

# Der Wolff-Algorithmus

Die Vorläufer: PRL **58** 86 (1987):

VOLUME 58, NUMBER 2

PHYSICAL REVIEW LETTERS

12 JANUARY 1987

---

## Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations

Robert H. Swendsen

*Physics Department, Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, Pennsylvania 15213, and  
Center for Simulation Physics, University of Georgia, Athens, Georgia 30602*

and

Jian-Sheng Wang

*Physics Department, Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, Pennsylvania 15213*  
(Received 28 May 1986)

A new approach to Monte Carlo simulations is presented, giving a highly efficient method of simulation for large systems near criticality. The algorithm violates dynamic universality at second-order phase transitions, producing unusually small values of the dynamical critical exponent.

...teilen das gesamte System in Cluster paralleler Spins auf. Dann werden sehr häufig nur **kleine** Cluster geflippt.

---

**Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems**

Ulli Wolff

*Institut für Theoretische Physik, Universität Kiel, D-2300 Kiel, West Germany*

(Received 13 October 1988)

A Monte Carlo algorithm is presented that updates large clusters of spins simultaneously in systems at and near criticality. We demonstrate its efficiency in the two-dimensional  $O(n)$   $\sigma$  models for  $n=1$  (Ising) and  $n=2$  ( $x$ - $y$ ) at their critical temperatures, and for  $n=3$  (Heisenberg) with correlation lengths around 10 and 20. On lattices up to  $128^2$  no sign of critical slowing down is visible with autocorrelation times of 1–2 steps per spin for estimators of long-range quantities.

PACS numbers: 05.50.+q, 11.15.Ha

Recently Swendsen and Wang (SW)<sup>1</sup> have put forward a novel Monte Carlo algorithm for Potts spin models using ideas from percolation theory.<sup>2</sup>

...untersucht jeweils nur **einen** Cluster, der aber per Konstruktion dazu neigt, **groß** zu sein.

# Die Schritte des Wolff-Algorithmus

- 1) Zufällige Auswahl eines Spins
- 2) Konstruktion eines Clusters  $C$  von Spins gleicher Richtung um diesen Spin herum.
- 3) Flippen des **ganzen** Clusters mit **Akzeptanzwahrscheinlichkeit 1**.

⇒ Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand  $i$  (vor dem Cluster-Flip) zum geflippten Zustand  $j$  ist gleich der Wahrscheinlichkeit, dass der Cluster  $C$  **entsteht**, denn nach seiner Entstehung wird er **sicher** geflippt.

Der Cluster  $C$  ist **nicht** gleich der Domäne **aller** parallelen Spins, sondern **kleiner**, da Spins nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit  $p_C$  in den Cluster aufgenommen werden.  $p_C$  ist entscheidend für die Entstehungswahrscheinlichkeit eines Clusters und für die Einhaltung des **detaillierten Gleichgewichts**.

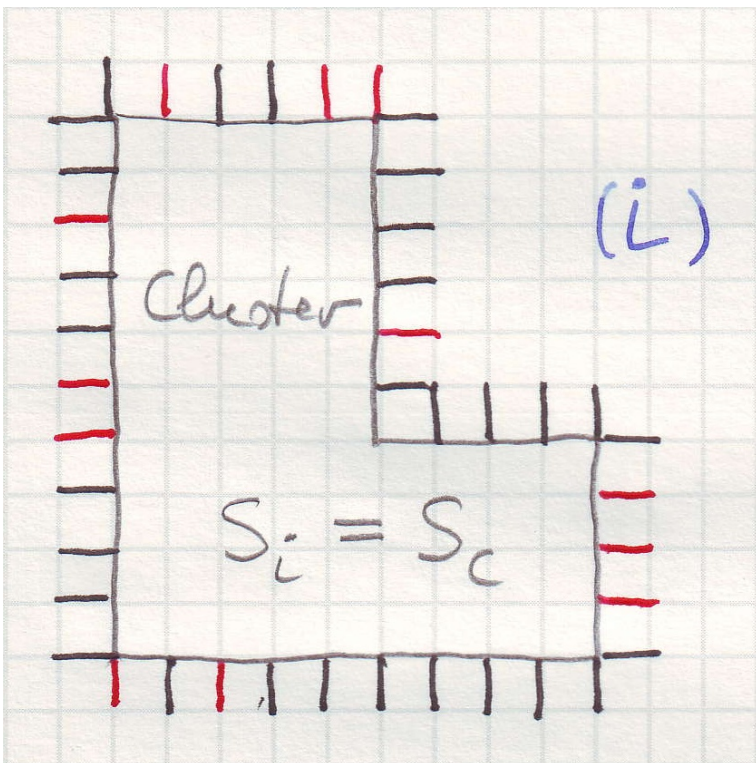
## Schritt 2 im Detail: Konstruktion des Clusters

- 2a) Sei  $S_n \in C$  ein Spin, der noch nicht „bearbeitet“ wurde.  
Gehe dann alle Nachbarn  $S_m \notin C$  von  $S_n$  durch:
- 2b)  $S_m \neq S_n \Rightarrow S_m \notin C$  (...wird also **nicht** zu  $C$  hinzugefügt)  
 $S_m = S_n \xrightarrow{p_C} S_m \in C$  (...wird mit Wahrscheinlichkeit  $p_C$  hinzugefügt und als „unbearbeitet“ markiert)
- 2c) Wenn alle Nachbarn  $S_m$  durchgegangen wurden, markiere  $S_n$  als „bearbeitet“.  
Dann weiter mit 2a) bis alle Spins  $\in C$  „bearbeitet“.

Zu führende Listen: Spins  $\in C$  und „unbearbeitete“ Spins  $\in C$  .

Es bleibt die Bestimmung der Wahrscheinlichkeit  $p_C$  so dass das detaillierte Gleichgewicht gewährleistet ist: Die Wahrscheinlichkeiten für die Zustandsänderung (Cluster-Flip)  $i \rightarrow j$  und den inversen Flip  $j \rightarrow i$  müssen in einer Beziehung zur Energiedifferenz  $E_i - E_j$  stehen.

## Das mysteriöse $p_C$



So sieht ein „fertiger“ Cluster mit Spinrichtung  $S_C$  aus. Er hat  $N$  Bonds nach außen, davon

$m$  Bonds zu Spins  $S_i = S_C$  und  $N - m$  Bonds zu Spins  $S_i = -S_C$ .

Alle  $N$  Bonds sind bei der Entstehung des Clusters angeschaut worden. (Sonst wäre er noch nicht fertig.)

Die Wahrscheinlichkeit, dass gerade  $\text{diese } N$  Bonds als „Enden“ des Clusters ausgewählt wurden, ist

$$(1)^{N-m}(1 - p_C)^m.$$

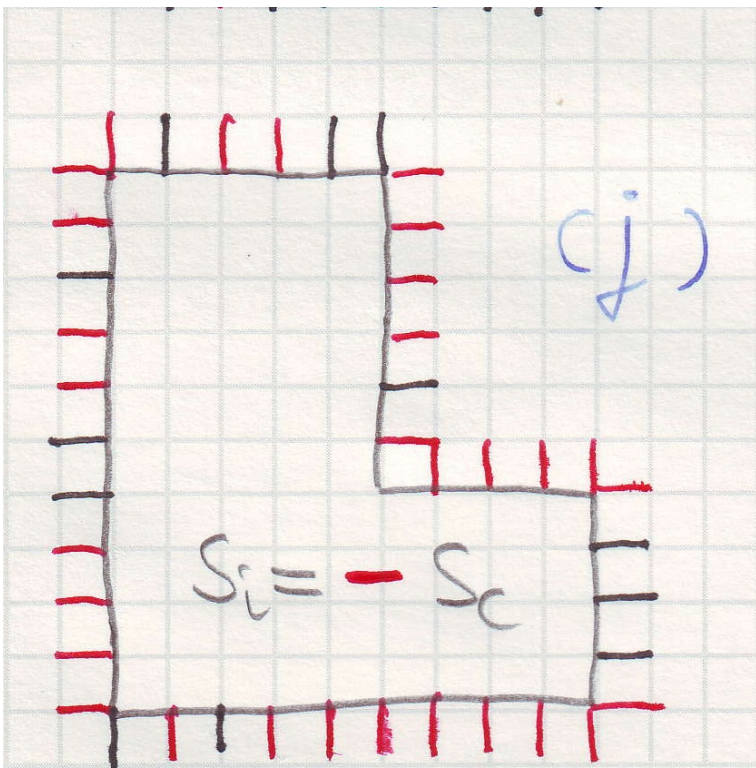
Die Wahrscheinlichkeit, dass das Innere des Clusters (lauter Bonds zwischen parallelen Spins) in dieser Form entstanden ist, ist  $p_I$ , eine Zahl, die wir **nicht** berechnen werden müssen.

Insgesamt ist also die **Entstehungswahrscheinlichkeit** des Clusters

$$p_I(1 - p_C)^m.$$

Dieser Cluster wird komplett geflippt ( $i \rightarrow j$ ). Die Wahrscheinlichkeit, dass genau dieser Cluster geflippt wird (und kein anderer), ist gleich der Entstehungswahrscheinlichkeit dieses Clusters, denn geflippt wird er nach der Entstehung auf jeden Fall! Für das detaillierte Gleichgewicht muss diese Wahrscheinlichkeit mit der für den inversen Flip verknüpft sein.





Nach dem Cluster-Flip haben wir alle (parallelen) Spins im Inneren des Clusters umgedreht ( $S_C \rightarrow -S_C$ ) und am Rand  $m$  Bonds zu Spins  $S_i = S_C$  sowie  $N - m$  Bonds zu Spins  $S_i = -S_C$ . Die Wahrscheinlichkeit, dass aus dieser Gesamt-Spinkonfiguration ein Cluster in den gleichen Grenzen wie vorher entsteht, ist offenbar

$$p_I(1 - p_C)^{N-m}.$$

Das Verhältnis für die „Vorschlagswahrscheinlichkeiten“ für die beiden Flips „hin“ ( $i \rightarrow j$ ) und „zurück“ ist damit

$$\frac{V_{ji}}{V_{ij}} = (1 - p_C)^{N-2m}. \quad (48)$$

Die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen ist (Kopplungskonstante  $J$  zwischen nächsten Nachbarn, kein äußeres Feld) ist

$$E(j) - E(i) = mJ + (N - m)(-J) - (N - m)J - m(-J) = 2(2m - N)J. \quad (49)$$

Mit der „detailed balance“-Bedingung

$$\frac{V_{ji}}{V_{ij}} = e^{\beta(E(j)-E(i))} \quad (50)$$

ist dann

$$(1 - p_C)^{N-2m} = e^{-\beta(2(N-2m))J} \quad \Rightarrow \quad p_C = 1 - e^{-2\beta J}. \quad (51)$$

Dazu noch ein paar abschließende Bemerkungen:

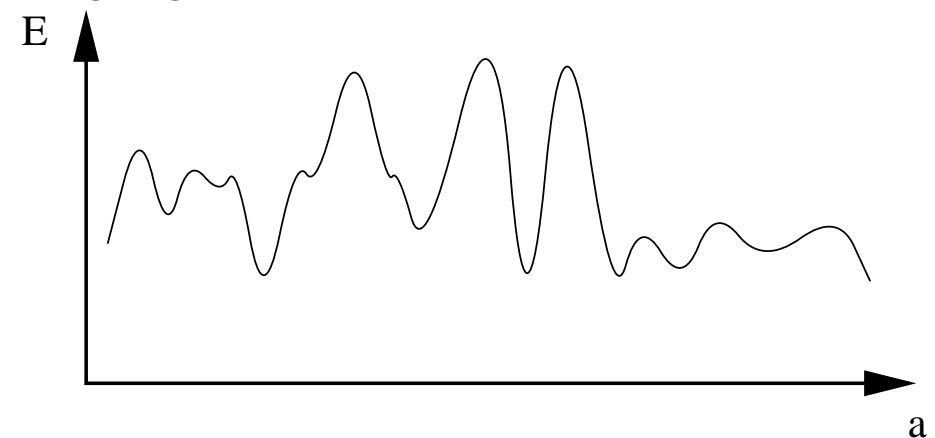
- $p_C$  ist  $T$ -abhängig: Für hohe  $T$  ist  $p_C$  klein und der gebildete Cluster ist viel kleiner als die vollständige Domäne: Bei großen thermischen Fluktuationen können die Spins unabhängig flippen.
- Der dynamische Exponent ist  $z_{\text{Wolff}} \approx 0.15$ , also **viel** kleiner als beim Einzelspin-Flip. Damit gibt es auch nahe der kritischen Temperatur kaum critical slowing down.
- Die „Dynamik“, die das System im Laufe der Simulation zeigt, hat auch hier **nichts** mit der tatsächlichen physikalischen Dynamik zu tun, sondern dient nur dazu, möglichst rasch eine Gleichgewichtsverteilung herzustellen.

## §11.7 Optimierungsprobleme (The traveling salesperson; Grundzustände bei konkurrierenden Wechselwirkungen)

TSP: Es soll eine Rundreise zu  $N$  Städten gemacht werden, ohne eine zweimal zu besuchen und mit minimaler Gesamtlänge.

Exakte Lösung benötigt  $\sim e^N$  Schritte; das Problem ist „NP-vollständig“.

Weglänge im TSP als Funktion eines Parameters:



(NP heißt nondeterministic polynomial: Es gibt einen Lösungsweg polynomialer (in  $N$ ) Länge, der sich in einem exponentiell verzweigten „Baum“ versteckt. NP-vollständig heißt ein Problem, wenn seine Lösung die Lösung **aller** NP-Probleme impliziert.)

Die **exakte** Lösung des Problems ist das absolute Minimum in einem hochdimensionalen zerklüfteten Parameterraum. Der entscheidende Schritt ist es, auf das **globale Minimum** zu verzichten und lediglich eine **ziemlich kurze** Route zu suchen.

**Greedy algorithm:** Wähle eine zufällige Route, generiere eine zufällige Änderung und akzeptiere diese, wenn sie die Länge  $E$  absenkt. Bleibt immer in einem **lokalen Minimum** stecken.

Aussichtsreicher: Akzeptiere mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit auch Änderungen, die  $E$  **erhöhen**, um lokale Barrieren zu überschreiten. Das ist der Geist von Metropolis!



Rezept: **Starte** mit irgendeiner Route, z.B. alphabetisch, und mit einer hohen Temperatur, wobei die Länge  $E$  jetzt als Energie interpretiert wird.

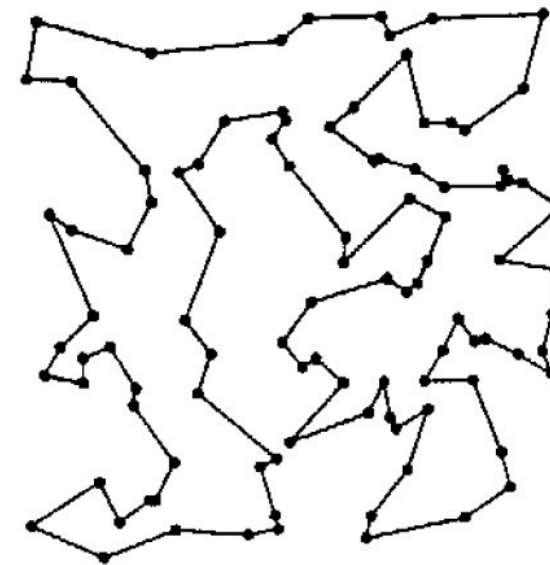
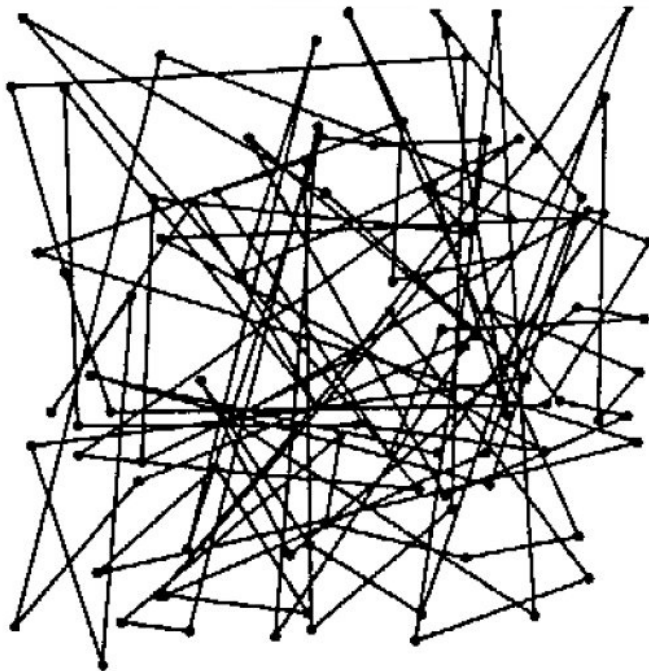
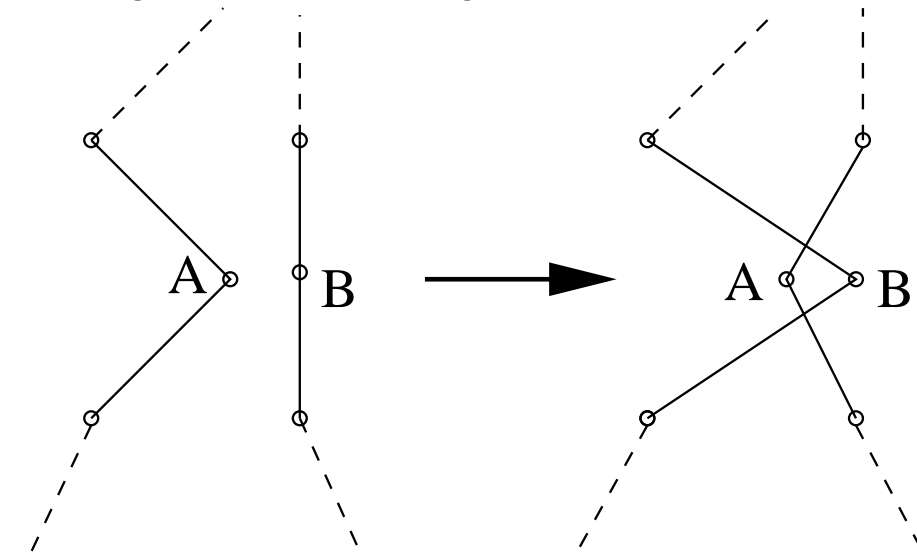
Führe elementare **Konfigurationsänderungen** an der Route durch, z.B. eine Vertauschung zweier Städte; behandle sie à la Metropolis. (Auch hier kommen nur **wenige, lokale** Variable ins Spiel.)

**Senke die Temperatur** laaangsam ab.

Das nennt man „simulated annealing“.

(To anneal = anlassen, tempern, ausglühen; leichtes Erwärmen eines Werkstücks aus z.B. Stahl, um innere Spannungen aus vorheriger Behandlung zu entfernen oder das Gefüge zu optimieren(!).)

Konfigurationsänderung im TSP:

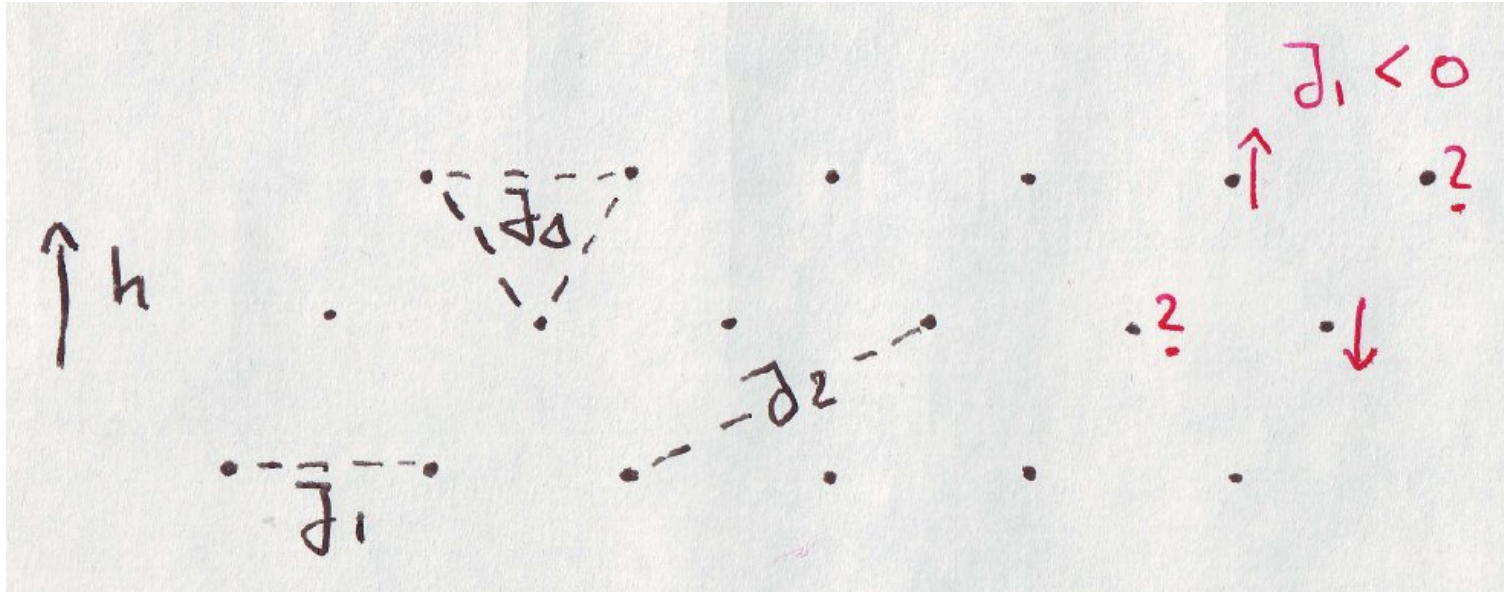


Zufällige Anfangskonfiguration und gefundene günstige Konfiguration im TSP (Programm aus Kinzel-Reents).

# Grundzustände in Systemen mit konkurrierenden Wechselwirkungen

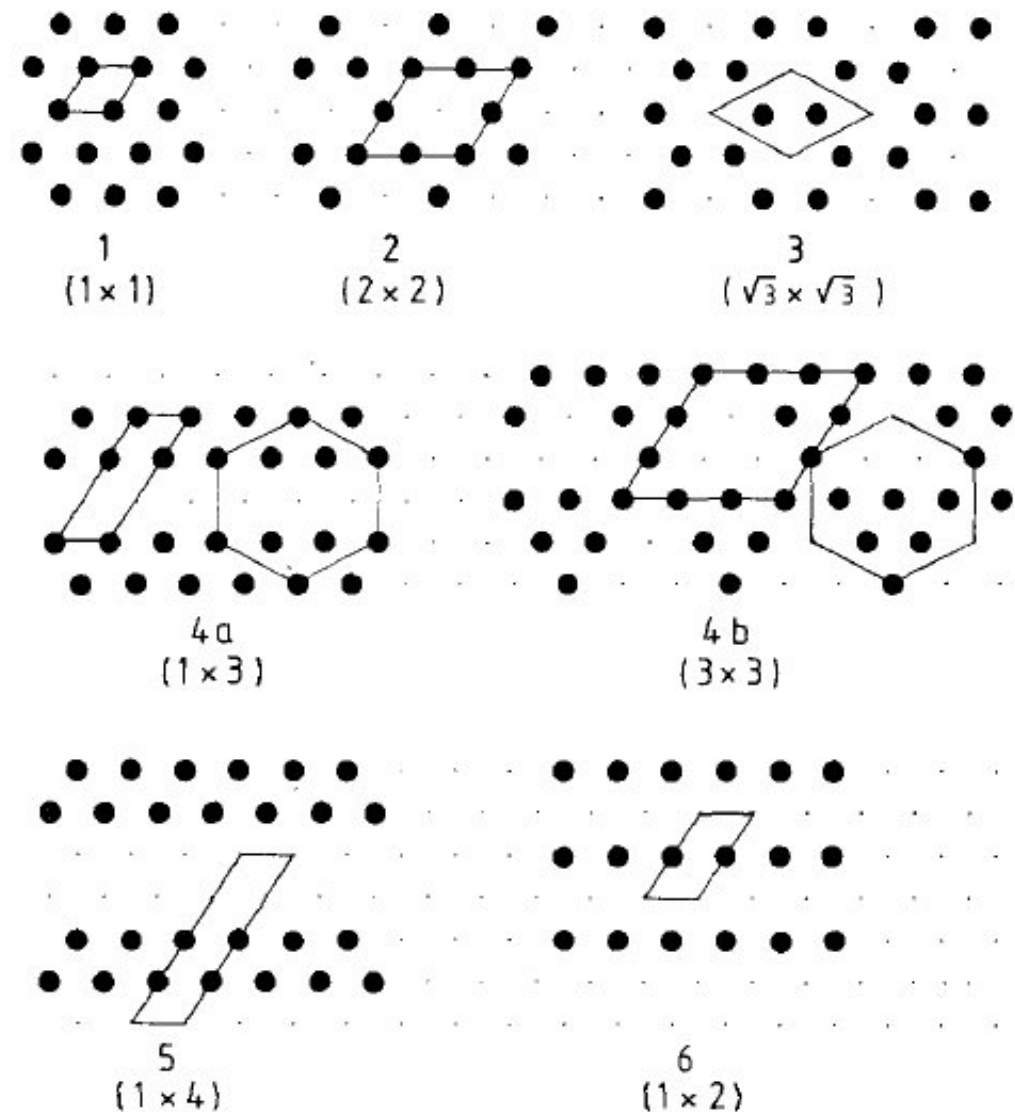
Beispiel: Ising-Modell (=Gittergas) auf einem Dreiecksgitter

Physikalische Realisierung: Auf einer Graphitoberfläche adsorbierte Atome, z.B. Edelgase, zeigen Ordnungsphänomene.

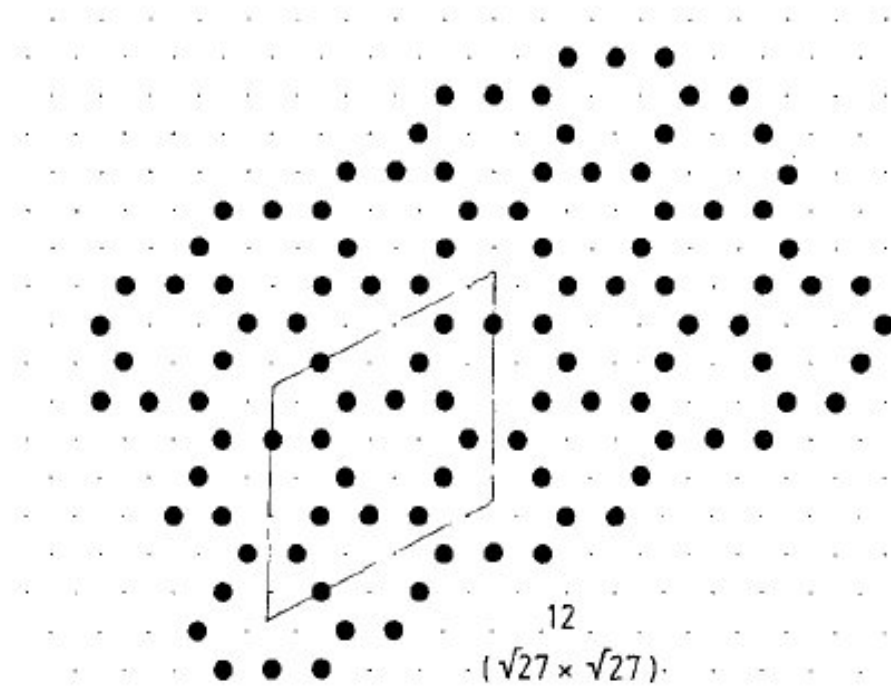
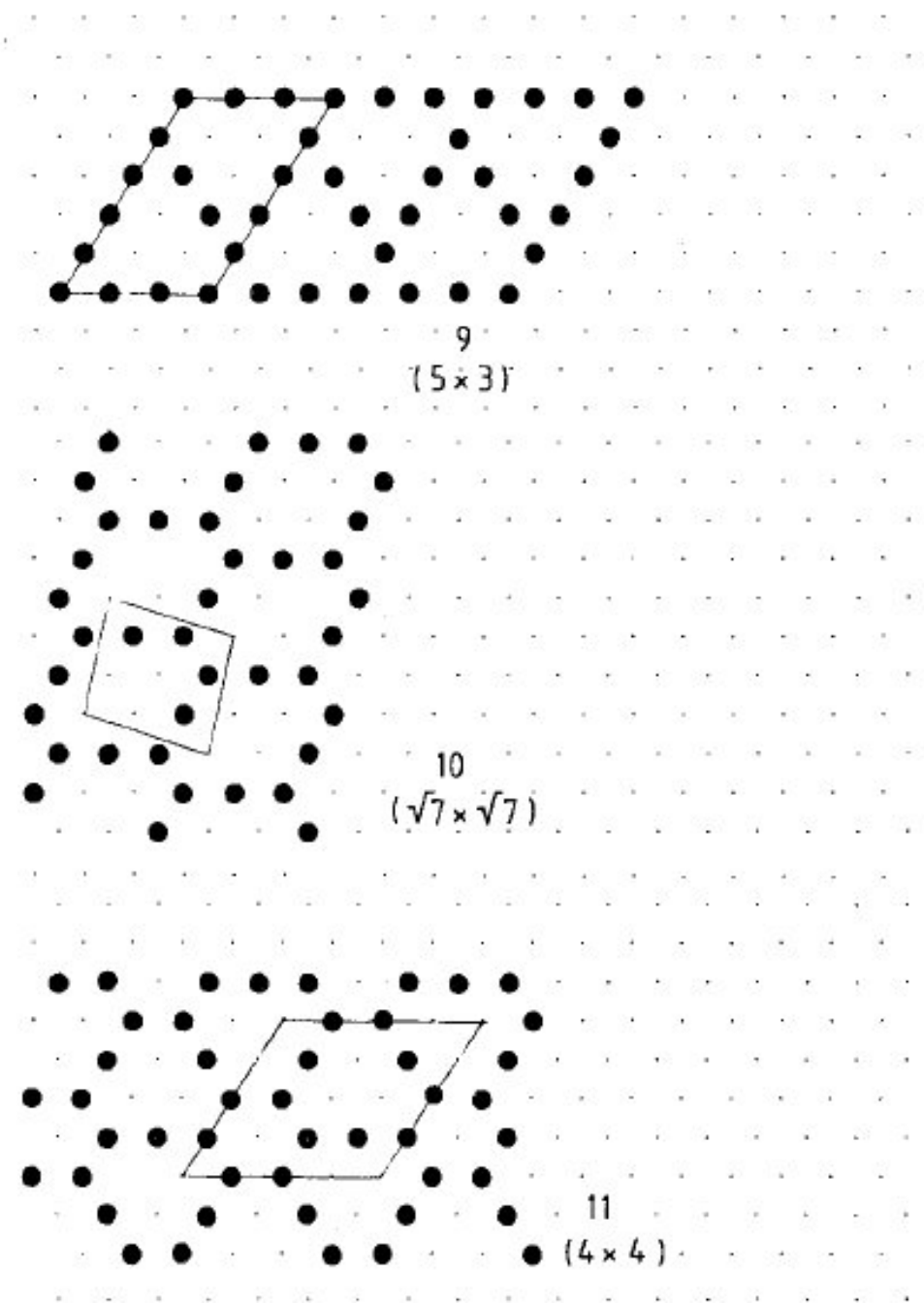


Je nach Werten des äußeren Feldes  $h$ , der WW zwischen NN,  $J_1$ , (nearest neighbors) und zwischen NNN,  $J_2$ , (next nearest neighbors), sowie zwischen den drei Spins auf einem Elementardreieck,  $J_\Delta$ , können sich unterschiedliche Zustände einstellen. Wenn  $J_1$  antiferromagnetisch ist, ist jedes Dreieck frustriert.

MC-Simulation mit langsamer  $T$ -Absenkung kann verwendet werden, um eine **Idee** von der Gestalt der möglichen Grundzustände zu bekommen. (Vorführung) Anschließend kann man versuchen zu **beweisen**, welche Zustände als Grundzustände zulässig sind; vgl. J.S. und U. Brandt, Z. Physik B - Cond. Matt. **64** 481 (1986). Das gelang damals nicht vollständig, trotz der Entdeckung einiger interessant aussehender Konfigurationen; die vollständige Lösung durch Yuri Dublenych erfolgte erst 2011 (PRE **84** 011106).



**Alle** Grundzustandskonfigurationen ohne  $J_{\Delta}$



Einige vermutete Grundzustandskonfigurationen mit  $J_{\Delta}$