$

Abbildung 5.2 zeigt die Magnetisierung (5.22) und die spezifische Wärme (5.20) für das planare Ising-Modell als Funktion der inversen Temperatur.

[5] Unter der Annahme eines einzigen Phasenübergangs kann die kritische Temperatur des planaren Ising-Modells auch aus dessen *Selbstdualität* ermittelt werden (*Kramers* und *Wannier*, 1941).



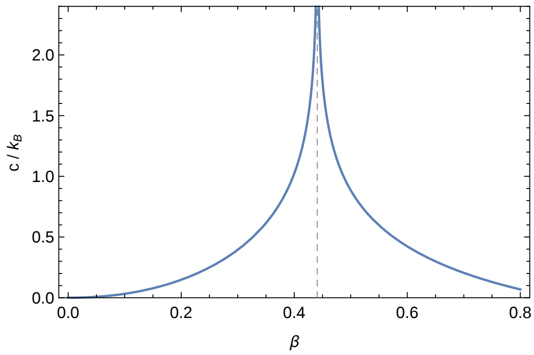


Abbildung 5.2: Spontane Magnetisierung (links) und spezifische Wärme (rechts) des planaren Ising-Modells ohne externes Feld ($h = 0$).

Für Spin-Modelle in $d = 3$ existieren i.a. keine exakten Resultate und man ist auf Näherungsverfahren angewiesen. Neben den systematischen Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen bietet sich in der Nähe des Phasenübergangs die Molekularfeldmethode (*mean field approximation*) an. Hierbei geht man von der Vorstellung aus, daß der einzelne Spin s_x in der Nähe des Phasenübergangs, d.h. bei sehr großer Korrelationslänge, nicht mehr nur seine nächsten Nachbarn sieht, sondern an ein kollektives Magnetfeld (pro *site*) m koppelt, das von allen (oder sehr vielen) Spins des Gitters gemeinsam erzeugt wird. Die Hamiltonfunktion lautet in dieser Näherung also

$$H \approx -\sum_x \big(2dJm + h\big)\, s_x \equiv -\sum_x B\, s_x\,,$$

wobei die Summe über alle Kanten den Faktor $2d$ produziert hat. Alle Spins koppeln nun unabhängig an das mittlere Feld und man erhält für die Magnetisierung am Ort x:

$$\langle s_x \rangle \approx \frac{\mathrm{tr}(s_x\, e^{-\beta H})}{\mathrm{tr}\, e^{-\beta H}} = \frac{(+1)\, e^{-\beta B} + (-1)\, e^{+\beta B}}{e^{-\beta B} + e^{+\beta B}} = \tanh(\beta B) = \tanh(2dm\,\beta J + \beta h)\,.$$

Aus der Selbstkonsistenzbedingung $\langle s_x \rangle = m$ folgt für alle x die *gap equation*

$$m = \tanh(2d\beta J\, m + \beta h)\,. \tag{5.23}$$

Für kleine β und $h = 0$ hat diese Gleichung nur die triviale Lösung $m = 0$. Eine zweite Phase mit nichtverschwindender Magnetiseriung $|m| > 0$ existiert, sofern $2d\beta J \geq 1$. Wir haben somit einen Übergang in die ferromagnetische Phase bei einer kritischen Temperatur von

$$\beta^* = \frac{1}{2dJ} \qquad\qquad \text{(mean field)}\,. \tag{5.24}$$

Eine genauere Analyse [2] ergibt, daß die mean-field-Näherung immer einen Übergang zweiter Ordnung vorhersagt. Für das planare Ising-Modell ist die Curie-Temperatur in MF-Näherung $\beta^* J = 0.25$, was mit dem exakten Wert $\beta^* J = 0.44$ verglichen werden sollte. Die MF–Näherung wird mit zunehmender Zahl d der Raumdimensionen immer besser, da die Zahl der nächsten Nachbarn zunimmt und somit die Annahme der Wechselwirkung mit einem mittleren Feld immer realistischer wird.[6]

5.5 Monte-Carlo–Simulationen

Wir bezeichnen wie bisher den Wert aller $L = L_1 \cdots L_d$ Spinvariablen im Gitter als Mikrozustand oder *Konfiguration*. Für das Ising-Modell entspricht eine Konfiguration $\omega = \{s_x\}$ demnach einem Binärwort der Länge L, und der gesamte Zustandsraum Ω umfasst 2^L mögliche Konfigurationen. Eine allgemeine Observable G beschreibt einen reellen Messwert auf der aktuellen Spinkonfiguration; sie kann daher als Abbildung $\Omega \mapsto \mathbb{R}$ aufgefasst werden.[7] Unser Ziel ist die Berechnung des thermischen Mittelwerts

$$\langle G \rangle = \sum_{\omega \in \Omega} G(\omega)\, P_\beta(\omega) \tag{5.25}$$

als Funktion der Temperatur und des externen Felds, wobei P_β das Gibbs-Maß aus (5.6) ist.

Die Summe in (5.25) ehtält 2^L Terme und ist daher – außer für sehr kleine Systemgrößen L – nicht explizit auswertbar, vgl. Aufgabe **A1**. Im thermodynamischen Limes $L \to \infty$ nimmt der Aufwand *exponentiell* zu, und man ist daher auf einen besser skalierenden Algorithmus, das sog. *Monte-Carlo–Verfahren*, angewiesen. Hierbei handelt es sich ursprünglich um ein Verfahren zur Berechnung eines hochdimensionalen *Integralmittelwertes*,

$$\langle G \rangle = \int_\Omega d^L x\, G(\mathbf{x})\, \rho(\mathbf{x})\,, \tag{5.26}$$

wobei ρ eine normierte Wahrscheinlichkeitsdichte ist. Um den Mittelwert mit möglichst wenig Funktionsauswertungen zu bestimmen wählt man eine Stichprobe aus N repräsentativ ausgewählte Stellen $\mathbf{x}_i \in \Omega$ und nähert den Integralmittelwert durch das arithmetische Stichprobenmittel an. Grundlage hierfür ist das *MC-Theorem*:[8]

Theorem 1. *Es sei* $(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)$ *eine Stichprobe aus* N *unabhängigen Ziehungen (Instanzen) einer Zufallsvariablen* $\boldsymbol{\xi}$, *die auf* Ω *mit der Wahrscheinlichkeitsdichte* $\rho(\boldsymbol{\xi})$ *verteilt ist und die für* $N \to \infty$ *ergodisch ist. Dann gilt für* $N \gg 1$

$$\langle G \rangle = \int_\Omega d^L x\, G(\mathbf{x})\, \rho(\mathbf{x}) \approx \overline{G} \pm \sigma_G = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} G(\mathbf{x}_i) \pm \sigma_G\,. \tag{5.27}$$

Hierbei ist der beste Schätzwert für die statistische Unsicherheit des Mittelwertes durch den Standardfehler σ_G *mit*

$$\sigma_G^2 = \frac{1}{N-1}\left[\overline{G^2} - \overline{G}^2\right] = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^{N} \left[G(\mathbf{x}_i) - \overline{G}\right]^2$$

[6] Für das Ising-Modell in $d = 3$ Raumdimensionen sagt die MF-Näherung eine kritische Temperatur von $\beta^* J = 0.1667$ voraus, während numerische Simulationen einen Wert von $\beta^* J = 0.2215$ liefern.

[7] Vektor- oder tensorwertige Observablen werden komponentenweise behandelt.

[8] Die Annahme der Ergodizität bedeutet, daß die Stichprobenauswahl bei $N \to \infty$ den ganzen Zustandsraum Ω dicht ausfüllt.

```
1  input: inverse temperature β, external field h,
2         lattice extensions L_i, sample size N
3
4  allocate spin-lattice ω = {s_x}
5  allocate real vectors G1(1,...,N), G2(1,...,N)
6
7  ω = init(β, h)                  // for later use
8
9  for i=1 to N do
10 {
11   ω = draw(β, h)                // draw from canonical ensemble   (5.6)
12   G1[i] = G(ω)                  // evaluate observable
13   G2[i] = G[i] * G[i]
14 }
15 g  = amean(G1)                  // arithmetic mean
16 g2 = amean(G2)
17 dg = sqrt( g2 - g^2)/(N-1) )    // standard error
18
19 output: average g, standard error dg
```

Listing 5.1: Allgemeiner MC-Algorithmus für das Ising-Modell

gegeben, wobei der Überstrich das arithmetische Mittel bedeutet.

Die statistische Unsicherheit des Mittelwertes kommt durch die stochastische Auswahl der Stichprobenpunkte $\mathbf{x}_i$ zustande, also durch die zufällige Wahl einer großen Zahl von Freiheitsgraden. Jeder dieser Freiheitsgrade (z.B. ein einzelner Spin im Ising-Modell) hat einen infinitesimalen Einfluss auf das Gesamtergebnis. Sind die einzelnen Freiheitsgrade und somit die Stichprobenpunkte statistisch unabhängig, so folgt aus dem zentralen Grenzwertsatz, daß die Observable G Gauß-verteilt ist, unabhängig von der zugrundeliegenden Verteilung ρ der Stichprobenauswahl. Dieser Sachverhalt erlaubt dann die Schätzung des Standardfehlers wie oben angegeben.[9] Es gibt jedoch auch Situationen, in denen die Elemente der Stichprobe aus praktischen oder algorithmischen Gründen nicht ausreichend unabhängig sein können. In diesem Fall liefert die Gauß'sche Fehleranalyse ein falsches (weil viel zu optimistisches) Resultat und alternative Modelle der Fehlerabshätzung wie *bootstrap* oder *jackknife* sind nötig. In jedem Fall konvergiert das MC-Verfahren nur sehr langsam, da der Standardfehler σ_G nur wie $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ verschwindet.

Listing 5.1 formuliert das allgemeine MC-Verfahren für das Ising-Modell als Pseudocode. Der entscheidende Punkt ist offenbar die Implementierung der function `draw()` in Zeile **9**, d.h. die zufällige Erzeugung der Spinkonfiguration ω nach der kanonischen Wahrscheinlichkeitsverteilung (5.6). Dies ist i.a. nicht direkt möglich, da alle Spins des Gitters simultan erzeugt werden müssen, und die entsprechende Verteilung (5.6) die verschiedenen Spins koppelt. Stattdessen erzeugt man die notwendigen Konfigurationen der MC-Stichprobe iterativ mit Hilfe von *Markov-Ketten.*

[9]Der *Standardfehler* gibt die statistische Unsicherheit des Mittelwertes einer Stichprobe an und ist daher deutlich kleiner als die *Standardabweichung*, die die Verteilung der zugrundeliegenden Einzelmessungen charakterisiert.

Unter einem *stochastischen Prozess* versteht man eine Folge von Zufallsvariablen $(X_1, X_2, \ldots)$ über demselben Zustands- oder Ereignisraum Ω, die verschieden verteilt sein können. Ein *Markov-Prozess* hat die zusätzliche Eigenschaft, daß die Verteilung der Zufallsvariablen X_{k+1} nur von ihrem Vorgänger X_k, nicht aber von weiteren Zufallsvariablen X_i abhängt,

$$P(X_{k+1} = \omega \,|\, X_k = \omega_k, \ldots, X_0 = \omega_0) = P(X_{k+1} = \omega | X_k = \omega_k)\,. \tag{5.28}$$

Beim mehrfachen Werfen eines idealen Würfels wären sämtliche Zufallsvariablen X_k identisch mit der Gleichverteilung auf $\Omega = \{1, \ldots, 6\}$. Insbesondere wäre die Verteilung im k-ten Wurf unabhängig von den Vorgängerresultaten, d.h. der Prozess hätte kein Gedächtnis. Im Gegensatz hierzu haben Markov-Prozesse ein (maximal kurzes) Gedächtnis, da die Zukunft X_{k+1} nur von der Gegenwart X_k, aber nicht von der Vergangenheit abhängt. Da X_k selbst wiederum von X_{k-1} abhängt, gibt es dennoch eine indirekte Korrelation zwischen X_{k+1} und X_{k-1} usw. Solche Korrelationen sterben allerdings i.a. exponentiell (in der Zahl der Markov-Schritte) aus: Der Prozess „vergisst“ dann die Abhängigkeit von der Anfangsverteilung X_0 und strebt einem Gleichgewichtszustand zu, in dem alle Variablen X_k $(k \gg 1)$ diesselbe Verteilung besitzen. Unser Ziel ist es, einen Markov-Prozess so zu steuern, daß die asymptotische Verteilung mit dem Gibbs-Maß (5.6) zusammenfällt.

Ein Markov-Prozess ist offenbar neben der Anfgangsverteilung $W(X_0)$ durch die *Übergangswahrscheinlichkeit* $P(X_{k+1} = \omega | X_k = \omega')$ im k-ten Schritt charakterisiert. Ist diese Übergangswahrscheinlichkeit in jedem Schritt k identisch, so heisst der Prozess *zeitlich homogen*. Um die Notation weiter zu vereinfachen gehen wir davon aus, daß der Zustandsraum abzählbar ist, $\Omega = \{\omega_1, \ldots \omega_M\}$, wobei $M = |\Omega|$ auch unendlich sein darf.[10] Die Übergangswahrscheinlichkeit $P(X_{k+1} = \omega_i \,|\, X_k = \omega_j) = P(\omega_i \leftarrow \omega_j) \equiv P_{ij}$ ist dann eine $M \times M$-Matrix, und wir schreiben statt der Konfiguration ω_i auch einfach nur i. Für die Wahrscheinlichkeit $P^{(n)}$ des Übergangs $\omega_i \leftarrow \omega_j$ in n Schritten gilt dann $P^{(n)}_{ij} = P^n_{ij}$.

Ein Markov-Prozess heisst *ergodisch*, wenn er den gesamten Zustandsram Ω bei unendlicher Schrittzahl dicht ausfüllt. Jede unendlich langen *Markov-Kette* (eine Instanz des Markov-Prozesses) enthält dann jede Konfiguration des Zustandsraums, oder kommt ihr zumindest beliebig nahe. Im Allgemeinen ist Ergodizität nicht einfach nachzuweisen und man versucht daher algorithmisch, Beschränkungen auf Unterbereiche durch periodisches oder transientes Verhalten auszuschließen.

Die asymptotischen Verteilung eines Markov-Prozesses sollte sich durch weitere Markov-Schritte nicht ändern, also $W_i = W(\omega_i) = P_{ij} W_j$. Eine solche Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Ω heisst *stationär*. Ihre Existenz ergibt sich aus

Theorem 2. *Ein zeitlich homogener und ergodischer Markov-Prozess besitzt eine eindeutig bestimmte stationäre Verteilung $W_i = W(X = \omega_i)$ auf Ω, und es gilt:*

1. *$W_i = 1/\tau_i$, wobei τ_i die mittlere Rekurrenzzeit für den Zustand i ist;*

2. *$W_i = \lim_{n\to\infty} \left(P^n\right)_{ij}$ für alle j, also unabhängig vom Startzustand;*

3. *$W_i > 0$ und und $\sum_i W_i = 1$.*

[10] Im Falle des Ising-Modells gibt es $M = 2^L$ mögliche Konfigurationen des Systems aus L Spins.

Dieses Theorem folgt direkt aus der Spektralanalyse der Übergangswahrscheinlichkeit P; im Fall eines endlichen Zustandsraums ist dies der klassische Satz von Froebenius-Perron.

Die stationäre Verteilung eines Markov-Prozesses ist also durch die Übergangswahrscheinlichkeit direkt bestimmt. Der Vorteil der Verwendung von Markov-Prozessen für das MC-Verfahren besteht nun darin, daß die benötigte Verteilung (5.6) schrittweise durch einfache Übergangsregeln erzeugt werden kann. Diese Regeln sind relativ unkritisch, da viele Übergangswahrscheinlichkeiten zur selben stationären Verteilung konvergieren. Um nachzuweisen daß ein gegebener Algorithmus zur gewünschten Endverteilung führt, benutzt man fast ausschließlich das folgende *hinreichende* Kriterium:[11]

Theorem 3. ***(detailed balance)*** *Unter den Voraussetzungen von Theorem 2 gelte für die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{ij} = P(\omega_i \leftarrow \omega_j)$ die Relation*

$$P_{ki}\, r_i = P_{ik}\, r_k \qquad \forall i, k \tag{5.29}$$

mit gewissen positiven Zahlen $r_i > 0$. Dann existiert die Gleichgewichtsverteilung und

$$W_i = \frac{r_i}{\sum_i r_i}\,. \tag{5.30}$$

Für das Gibbs-Maß (5.6) setzt man insb. $r_i = e^{-\beta H_i}$ und erhält

$$W_i = W(\omega_i) = \frac{1}{Z}\, e^{-\beta H(\omega_i)} \qquad\qquad Z = \sum_i e^{-\beta H_i} = \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H(\omega)}\,. \tag{5.31}$$

Mit Hilfe von Markov-Ketten und *detailed balance* kann man die Erzeugung einer gewünschten Wahrscheinlichkeitsverteilung nun sogar auf einen Regel zur Würfelung eines einzelnen Spins reduzieren. Erfüllt eine solche lokale Regel nämlich *detailed balance*, so ist leicht zu sehen, daß dies für einen *sweep*, also die Anwendung der lokalen Regel zukzessive auf alle Spins des Gitters, ebenfalls gilt.

Bei der Anwendung eines Markov-Prozesses zur Erzeugung einer Wahrscheinlichkeitsverteilung sind zwei weitere Dinge zu beachten:

1. Die stationäre Verteilung stellt sich erst asymptotisch ein, d.h. man muss dem eigentlichen Messprozess eine *Thermalisierungsphase* mit $N_t \gg 1$ Markov-Schritten voranstellen, in der der Prozess seine Abhängigkeit von der Anfangsverteilung verliert. Der optimale Wert von N_t hängt vom verwendeten Algorithmus, der Temperatur, der Systemgröße etc. ab. Er muß emprisch bestimmt werden und schwankt typischerweise zwischen $N_t = 50$ und $N_t = 10000$.

2. Nach Thermalisierung sind zwar alle Zufallsvariablen X_k nach der stationären Wahrscheinlichkeit $W_i = W(\omega_i)$ verteilt, allerdings wegen der Markov-typischen

[11] Der Beweis, daß die angegebene Form von W_i stationär ist, folgt trivialerweise aus

$$(PW)_i = \sum_k P_{ik} W_k = \sum_k P_{ik}\, \frac{r_k}{\sum_\ell r_\ell} \stackrel{(*)}{=} \sum_k r_i\, \frac{P_{ki}}{\sum_\ell r_\ell} = r_i \frac{\sum_k P_{ki}}{\sum_\ell r_\ell} = \frac{r_i}{\sum_\ell r_\ell} = W_i\,.$$

```
init(β, h)
{
  initialize spin−lattice ω = {s_x} with arbitrary values
  for i=1 to N_t do
    ω = sweep(β, h)  // thermalize with N_t sweeps
}

draw(β, h)
{
  for a = 1 to N_a do
    ω = sweep(β, h)  // destroy autocorrelations
  return ω
}
```

Listing 5.2: Markov-Prozess zur Erzeugung einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

Abhängigkeit vom Vorgänger nicht immer statistisch unabhängig. Da solche *Autokorrelationen* exponentiell mit der MC-Zeit (Zahl der Markov-Schritte) zerfallen, muß man also zwischen zwei Messungen einer Observablen eine gewisse Anzahl N_a von Markov-Zwischenschritten einfügen.

Dies ist besonders in der Nähe von Phasenübergängen problematisch, da die effektive Zerfallsdauer τ von Korrelationen mit der räumlichen Korrelationslänge ξ im Gitter zunimmt, $\tau \sim \xi^z$ mit $z \approx 2$ für lokale Algorithmen. In der Nähe des Phasenübergangs muß man also exponentiell viele Zwischenschritte einfügen um Autokorrelationen zu beseitigen (*critical slowing down*). Spezielle nicht-lokale Cluster-Algorithmen haben $z = 0$ und werden deshalb beim Phasenübergang nicht abgebremst; wir verweisen hierfür auf die angegebene Literatur.

Die generelle Anwendung von Markov-Prozessen ist in Listing 5.2 zusammengefasst und kann leicht mit der MC-Methode 5.1 kombiniert werden. Die zentrale Routine `sweep()` erzeugt sukzessive jeden Spin des Gitters durch einen stochastischen *update* aus dem vorhandenen Wert und einer geeigneten Übergangswahrscheinlichkeit P. Beispiele für solche Algorithmen werden im nächsten Abschnitt angegeben.

5.6 Update-Algorithmen

5.6.1 Der Metropolis-Algorithmus

Der erste Simulationsalgorithmus der statistischen Physik wurde 1953 von Metropols *et al.* gefunden. Die Übergangswahrscheinlichkeit lautet

$$P_{ij} = P(\omega_i \leftarrow \omega_j) = \begin{cases} \exp\left[-\beta\Big(H(\omega_i) - H(\omega_j)\Big)\right] & : \quad H(\omega_i) \geq H(\omega_j) \\ 1 & : \quad H(\omega_i) < H(\omega_j) \end{cases} \tag{5.32}$$

Übergänge, die die Energie verringern werden also sofort akzeptiert, aber auch Erhöhungen der Energie sind mit endlicher Wahrscheinlichkeit möglich. Der Beweis von *detailed balance* für diesen Algorithmus ist trivial.

Wie oben bereits erwähnt kann der *update* $\omega_i \leftarrow \omega_j$ der gesamten Konfiguration durch sukzessive *updates* jedes einzelnen Spins nach derselben Vorschrift ersetzt werden. Dies gilt generell, da mit P auch $\widetilde{P}_{ij} = \sum_k P_{ik}P_{kj}$ eine korrekte Übergangswahrscheinlichkeit ist, d.h. $\widetilde{P}$ erfüllt *detailed balance* wenn dies für P gilt und umgekehrt. Man kann also einen gültigen Übergang für das gesamte Gitter immer aus lokalen *updates* der einzelnen Spins zusammensetzen.

Der Metropolis-Algorithmus ist sehr universell, aber auch ineffizient da er relativ langsam thermalisiert und sich nur recht gemächlich durch den Zustandsraum bewegt. Dies führt wiederum zu Autokorrelationen, die durch eine große Zahl von Zwischenschritten N_a verringert werden müssen. Technisch liegt dies daran, daß der Algorithmus mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit gar nichts macht, also einen *update* komplett ablehnt und sich nicht „weiterbewegt“. Eine Erhöhung der Akzeptanzrate kann durch sog. *multihits* erreichen kann: Hierbei wird im Falle einer Ablehnung eines vorgeschlagenen *updates* nicht einfach zum nächsten Spin übergegangen, sondern es wird mehrfach versucht, eine erfolgreichen *update* durchzuführen.[12] Die Entscheidung entweder mehrfach an einem Spin zu arbeiten oder zum nächsten Spin überzugehen wird idealerweise so gesteuert, daß die Akzeptanzrate bei annähernd 50% liegt.

Der Metropolis-Algorithmus hat heute keine praktische Bedeutung mit Ausnahme der folgenden Verallgemeinerung

$$P_{ij} = P(\omega_i \leftarrow \omega_j) = \begin{cases} Q_{ij} \cdot \exp\left[-\beta\Big(H(\omega_i) - H(\omega_j)\Big)\right] & : \quad H(\omega_i) \geq H(\omega_j) \\ Q_{ij} & : \quad H(\omega_i) < H(\omega_j) \end{cases}$$

Hierbei ist Q beine beliebige ergodische Übergangswahrscheinlichkeit, die *mikroreversibel* ist, also $Q_{ij} = Q_{ji}$. Dieses Theorem besagt, daß jede mikroreversible Übergangswahrscheinlichkeit Q durch einen nachgeschalteten Metropolis-Schritt „korrigiert“ werden kann, so daß ein gültiger Algorithmus entsteht. Hiervon macht man häufig Gebrauch, um einen effizienten Algorithmus Q auf das gesuchte Spinsystem „anzupassen“. Da Q hierbei „fast“ die richtige Übergangswahrscheinlichkeit ist, wird die Akzeptanzrate im Metropolis-Schritt groß und die Effizienz ist nicht wesentlich beeinträchtigt.

5.6.2 Der Wärmebad-Algorithmus

Hierbei handelt es sich formal um den $N_{\text{try}} \to \infty$ Limit des *multihit* Metropolis-Algorithmus. Jeder Spin im Gitter wird so gewählt, dass er im thermodynamischen Gleichgewicht mit seinen nächsten Nachbarn ist.

$$\begin{aligned} P_{ij} &= Z^{-1} \exp\big(-\beta H(\omega_i)\big) \qquad \text{unabhängig von } j \\ Z &= \sum_{\omega_k} \exp\big(-\beta H(\omega_k)\big)\,. \end{aligned} \tag{5.33}$$

Da der *update* also gar nicht vom vorherigen Wert eines Spins abhängt, hat dieser Algorithmus viel geringere Autokorrelationen und thermalisiert wesentlich schneller als *Metropolis*. Er ist jedoch weniger universell, und die lokale *update*-Regel muss für

[12] Man kann sich leicht davon überzeugen, daß diese Vorschrift ebenfalls *detailed balance* erfüllt.

```
sweep(β, h)
{
  for all spins s in the lattice do
  {
    for t=1 to N_try                      // multihits
    {
      s1 = random_bit(-1,1)               // choose new spin
      dH = change(s, s1)                  // change in energy due to s->s1
      if(dH < 0)
        s = s1                            // accept update
      else
      {
        r = uniform(0,1)                  // uniformly distributed number
        if r < exp(-β dH)
          s = s1                          // accept increase in energy
        else
          pass                            // reject: keep old spin s
      }
    }
  }
}
```

Listing 5.3: *multihit* Metropols-Algorithmus

jede Hamiltonfunition individuell gefunden werden, sofern eine analytische Formel und eine effiziente Implementierung überhaupt existieren, was nicht selbstverständlich ist. (Ggf. kann auch ein nicht vollständig korrekter Wärmebad-Algorithmus durch einen nachgeschalteten Metropolis-Schritt angepasst werden.) Für den Fall des Ising-Modells lässt sich ein Wärmebad-Algorithmus jedoch leicht finden, cf. Listing 5.4.

```
sweep(β, h)
{
  for all spins s_x in the lattice do
  {
    delta = sum of 2d nearest neighbouring spins of s_x
    k = β (J delta + h)
    z = 2 cosh(k)
    q = exp(-k) / z
    r = uniform(0, 1)
    if(r < q) s_x = 1 else s_x = -1
  }
}
```

Listing 5.4: Wärmebad-Algorithmus für das Ising-Modell

5.7 Aufgaben

Aufgabe 1:

a. Berechnen Sie π nach dem MC-Verfahren durch gleichverteilte Stichprobenpunkte (x, y) im Einheitsquadrat.

b. Implementieren Sie einen Zufallszahlengenerator für einen normalverteilte reellen Freiheitsgrad mit Mittelwert μ und Breite σ. Berechnen Sie hiermit $I = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \exp(-t^2/2)$ durch MC-Integration.

Aufgabe 2:

Betrachten Sie das Ising-Modell in $d = 2$ Dimensionen mit verschwindendem externen Feld $h = 0$ und periodischen Randbedingungen auf einem $(L \times L)$-Gitter. Berechnen Sie die innere Energiedichte $\epsilon = \langle H \rangle / L^2$ sowie die Magnetisierung $\langle m \rangle$ und $\langle |m| \rangle$ als Funktion der inversen Temperatur $\beta \in [0, 1]$ durch direkte Summe über alle Konfigurationen, vgl. (5.25). Verwenden Sie Gitter der Größe $L = 2, 3, 4$. Vergleichen Sie die Resultate mit den analytischen Vorhersagen in Abschnitt 5.4.

Aufgabe 3:

a. Implementieren Sie den *multihit* Metropolis-Algorithmus für das planare Ising-Modell und berechnen Sie innere Energiedichte, Magnetisierung und spezifische Wärme als Funktion der Temperatur bei $h = 0$. Arbeiten Sie mit einem Gitter der Größe 128×128 und bestimmen Sie die optimalen Thermalisierungszeiten und *multihit*-Parameter.

b. Wählen Sie jetzt $\beta = 0.4406868$ und bestimmens sie Energiedichte, $\langle |m| \rangle$ und $\langle m^2 \rangle$ mit jeweils 200000 *sweeps* auf Gittern der Größe (4×4), (8×8) und (32×32). Vergleichen Sie die (4×4)- Resultate mit den exakten Vorhersagen aus Abschnitt 5.4

Aufgabe 4:

a. Wiederholen Sie Aufgabe **A3** mit Hilfe des Wärmebad-Algorithmus.

b. Wählen Sie β in der ferromagnetischen Phase und starten Sie mit einem äußeren Mangetfeld h. Reduzieren Sie h schrittweise auf $h = 0$ bei konstantem β und wiederholen Sie diese Prozedur für beide Vorzeichen von h. Kann bei $h \to 0$ Hysterese beobachtet werden?

c. Bestimmen Sie die Magnetisierung $\langle m \rangle$ und $\langle |m| \rangle$ als Funktion von Temperatur β sowie externem Feld h und geben Sie das Phasendiagramm als 3D-Plot aus.

5.8 Literatur

- A. Wipf, *Statistical Approach to Quantum Field Theory*, Springer Lecture Notes in Physics **864** (2013)
- G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Perseus Books, Reading, Massachusetts (1988).
- L. Onsager, *Crystal statistics*, Phys. Rev. **65** (1944) 117.
- H.J. Rothe, *Lattice Gauge Theories*, 3rd Edition, World Scientific (2005)