

Monte Carlo Simulation des Ising Modell

Niek Andresen, Robert Hartmann, Jan Fabian Schimd

WS 14/15

Inhaltsverzeichnis

1 Problemstellung und Theorie	2
1.1 Das Ising-Modell	2
1.2 Monte-Carlo-Simulation und Metropolis-Algorithmus	2
1.3 Ziele	2
2 Das Programm	3
2.1 Allgemeiner Aufbau	3
2.2 Im Detail: Konvergenz des Metropolis Algorithmus	3
2.3 Im Detail: Funktion weiterer Parameter	3
3 Ergebnisse und Auswertung	4
3.1 Phasenübergang zwischen Hoch- und Niedertemperaturphase	4
3.1.0.1 2D-Modell	4
3.1.0.2 3DModell	5
3.2 Schaltverhalten im Magnetfeld	7
4 Alternative: Cluster Monte Carlo Algorithmen	9
4.1 Wolff-Algorithmus	9
4.2 Flipp-Wahrscheinlichkeit des Clusters = 1	9
4.3 Konvergenzverhalten im Vergleich	10
5 Zusammenfassung	11
6 Quellen	12

1 Problemstellung und Theorie

1.1 Das Ising-Modell

Das Ising-Modell beschreibt näherungsweise den Ferromagnetismus in Festkörpern. Hierbei wird ein Kristall als äquidistantes Gitter gesehen, an dessen Gitterpunkten sich einzelne Spins befinden, welche ein magnetisches Moment haben. In der Näherung verändern sich die Positionen der Spins nicht. Nimmt man zusätzlich an, dass nur nächste Nachbarn im Gitter sich gegenseitig beeinflussen und beschränkt man nun noch die Spins in ihre z-Richtung und lässt sie nur zwei diskrete Werte annehmen (± 1), ergibt sich der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i$$

wobei $S_i \in \{-1, +1\}$. J ist die Kopplungskonstante zwischen benachbarten Spins, während die Summe nur über nächste Nachbarn $\langle i, j \rangle$ geht. B ist ein äußeres Magnetfeld.

Somit liefern entgegengesetzte gerichtete Nachbarn einen positiven Energiebeitrag und gleichgerichtete einen negativen (für $J > 0$).

1.2 Monte-Carlo-Simulation und Metropolis-Algorithmus

Zur Simulation dieses Systems im Ising-Modell wird die Monte-Carlo-Methode verwendet. Hierbei werden mit Hilfe von Zufallszahlen mögliche Konfigurationen des Systems erstellt. Um einen einfachen Mittelwert einer gesuchten Größe bilden zu können, werden Konfigurationen gemäß der Metropolis-Methode gewählt.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist die Boltzmann-Verteilung, sodass sich folgende Wahrscheinlichkeit zur Durchführung eines Spin-Flips, der eine Energieänderung von ΔE zur Folge hätte, ergibt:

$$P(S_k \rightarrow -S_k) = \min\{1, e^{(-\frac{\Delta E}{k_B T})}\}$$

1.3 Ziele

Es soll das Verhalten des Gitters bei verschiedenen Temperaturen und äußeren Magnetfeldstärken sichtbar werden. Außerdem wird die Konvergenz des Systems und damit der Größe der Gesamt magnetisierung $m = \sum_i S_i$ sowie der Energie betrachtet.

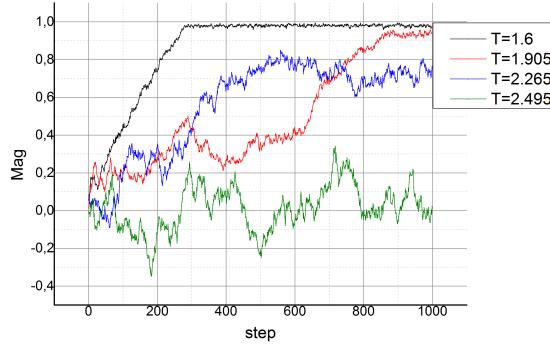
2 Das Programm

2.1 Allgemeiner Aufbau

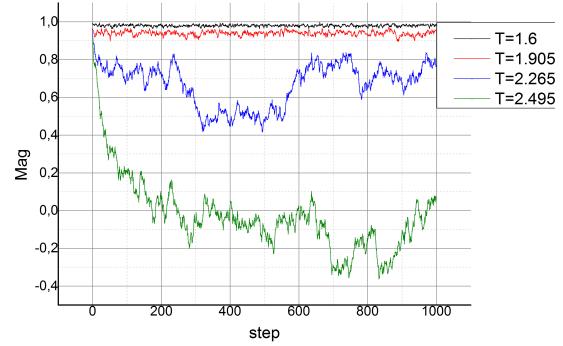
Hier die allgemeine Struktur...

2.2 Im Detail: Konvergenz des Metropolis Algorithmus

Hier der Metropolis Block eines Monte Carlo Schritts mit Konvergenzverhalten
2D



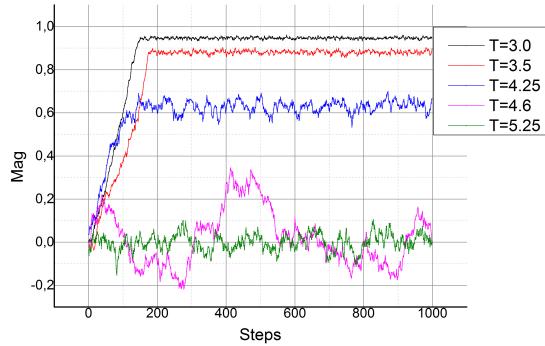
(a) zufällige Startkonfiguration



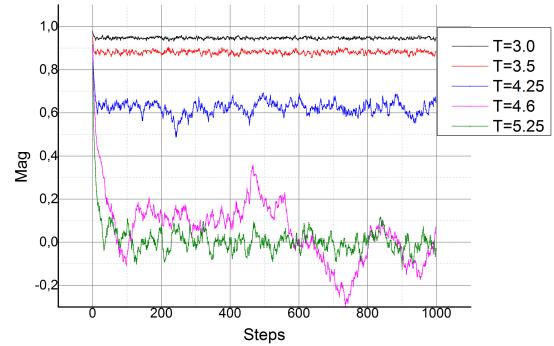
(b) positiv parallele Startkonfiguration

Abbildung 1: Konvergenzverhalten der Magnetisierung im Metropolisalgorithmus für ein zweidimensionales Gitter

3D



(a) zufällige Startkonfiguration



(b) positiv parallele Startkonfiguration

Abbildung 2: Konvergenzverhalten der Magnetisierung im Metropolisalgorithmus für ein dreidimensionales Gitter

2.3 Im Detail: Funktion weiterer Parameter

Unterschied B T Mode etc. ..

3 Ergebnisse und Auswertung

Durch die Konvergenz der Magnetisierung über eine Monte Carlo Simulation kann nun das Verhalten der Magnetisierung in Abhängigkeit von äußeren Parametern wie Temperatur und Magnetfeld untersucht werden. Hierbei ist zu beachten, dass für die Kopplungskonstante und den Boltzmannfaktor im Folgenden gilt: $J = k_b = 1$. Insbesondere folgt daraus, dass hier nur Ferromagneten betrachtet werden. Für Antiferromagneten müsste alle Simulationen mit $J = -1$ durchgeführt werden.

3.1 Phasenübergang zwischen Hoch- und Niedertemperaturphase

Um die Abhängigkeit der Magnetisierung von der Temperatur zu bestimmen, wird jeweils eine Monte Carlo Simulation pro Temperatur für ein konstantes Magnetfeld durchgeführt. Dabei kennzeichnet der Temperatur an dem die Magnetisierung auf Null zurückgeht einen kritischen Punkt, an dem ein Phasenübergang stattfindet.

3.1.0.1 2D-Modell

Als erstes wird das 2D-Ising Modell betrachtet. Als Grundlage dient ein 50x50 Gitter. Es wird je Simulation mit einem neuen Gitter gestartet und 1000 Monte Carlo Schritte ausgeführt.

Zunächst wird die Temperaturabhängigkeit ohne äußeres Feld ($B = 0$) untersucht. Durch die analytische Lösung ist die kritische Temperatur ($T_c \approx 2,269$), welche den Übergang zwischen Hoch- und Niedertemperaturphase bestimmt, bekannt, sodass ohne weiteres Simulationen von $T = 1,5$ bis $T = 3,5$ mit einem Schritt von $\Delta T = 0,005$. Hierbei werden zunächst die unterschiedlichen Auswirkungen der Startkonfigurationen betrachtet (Abb. 3).

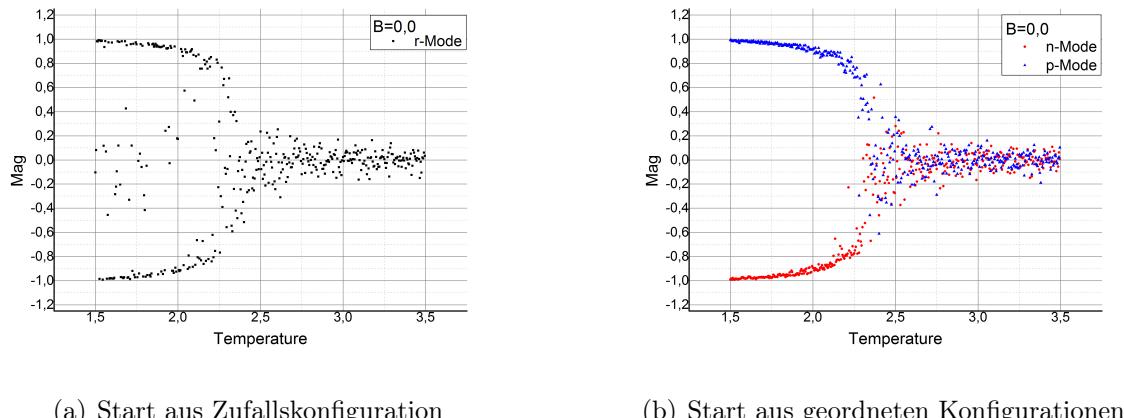


Abbildung 3: Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im 2D Ising Modells via Metropolisalgorithmus ohne äußeres Feld

Es ist erkennbar, dass sich die Wahl der Startkonfiguration nicht auf den grundsätzlichen Verlauf der Kurve auswirkt. Dabei sollten allerdings 2 Aspekte beachtet werden. Erstens erkennt man bei Start in einer zufälligen Konfiguration einige Ausreißer im Bereich $T < T_c$, in denen einige Simulationen offensichtlich nicht konvergierten. Zweitens führt eine positive Startkonfiguration trivialerweise zu einer Konvergenz zum positiven Wert m_0 und umgekehrt. Daraus folgt, dass es für diesen Bereich zwei Energieminima bei $\pm m_0$ gibt, welche bei Start in zufälliger Konfiguration gleich wahrscheinlich erreicht werden können, bei geordneter Startkonfiguration jedoch nur näheres erreicht wird. Gleich bleibt jedoch das große Rauschen um

T_c , welches zu einer großen Ungenauigkeit bei der Bestimmung der Curie-Temperatur führt, jedoch liegt sie mit einer Abschätzung von $T_c \approx 2,26 \pm 0,02$ absolut im erwarteten Bereich. Hier ist eine Unstetigkeit in der ersten Ableitung zu erkennen, welche den Phasenübergang kennzeichnet. Auch ein kleineres Rauschen für $T > T_c$ mit einer Bandbreite von $\pm 0,2 = 0,4$ ist in allen Simulationen vorhanden. Um dieses Rauschen zu minimieren könnte man mit größeren Gittern arbeiten, diese erzeugen jedoch auch mehr Ausreißer im Bereich $T < T_c$.

Für eine optimale Auflösung empfiehlt sich für Metropolis Algorithmen ohne äußeres Feld folglich zwei Simulationen, je eine aus positiver und negativer Startkonfiguration.

Nun soll die Auswirkung eines äußeren Feldes auf die Temperaturabhängigkeit betrachtet werden. Dazu wird obige Simulation für die Felder $B = \pm 0,1$ im Bereich $T = 1,5$ bis $T = 5,0$ und $B = \pm 0,4$ im Bereich $T = 1,5$ bis $T = 7,0$ durchgeführt. Dabei wird die Schrittweite auf $\Delta T = 0.01$ bzw. $\Delta T = 0.02$ erhöht (Abb. 4). Für Simulationen mit äußerem Feld kann bedenkenlos aus zufälliger Konfiguration gestartet werden, da das angelegte Feld Ausreißer für $T < T_c$ verhindert und das Vorzeichen des angenommen Werts bestimmt. Bei geordneter Startkonfiguration ist die zweite Bedingung nicht zwingend erfüllt, wie Kapitel 3.2 zeigen wird.

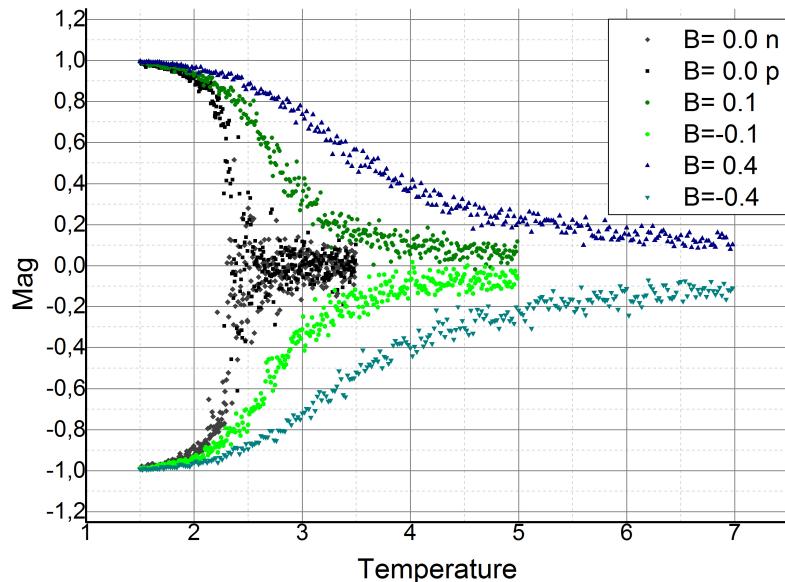


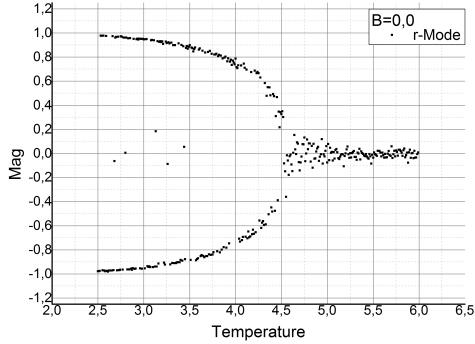
Abbildung 4: Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im 2D Ising Modells via Metropolisalgorithmus für verschiedene äußere Felder

Während ohne äußeres Feld die Magnetisierung an T_c steil abfällt und (bis auf ein Rauschen) auf Null zurückgeht, treten bei angelegtem Feld Ausschmierungen auf, sodass sich die Kurve asymptotisch der Null nähert und man weiterhin zwischen negativem und positivem Arm unterscheiden kann, welche dan jeweils mit etwa 0,2 zum Grundrauschen beitragen. Auch nimmt die Größe der Ausschmierung bei stärkeren Feldern weiter zu.

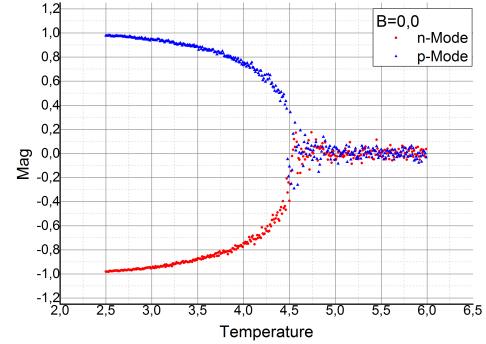
3.1.0.2 3DModell

Nun wird das die Temperatur im 3D-IsingModell untersucht. Um in vertretbarem Rechenaufwand zu bleiben, wird ein 20x20x20 Gitter benutzt. Jede Simulation startet mit einem neuem Gitter und führt wiederum 1000 Schritte aus.

Als erstes wird wieder die Auswirkung der Startkonfiguration auf Simulationen ohne äußeres Feld untersucht (Abb. 5). Die Simulationen laufen jeweils von $T = 2,5$ bis $T = 6,0$ mit einer Schrittweite von $\Delta T = 0,01$.



(a) Start aus Zufallskonfiguration



(b) Start aus geordneten Konfigurationen

Abbildung 5: Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im 3D Ising Modells via Metropolisalgorithmus ohne äußeres Feld

Zunächst ist erkennbar, dass der grundsätzliche Verlauf mit dem der 2D-Simulation übereinstimmt. Jedoch fällt auf, dass deutlich weniger Ausreißer im Bereich $T < T_c$ existieren und auch das Grundrauschen hat deutlich abgenommen. Es liegt nur noch bei etwa $\pm 0,1 = 0,2$. Ersteres liegt vermutlich an der kompakteren Struktur, also der höheren Anzahl an direkten Nachbarn. Zweiteres kommt durch die größere Anzahl an Spins (Gitterpunkten) zustande. Im 3D-Modell ist bei geeigneten Werten die Startkonfiguration auch für Simulationen ohne äußeres Feld zweitrangig. In beiden Fällen kann die Curie-Temperatur mit $T_c \approx 4,5 \pm 0,02$ abgeschätzt werden.

Auch bei der Untersuchung der Einwirkung verschiedener äußerer Felder treten die gleichen Effekte analog zum 2D-Modell auf. Für die Simulation von $B = \pm 0,1$ wurden Temperaturen von $T = 2,5$ bis $T = 9,0$ mit Schrittweite $\Delta T = 0,02$ und für $B = \pm 0,4$ Temperaturen von $T = 2,5$ bis $T = 12,0$ mit Schrittweite $\Delta T = 0,025$ betrachtet (Abb. 6).

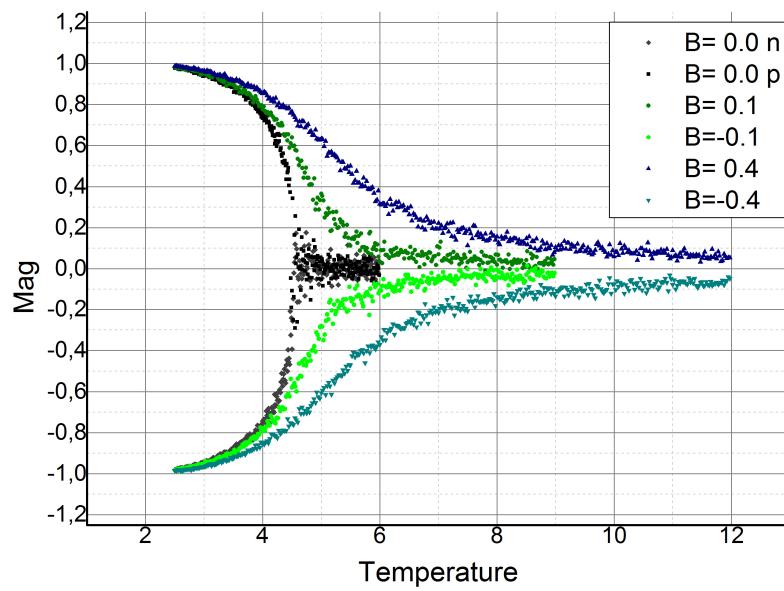


Abbildung 6: Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im §D Ising Modells via Metropolisalgorithmus für verschiedene äußere Felder

3.2 Schaltverhalten im Magnetfeld

Als zweites soll die Abhängigkeit der Magnetisierung vom äußeren Feld betrachtet werden. Dies soll Aufschluss über das Schaltverhalten der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen liefern. Dazu wird zu Beginn einmal ein Gitter erstellt auf welchem alle Simulationen der verschiedenen Feldstärken hintereinander ausgeführt werden, sodass ein tatsächlicher Sweep des externen Magnetfelds auf einem Gitter simuliert wird. Um das komplette Schaltverhalten zu beobachten, wird der Sweep in beiden Richtungen ausgeführt. Die Ergebnisse für das 2D- und 3D-Modell zeigt Abbildung 7. Hierbei wurde das externe Feld jeweils zwischen $B = \pm 1$ bzw $B = \pm 1,5$ mit einer Schrittweite von $\Delta B = 0,01$ variiert. Je Schritt des externen Felds wurde eine Simulation mit 1000 Monte Carlo Schritte ausgeführt. Für die 2D-Simulationen wurde erneut ein 50x50 Gitter und für die 3D-Simulationen ein 20x20x20 Gitter verwendet.

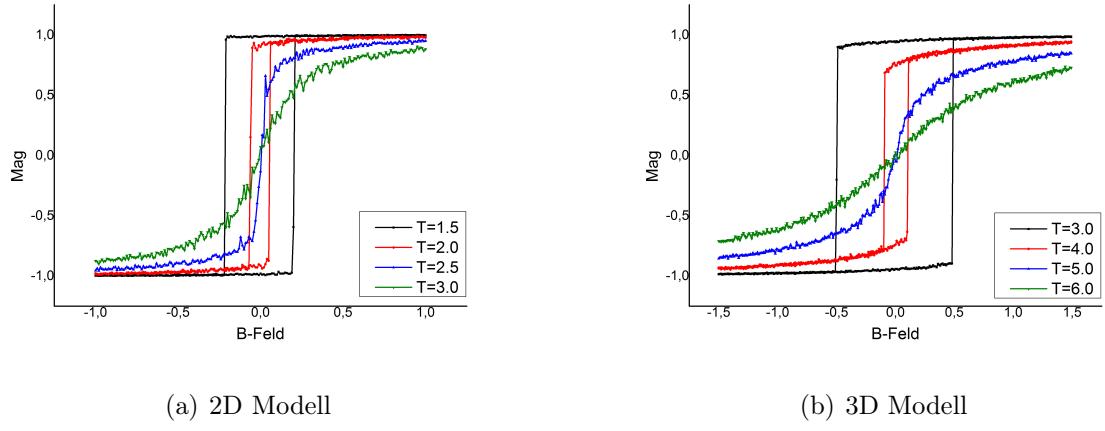


Abbildung 7: Abhängigkeit der Magnetisierung von einem externen Magnetfeld, Simulation via Metropolisalgorithmus auf einem Gitter

In beiden Fällen ist zu erkennen, dass sich für $T < T_c$ eine Hysterese herausbildet, welche immer schmäler wird, je näher sich T T_c annähert. Zudem ist zu beobachten, dass für kleine Temperaturen das Gitter komplett schaltet, während um T_c herum die Magnetisierung vor dem Schalten langsam kolabiert. Dieses Schaltverhalten lässt sich anhand der zwei Minima der freien Energie an $\pm m_0$ erklären. Diese liegen je nach Temperatur mehr oder weniger tief, für $B = 0$ jedoch auf selber Höhe (Gleichgewicht). Im Falle eines externen Feldes verschiebt sich das Gleichgewicht zu Gunsten des angelegten Feldes. Ein Umschalten findet folglich erst statt, wenn aus dem ungünstigem Extrema ein Wendepunkt geworden ist, was je nach Temperatur bei unterschiedlichen $|B| > 0$ der Fall ist (Abb. 8b). An T_c selbst ist erstmals keine Hysterese mehr zu erkennen, da ab hier nur noch ein einziges Minimum bei $m = 0$ besteht (Abb. 8a). Für $T > T_c$ ist ein kontinuierlicher Übergang der Magnetisierung zu beobachten, welcher durch den Ursprung verläuft. Dies deckt sich mit den Ergebnissen der Simulationen zur Temperaturabhängigkeit Kapitel 3.1. Für höhere Temperaturen ist entsprechend ein stärkeres Feld nötig um eine komplette Magnetisierung zu erreichen.

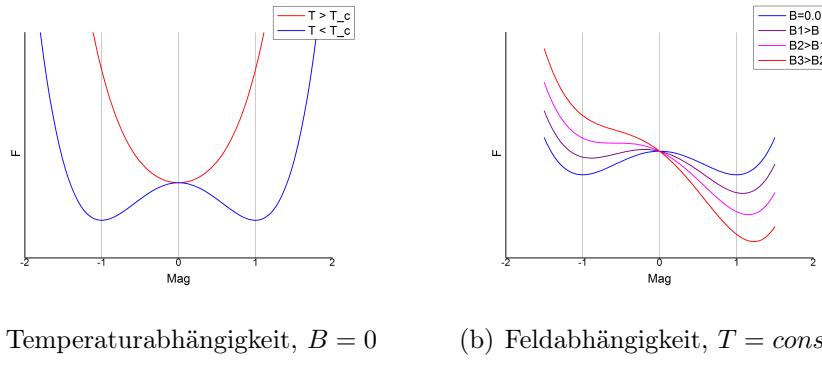


Abbildung 8: schematischer Verlauf der freien Energie in Abhängigkeit der Magnetisierung. Auswirkung der Temperatur und des externen Magnetfelds

4 Alternative: Cluster Monte Carlo Algorithmen

Clusteralgorithmen wirken dem Problem hoher Autokorrelationszeiten im Bereich des Phasenübergangs entgegen.

Um dies zu erreichen arbeiten sie nicht mehr nur Lokal, wie der Metropolis Algorithmus, sondern bilden größere Bereiche (Cluster), die auf einmal manipuliert werden.

4.1 Wolff-Algorithmus

Der Wolff-Algorithmus ist ein Cluster-Algorithmus, der pro Monte-Carlo-Schritt von einem zufälligen Startpunkt aus ein Cluster bildet und dann mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit alle Spins innerhalb des Clusters flippt.

Allgemeiner Programmablauf:

1. Startkonfiguration (Abbildung 4.1)
2. Bestimme einen zufälligen Startpunkt (Abbildung 4.2)
3. Ausgehend vom Startpunkt werden benachbarte Atome mit gleichem Spin mit Wahrscheinlichkeit p in den Cluster aufgenommen (Abbildung 4.3a,b,c)
4. Flippe alle Spins des Clusters mit einer Wahrscheinlichkeit (Abbildung 4.4)
5. Gehe zu 1.

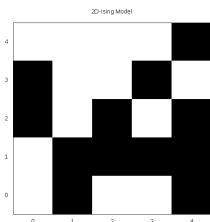


Abbildung 9

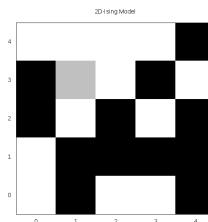


Abbildung 10

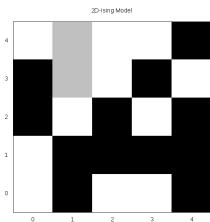


Abbildung 11

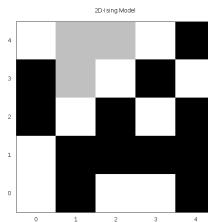


Abbildung 12

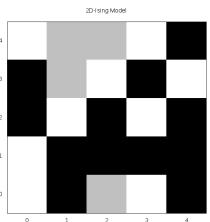


Abbildung 13

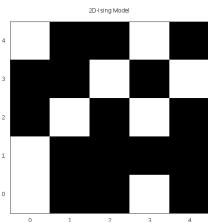


Abbildung 14

4.2 Flipp-Wahrscheinlichkeit des Clusters = 1

Der Algorithmus wird besonders effizient, da bei einer bestimmten Annahme-Wahrscheinlichkeit p , dass ein Zustand in den Cluster aufgenommen wird, der Cluster in jedem Monte-Carlo-Schritt

geflippt wird.

Warum dies so ist wird klar, wenn man sich die Wahrscheinlichkeit W_{ij} für den Übergang von der Konfiguration i zu j berechnet.

$$W_{ij} = \min\left\{1, \frac{P_j}{P_i}\right\} = \min\left\{1, \frac{A(j \rightarrow i) * P_j}{A(i \rightarrow j) * P_i}\right\} = \min\left\{1, \frac{A(j \rightarrow i) * e^{-\beta E_j}}{A(i \rightarrow j) * e^{-\beta E_i}}\right\} \quad (4.1)$$

Für die Wahrscheinlichkeit $A(i \rightarrow j)$ den Übergang von i nach j zu betrachten und für die Energie E_i im Zustand i gelten:

(Hierbei bedeutet *innen* jeweils innerhalb und *außen* außerhalb des Clusters

und n_{gleich} bzw. n_{diff} sind die Anzahl Spins, die am Rand gleich bzw. ungleich zu dem Spin innerhalb des Clusters sind.)

$$A(i \rightarrow j) = A_{innen} * (1 - p)^{n_{gleich}} \quad (4.2)$$

$$A_{innen} = p^{n_{innen}-1} + Z \quad (4.3)$$

$$E_i = E_{innen} + E_{außen} - n_{gleich} * J + n_{diff} * J \quad (4.4)$$

$$(4.5)$$

Mit Z der Wahrscheinlichkeit einen Spin im Cluster als Startpunkt gewählt zu haben.
Ebenso gilt:

$$A(j \rightarrow i) = A_{innen} * (1 - p)^{n_{diff}} \quad (4.6)$$

$$E_j = E_{innen} + E_{außen} + n_{gleich} * J - n_{diff} * J \quad (4.7)$$

$$(4.8)$$

Damit gilt:

$$W_{ij} = \min\left\{1, \frac{A_{innen} * (1 - p)^{n_{diff}}}{A_{innen} * (1 - p)^{n_{gleich}}} * \frac{e^{-\beta E_{innen} + E_{außen} + n_{gleich} * J - n_{diff} * J}}{e^{-\beta E_{innen} + E_{außen} - n_{gleich} * J + n_{diff} * J}}\right\} \quad (4.9)$$

$$= \min\left\{1, \frac{(1 - p)^{n_{diff}}}{(1 - p)^{n_{gleich}}} * \frac{e^{-\beta n_{gleich} * J} * e^{+\beta n_{diff} * J}}{e^{+\beta n_{gleich} * J} * e^{-\beta n_{diff} * J}}\right\} \quad (4.10)$$

$$= \min\left\{1, \frac{(1 - p)^{n_{diff}}}{(1 - p)^{n_{gleich}}} * \frac{e^{-2\beta n_{gleich} * J}}{e^{-2\beta n_{diff} * J}}\right\} \quad (4.11)$$

$$= \min\left\{1, \left(\frac{(1 - p)}{e^{-2\beta J}}\right)^{n_{diff}} * \left(\frac{e^{-2\beta J}}{(1 - p)}\right)^{n_{gleich}}\right\} \quad (4.12)$$

Hieraus lässt sich nun erkennen, dass die Wahrscheinlichkeit vom Zustand i zu j überzugehen gleich 1 wird, wenn wir $p = 1 - e^{-2\beta J}$ wählen.

4.3 Konvergenzverhalten im Vergleich

Der Vorteil des Cluster-Algorithmus ist die schnelle Konvergenzgeschwindigkeit in der Nähe des Phasenübergangs bzw. der kritischen Temperatur.

(Graphen)

Wie man in Abbildung 5.1 erkennt...

5 Zusammenfassung

Hier könnte ein Fazit stehen... :)

Abbildungsverzeichnis

1	Konvergenzverhalten der Magnetisierung im Metropolisalgorithmus für ein zweidimensionales Gitter	3
2	Konvergenzverhalten der Magnetisierung im Metropolisalgorithmus für ein dreidimensionales Gitter	3
3	Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im 2D Ising Modells via Metropolisalgorithmus ohne äußeres Feld	4
4	Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im 2D Ising Modells via Metropolisalgorithmus für verschiedene äußere Felder	5
5	Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im 3D Ising Modells via Metropolisalgorithmus ohne äußeres Feld	6
6	Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im §D Ising Modells via Metropolisalgorithmus für verschiedene äußere Felder	7
7	Abhängigkeit der Magnetisierung von einem externen Magnetfeld, Simulation via Metropolisalgorithmus auf einem Gitter	8
8	schematischer Verlauf der freien Energie in Abhängigkeit der Magnetisierung. Auswirkung der Temperatur und des externen Magnetfelds	8
9	9
10	9
11	9
12	9
13	9
14	9

6 Quellen

- blabla