



BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL  
FAKULTÄT FÜR  
*Mathematik und Naturwissenschaften*  
FACHGRUPPE PHYSIK

PROJEKT PRAKTIKUM

## Das 2D Ising-Modell

**Lea Debus (1422800)**  
**Melanie Joan Weitz (1549433)**

### Abstract

In diesem Projekt Praktikum wurde das Ising-Model in 2D mithilfe des Metropolis-Algorithmus' und der Bootstrap-Methodik in Python für verschiedene Gittergrößen umgesetzt. Das Gitter konnte visualisiert und für verschiedene Messungen animiert werden. Neben den Eigenschaften des Modells beim Phasenübergang 2. Ordnung konnte die Hysterese als Phasenübergang 1. Ordnung nachgewiesen und mithilfe der Breite der Hysteresekurve eine quantitative Größe ermittelt werden. Dadurch konnte eine Abhängigkeit von  $\beta$  und der Konfigurationszahl gezeigt werden.

Betreuer: Dr. Christian Höbling

Abgabedatum: 11. Februar 2021

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2. Theoretische Grundlagen</b>	<b>4</b>
2.1. Thermodynamische Systeme . . . . .	4
2.1.1. Zustandssumme und Boltzmann-Faktor . . . . .	4
2.1.2. Observablen und Erwartungswerte . . . . .	5
2.1.3. Innere Energie . . . . .	5
2.1.4. Magnetisierung . . . . .	5
2.2. Phasen, dessen Übergänge und kritische Phänomene . . . . .	6
2.2.1. Klassifizierung nach Ehrenfest . . . . .	6
2.3. Ferromagnetismus . . . . .	7
2.4. Hysterese . . . . .	7
2.5. Das Ising-Modell . . . . .	9
2.5.1. Definition des 2D-Ising-Modells . . . . .	9
2.5.2. Onsager und Yang Lösung . . . . .	9
2.5.3. Phasenübergänge . . . . .	10
<b>3. Markov-Chain-Monte-Carlo Algorithmus</b>	<b>11</b>
3.1. Metropolis Algorithmus . . . . .	12
3.2. Fehleranalyse durch Bootstrap-Verfahren . . . . .	14
3.3. Das Programm . . . . .	14
<b>4. Messung und Analyse</b>	<b>19</b>
4.1. Festlegung der Gittergröße . . . . .	19
4.2. Betrachtung der Observablen bei $H = 0$ . . . . .	23
4.2.1. Abschätzung der optimalen Konfigurationsgröße . . . . .	23
4.2.2. Vermessung und Analyse der Observablen . . . . .	25
4.3. Hysterese . . . . .	30
4.3.1. Abhängigkeit von $\beta$ . . . . .	31
4.3.2. Breite der Hysteresekurve . . . . .	32
4.3.3. Abhängigkeit von der Gittergröße . . . . .	33
4.3.4. Abhängigkeit von der Konfigurationszahl . . . . .	33
<b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>36</b>
<b>A. Literaturverzeichnis</b>	<b>38</b>
<b>B. Anhang</b>	<b>39</b>
B.1. Einfärbung der Hysterese-Kurve des (128x128)-Gitters bei $\beta = 0.43$ . . .	39
B.2. Hysteresekurven für verschiedene Runs und Gittergrößen . . . . .	40

## **Abbildungsverzeichnis**

1.	Schematik eines Phasendiagrammes . . . . .	6
2.	Schematik einer Hysteresekurve . . . . .	8
3.	Phasenübergänge im 2D Ising-Modell . . . . .	10
4.	Schematik des Metropolis Algorithmus . . . . .	12
5.	Aufteilung des Programms in Klassen. . . . .	15
6.	Vereinfachte Übersicht der Klassen Metropolis, Observables und Ising_Ani.	16
7.	Qualitativer Verlauf des Ising Modells für verschiedene $\beta$ . . . . .	17
8.	Qualitativer Verlauf der Hysterese im Ising Modell. . . . .	18
9.	Bestimmung der Gittergröße - U . . . . .	20
10.	Bestimmung der Gittergröße - U mit Gittergrößen größer (128x128) . .	21
11.	Bestimmung der Gittergröße -  M  . . . . .	22
12.	Bestimmung der Gittergröße -  M  mit Gittergrößen größer (128x128) . .	22
13.	Abschätzung der optimalen Konfigurationsgröße - U . . . . .	24
14.	Abschätzung der optimalen Konfigurationsgröße -  M  . . . . .	25
15.	(256x256) - U mit H=0 und $U_{\text{Onsager}}$ . . . . .	26
16.	(128x128) - U in Abhängigkeit der Anzahl der Konfigurationen . . . .	27
17.	(2x2) - Theoretischer und gemessener Erwartungswert der Energie in Abhängigkeit von $\beta$ . . . . .	28
18.	(256x256) -  M  mit H=0 und $ M_{\text{Yang}} $ . . . . .	29
19.	Hysterese für verschiedene $\beta$ . . . . .	31
20.	Hysterese - Vier Runs bei $\beta = 0.49$ für das (128x128)-Gitter . . . .	32
21.	Hysterese - Breiten für verschiedene Gittergrößen . . . . .	34
22.	Hysterese - Kurven der vier Konfigurationsgrößen bei $\beta = 0.49$ für das (128x128)-Gitter . . . . .	34
23.	Hysterese - Breiten mit $\sigma_{(128x128)}$ für verschiedene Konfigurationsgrößen	35
24.	Hysterese - Kurve für $\beta = 0.43$ beim (128x128)-Gitter . . . . .	39
25.	Hysterese - Vier Runs bei $\beta = 0.49$ für das (64x64)-Gitter . . . . .	40
26.	Hysterese - Drei Runs bei $\beta = 0.49$ für das (256x256)-Gitter . . . .	40
27.	Hysterese - Drei Runs bei $\beta = 0.49$ für das (512x512)-Gitter . . . .	41

## **Tabellenverzeichnis**

1.	Hysteresebreiten mehrerer Runs für verschiedene Gittergrößen . . . . .	33
2.	Hysteresebreiten für vier Konfigurationsgrößen . . . . .	35

# 1. Einleitung

In diesem Projekt Praktikum wird das Ising-Modell in zwei Dimensionen mithilfe des Metropolis-Algorithmus' und der Bootstrap-Methodik in Python programmiert und versucht, das simulierte Gitter zu visualisieren und zu animieren. Anschließend wird das Gitter im Hinblick auf dessen Eigenschaften bei einem Phasenübergang 2. Ordnung, wie die Abhängigkeit von der Gittergröße und die Beobachtung zweier Observablen (innere Energie  $U$  und Magnetisierung  $M$ ) bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes  $H$ , geprüft. Abschließend wird das Modell auf sein Hysterese-Verhalten untersucht, welches einen Phasenübergang 1. Ordnung darstellt.

Angefangen wird mit theoretischen Grundlagen sowie Erläuterungen zum Markov-Chain-Monte-Carlo Algorithmus, um die Basis für das Verständnis der dann folgenden Messungen und Analysen zu liefern. Abschließend folgt die Zusammenfassung in Verbindung mit einem Ausblick, inwiefern die dargestellten Ergebnisse optimiert werden könnten.

## 2. Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel dient dazu die zugrunde liegende Theorie und dessen Intention aufzuführen und so das Verständnis des durchgeföhrten Versuches zu vereinfachen.

### 2.1. Thermodynamische Systeme

Ein mikroskopisches System besteht aus einer Vielzahl von Teilchen, welche unter gewissen Bedingungen miteinander wechselwirken und somit gewisse Eigenschaften besitzen. Das System befindet sich dabei in einem Zustand  $n$  mit der Zustandsenergie  $E_n$  und beschreibt so eine Konfiguration von Teilchen. Diese kann einerseits jedem Teilchen einen festen Ort, Impuls oder aber in einem System von Spins eine feste Anordnung der Ausrichtungen der Spins zuordnen.

In der Thermodynamik wird ein Zustand anhand von festen Zustandsgrößen, wie Druck, Volumen, Temperatur und der Anzahl an Teilchen, charakterisiert. Ist das System an einem Wärmereservoir gekoppelt, so wird es nach einer bestimmten Zeit in ein *thermodynamisches Gleichgewicht* kommen, d.h. dass sich der Zustand  $n$  und damit auch die Zustandsenergie  $E_n$  nicht mehr ändert. Tauscht das System mit seiner Umgebung ausschließlich Energie aus, so bezeichnet man es als *kanonisches Ensemble*.

#### 2.1.1. Zustandssumme und Boltzmann-Faktor

Mithilfe der Zustandssumme  $Z$  lassen sich die thermodynamischen Größen des Systems, den sogenannten *Observablen*, herleiten. Für ein kanonisches Ensemble ist die Gestalt der Zustandssumme in Gleichung (2.1) (Nolting, 2014) mit der Hilfsvariablen  $\beta = 1/(k_B T)$  angegeben, wobei  $T$  die Temperatur und  $k_B$  die Boltzmann-Konstante ist.

$$(2.1) \quad Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}} = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

Für ein solches System kann die Besetzungswahrscheinlichkeit  $P_n$  eines Zustandes  $n$  durch den Boltzmann-Faktor  $e^{-\beta E_n}$  (Nolting, 2014) berechnet werden. Angegeben ist

dieser Zusammenhang in Gleichung (2.2).

$$(2.2) \quad P_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$$

### 2.1.2. Observablen und Erwartungswerte

Wie zuvor schon erwähnt, lassen sich mithilfe der Zustandssumme die Erwartungswerte der Observablen  $O$  eines Systems herleiten. Der Begriff des Erwartungswertes beschreibt den Wert einer beobachteten Größe, welche sich nach mehrmaliger Wiederholung eines Experimentes im Mittel ergibt. Bezieht man dies auf unser System mit  $n$  Zuständen und deren Wahrscheinlichkeit  $P_n(t)$ , so erhält man den Erwartungswert der Observablen mithilfe der Gleichung (2.3) (Meier, 2009).

$$(2.3) \quad \langle O \rangle = \sum_n O_n P_n(t) \stackrel{(2.2)}{=} \frac{1}{Z} \sum_n O_n e^{-\beta E_n}$$

### 2.1.3. Innere Energie

Die innere Energie  $U$  ist in der Thermodynamik definiert als die mittlere Energie  $\langle E \rangle$  eines Systems. Nach Gleichung (2.3) folgt demnach Gleichung (2.4).

$$(2.4) \quad U = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n}$$

Mithilfe der Zustandssumme gilt zudem der Zusammenhang aus Gleichung (2.5).

$$(2.5) \quad U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

### 2.1.4. Magnetisierung

Die charakteristische Größe eines magnetischen Zustandes eines Materials ist dessen Magnetisierung  $\vec{M}$ , welche über der Änderung des chemischen Potentials  $\vec{\mu}$  in Abhängigkeit des Volumens  $V$  definiert ist:

$$\vec{M} = \frac{d\vec{\mu}}{dV}$$

Die Magnetisierung ist in diesem Versuch jedoch auf eine Raumrichtung begrenzt, weswegen für das Magnetfeld  $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z$  gilt. Im Zustand  $n$  ergibt sich die Magnetisierung mithilfe von

$$M_n = -\frac{\partial E_n}{\partial B_z}.$$

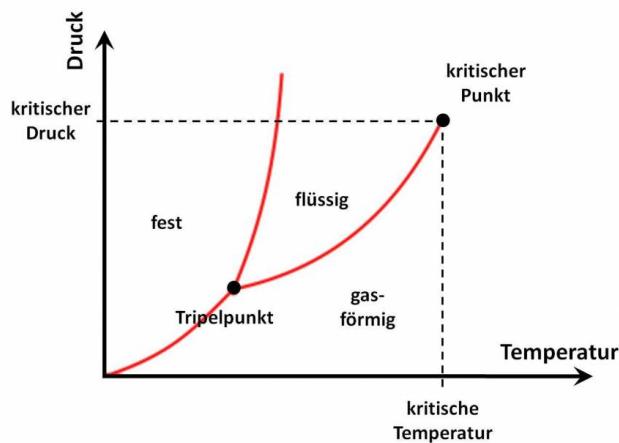
Die mittlere Magnetisierung lässt sich mit Gleichung (2.6) bestimmen.

$$(2.6) \quad \langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n M_n e^{-\beta E_n}$$

## 2.2. Phasen, dessen Übergänge und kritische Phänomene

Ein Material kann in verschiedenen Phasen auftreten, genauer: in einer möglichen Zustandsform, welches sich im thermischen Gleichgewicht befindet (Bovenkamp, 2011). Ein Wechsel von einer Phase in eine andere wird *Phasenübergang* genannt.

Im Klassischen denkt man dabei an die feste, flüssige und gasförmige Phase, den sogenannten Aggregatzuständen. Wenn man sich als Beispiel Wasser ( $H_2O$ ) anschaut, dann entsprächen diese Eis, Wasser und Wasserdampf. Wenn man bei diesem Prozess den Druck  $p$  in Abhängigkeit der Temperatur  $T$  misst und gegeneinander aufträgt, erhält man ein Phasendiagramm (vgl. Abbildung 1).



**Abbildung 1:** Dargestellt ist ein schematisches Phasendiagramm (Universität Hannover, 2013), welches den Druck  $p$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  aufgetragen hat. Dabei sind zusätzlich klassische Größen wie Tripelpunkt sowie der kritische Punkt, die kritische Temperatur und der kritische Druck eingezeichnet.

Zwischen den einzelnen Phasen erkennt man sogenannte Phasengrenzflächen, die die Grenze zwischen ihnen definieren. Zudem ist der Tripelpunkt eingezeichnet, an dem alle drei Phasen miteinander im Gleichgewicht stehen. An diesem Punkt können die drei Phasen nicht mehr voneinander unterschieden werden. In Abhängigkeit von der *kritischen Dichte*  $p_c$  und der *kritischen Temperatur*  $T_c$  ist der *kritische Punkt* eingezeichnet. Treibt man die Temperatur höher als  $T_c$  so verschwinden die Phasengrenzflächen der flüssigen und gasförmigen Phase und die beiden Phasen sind nicht mehr unterscheidbar.

### 2.2.1. Klassifizierung nach Ehrenfest

Nach der Klassifikation von Paul Ehrenfest können Phasenübergänge aufgrund ihres Verhaltens am kritischen Punkt hinsichtlich der Stetigkeit der Ableitungen der freien Enthalpie

$$G = U - TS + pV$$

unterschieden werden (Spektrum). Dabei entspricht  $S$  der Entropie und  $V$  dem Volumen.

Phasenübergänge wären theoretisch bis n-ter Ordnung möglich, beobachtet wurden jedoch nur erste und zweite Ordnung. Da diese beiden im weiteren Verlauf von Bedeutung sein werden, beschränken wir uns auf diese.

### Phasenübergang 1. Ordnung

Bei Phasenübergängen erster Ordnung spielen *latente Wärmen* eine große Rolle, da diese dem System zugeführt werden um eine Phasenänderung zu schaffen. Ein Beispiel wäre der Übergang von Wasser zu Wasserdampf, bei dem die Wärme im *Zwei-Phasen-Gebiet* nicht wie normal zum Anstieg der Temperatur des Wassers sondern den Phasenübergang bewirkt. Da dies isotherm verläuft, wird von der latenten Wärme gesprochen. Eine Folge ist, dass die ersten Ableitungen der Gibb'schen freien Enthalpie unstetig sind, was den Phasenübergang erster Ordnung klassifiziert.

Ein weiteres Beispiel wäre die *Hysterese* auf die im Abschnitt 2.4 näher eingegangen wird.

### Phasenübergang 2. Ordnung

Ein Phasenübergang zweiter Ordnung zeichnet sich durch die Stetigkeit der ersten und der Unstetigkeit der zweiten Ableitung der Gibb'schen Enthalpie aus.

Ein Beispiel wäre der Phasenübergang des Ferro- in den Paramagnetismus bei der Curie-Temperatur  $T_{Curie}$ , welcher in Abschnitt 2.3 weiter erläutert wird.

## 2.3. Ferromagnetismus

Der Ferromagnetismus bezeichnet eine Anordnung von magnetischen Momenten in Festkörpern. Diese Eigenschaft von bestimmten Materialien wie Eisen ist sehr interessant, da man so eine permanente Magnetisierung des Materials ohne äußeres Magnetfeld herbeiführen kann. Ist die Temperatur dessen unter der Curie-Temperatur  $T_{Curie}$ , so erhält man aufgrund der Austausch-Wechselwirkung eine permanente Magnetisierung: die atomaren magnetischen Momente zeigen innerhalb eines Weiss'schen Bezirks in eine Vorzugsrichtung (Duden Physik Schülerlexikon), wodurch jeder Bezirk ein eigenes magnetisches Moment besitzt. Wenn sich diese magnetischen Momente vektoriell nicht aufheben, so erscheint der Festkörper als Dauermagnet. Heben sie sich jedoch auf, so erscheint der Festkörper nicht magnetisch.

Da in diesem Falle ein Phasenübergang zweiter Ordnung bei  $T_{Curie}$  geschieht, gilt  $T_{Curie} = T_{critical} =: T_c$  und wird im weiteren Verlauf des Protokolls so verwendet.

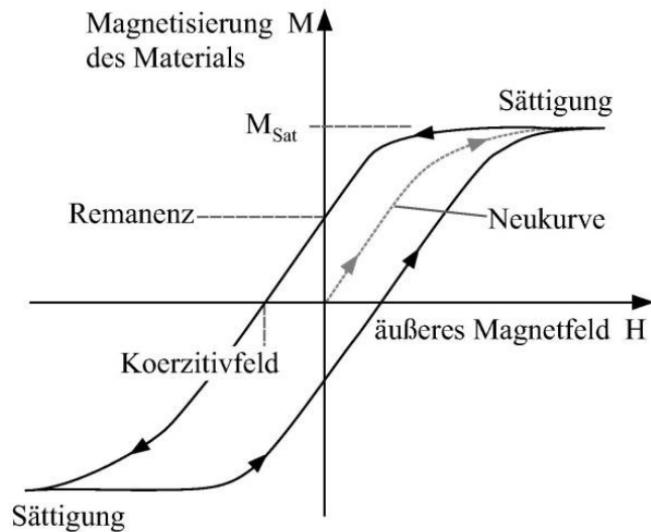
Wird ein äußeres Magnetfeld angelegt, so können sich einzelne Weiss'sche Bezirke auf Kosten anderer vergrößern und sich die Momente der Bezirke in Richtung des äußeren Magnetfeldes ausrichten, wodurch die Gesamtmagnetisierung steigt. Allerdings hängen die Magnetisierung des Materials  $M$  und die magnetische Feldstärke  $H$  nicht linear voneinander ab - es tritt Hysterese auf. Dieser Fall wird in Abschnitt 2.4 weiter erklärt.

## 2.4. Hysterese

Unter Hysterese im Zusammenhang mit Magnetismus versteht man die Unproportionalität zwischen der Magnetisierung  $M$  eines Materials und einem äußeren Magnetfeld

mit Feldstärke  $H$ : die Magnetisierung eines Materials steigt bei Einschalten und Variation des äußeren Magnetfeldes schnell an, klingt jedoch bei der Abschaltung nicht genauso schnell ab wie zuvor. Bei Ferromagneten bleibt nach Abschaltung des äußeren Magnetfeldes eine Restmagnetisierung zurück, die sogenannte Remanenz.

In Abbildung 2 kann man den schematischen Verlauf einer Hysteresekurve eines ferromagnetischen Materials sehen, bei der die Magnetisierung eines Materials in Abhängigkeit des äußeren Magnetfeldes aufgetragen ist.



**Abbildung 2:** Dargestellt ist ein Schema einer Hysteresekurve bei der die Magnetisierung  $M$  eines Materials in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfeldes mit Feldstärke  $H$  aufgetragen ist (Mertins, 2015). Erkennbar sind die charakteristischen Größen wie Sättigung und damit verbunden die gesättigte Magnetisierung des Materials  $M_{Sat}$ , die Remanenz, die Neukurve und das Koerzitivfeld.

Besitzt das Material vor dem Einschalten des äußeren Magnetfeldes keine Magnetisierung, so entsteht bei der Einschaltung und Erhöhung des äußeren Magnetfeldes die *Neukurve*. Dies ist ein schneller Anstieg der Magnetisierung des Materials bis zur *Sättigung*, bei der die maximale Magnetisierung  $M_{Sat}$  des Materials erreicht ist. Reduziert man nun  $H$ , so entsteht eine verzögerte Abnahme von  $M$  und bei vollständiger Abschaltung des äußeren Magnetfeldes bleibt eine Restmagnetisierung, die *Remanenz*, zurück. Wird ein dem Magnetfeld des Materials entgegengesetztes äußeres Magnetfeld hinzugeschaltet, so klingt die Magnetisierung am *Koerzitivfeld* auf Null ab, sodass das äußere Magnetfeld das materialeigene kompensiert. Danach steigt  $M$  nun aber mit entgegengesetzter Polung bis  $-M_{Sat}$ . Reduziert man das äußere Magnetfeld nun wieder, so ist auch hier eine Verzögerung zu beobachten wie zuvor. Wird das äußere Magnetfeld wieder erhöht, geht die Kurve wiederum so weit bis wieder der Punkt  $M_{Sat}$  erreicht ist und die Kurve schließt sich. Dies stellt einen Phasenübergang erster Ordnung dar.

## 2.5. Das Ising-Modell

Der Ferromagnetismus eines Materials ist aufgrund seiner Eigenschaften von großem Interesse. Aufgrund dessen wurde im Jahre 1925 von Ernst Ising die analytische Lösung eines eindimensionalen Modells publiziert, welches den Ferromagnetismus mathematisch und mikroskopisch beschreibt. 1944 folgte die analytische Lösung des Ising-Modells in zwei Dimensionen ohne äußeres Magnetfeld durch Lars Onsager (Büch, 2005), welches 1952 durch Chen Ning Yang mit der Berechnung der spontanen Magnetisierung erweitert wurde (Huang, 1987).

In diesem Praktikum wird sich auf das Ising-Modell in zwei Dimensionen konzentriert, weswegen im Folgenden nur auf die analytische Lösung von Onsager und Yang eingegangen wird.

### 2.5.1. Definition des 2D-Ising-Modells

Das Ising-Modell ist ein quadratisches Gittermodell mit  $N$  Gitterpunkten, welches periodische Randbedingungen sowohl in der vertikalen als auch horizontalen Richtung besitzt. So reduziert sich die Topologie des Modells auf die Oberfläche eines Torus'. Die Gitterpunkte können ihren Ort nicht verlassen, jedoch können sie die Spinwerte  $s_i \in \{-1, +1\}$  annehmen. Des Weiteren wird angenommen, dass die Kopplung isotrop ist, d.h. das die Kopplungskonstante  $J$  in allen Richtungen gleich ist. Die Wechselwirkung eines Gitterpunktes geschieht nur mit den nächsten Nachbarn und es ergibt sich die folgende Energie  $E$  aus Gleichung (2.7), wobei  $H$  den Zusatz eines äußeren Magnetfeldes beschreibt (Huang, 1987):

$$(2.7) \quad E = -J \sum_{i,j}^N s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i$$

Dabei wird über die nächsten Nachbarn  $(i, j)$  summiert. Des Weiteren ergibt sich die Magnetisierung  $M$  zu:

$$(2.8) \quad M = \sum_i^N s_i$$

Durch den isotropen Fall existiert eine kritische Temperatur  $T_c$ , bei welcher mit  $H = 0$  ein Phasenübergang 2. Ordnung von der ferromagnetischen in die paramagnetischen Phase geschieht. Wir werden folgend mit der Hilfsvariablen  $\beta = 1/(k_B T)$  arbeiten, wobei  $k_B$  die Boltzmann-Konstante ist. Somit folgt für die kritische Temperatur  $T_c$  bzw. für das kritische Beta  $\beta_c$  der Zusammenhang aus Gleichung (2.9) (Pangallo et al., 2014).

$$(2.9) \quad T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \frac{J}{k_B} \quad \Leftrightarrow \quad \beta_c = \frac{\ln(1 + \sqrt{2})}{2} \frac{1}{J} \approx 0.4407 \frac{1}{J}$$

### 2.5.2. Onsager und Yang Lösung

Wie zuvor angesprochen existiert bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes  $H$  eine exakte Lösung des 2D Ising-Modells durch Lars Onsager und Chen Ning Yang.

Die sogenannte *Onsager Energie*  $U_{Onsager}$  wird als die Energie pro Gitterpunkt definiert und ist in Gleichung (2.10) einsehbar (Huang, 1987). Dabei wird die innere Energie im Folgenden mit dem Faktor  $\beta$  skaliert.

$$(2.10) \quad \beta U_{Onsager} = -\beta J \coth(2\beta J) \left( 1 + \frac{2}{\pi} \kappa' \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi \frac{1}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}} \right)$$

mit  $\kappa = \frac{2\sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)}$  und  $\kappa' = 2\tanh^2(2\beta J) - 1$

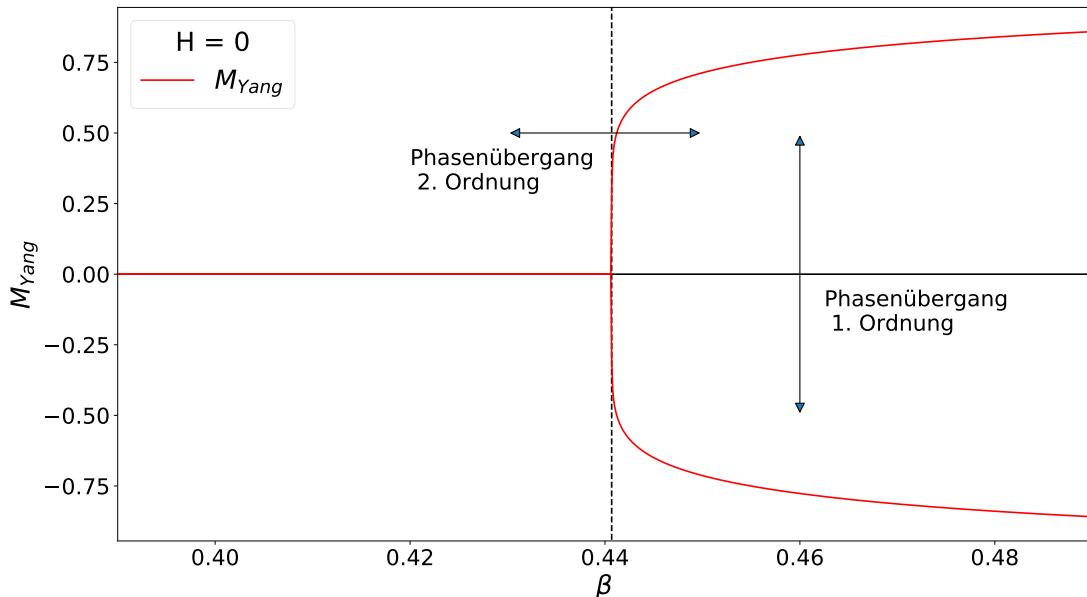
Die *spontane Magnetisierung*  $M_{Yang}$  wird in Gleichung (2.11) aufgeführt (Huang, 1987). Diese findet nur unter der Bedingung statt, dass  $T < T_c$  bzw.  $\beta > \beta_c$  ist. Ansonsten ist das Material nicht mehr ferromagnetisch und es kann keine spontane Magnetisierung stattfinden.

$$(2.11) \quad M_{Yang} = \begin{cases} (1 - \sinh^{-4}(2\beta J))^{\frac{1}{8}} & \text{falls } \beta > \beta_c \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

### 2.5.3. Phasenübergänge

Wie zuvor schon erwähnt, gibt es an  $\beta_c$  einen Phasenübergang zweiter Ordnung bei dem die Phase von einem Ferro- zu einem Paramagneten wechselt. Es gibt jedoch einen weiteren Phasenübergang, der mithilfe des 2D Ising-Modells erreicht werden kann: die Hysterese. Diese stellt einen Phasenübergang erster Ordnung dar.

In Abbildung 3 ist noch einmal verdeutlicht dargestellt, wie die beiden Phasenübergänge wirken.



**Abbildung 3:** Dargestellt ist die Yang-Magnetisierung  $M_{Yang}$  in Abhängigkeit des Parameters  $\beta$  bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes. Das kritische  $\beta_c$  ist mithilfe einer gestrichelten schwarzen Linie eingezeichnet. Mit den Pfeilen sind zusätzlich die charakteristischen Übergänge verdeutlicht.

### 3. Markov-Chain-Monte-Carlo Algorithmus

In Abschnitt 2.5 wurde das zu untersuchende Ising-Modell vorgestellt. Um dieses numerisch zu untersuchen, wird eine Monte-Carlo Simulation genutzt. Im Folgenden soll diese Methode vorgestellt werden. Dabei wird sich an der Struktur und den Formulierungen von Hölbling (1995) orientiert.

Wie bereits in Abschnitt 2.5 erläutert, sind wir an den Observablen des Systems interessiert. Dazu wird eine gewichtete Summe über alle Konfigurationen  $C$  benötigt (siehe Gleichung (2.3)):

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_C O_C e^{-\beta E_C}$$

Dabei ist  $e^{-\beta E_C}$  der Boltzmann-Faktor und  $e^{-\beta E_C}/Z$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, das System in einer bestimmten Konfiguration  $C$  anzutreffen (siehe Gleichung (2.2)). Eine Summierung über alle existierende Konfigurationen wäre insbesondere bei größeren Gittern sehr rechenintensiv. Indem  $N$  zufällige Konfigurationen mit der Wahrscheinlichkeit aus Gleichung (2.2) simuliert werden, wird die Boltzmann-Gewichtung direkt berücksichtigt und der Erwartungswert der Observablen vereinfacht sich damit näherungsweise zu

$$(3.1) \quad \langle O \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N O_n \simeq \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N O_n,$$

wobei  $O_n$  die entsprechend gemessene Observable für die Konfiguration  $n$  ist. Je größer die Zahl der Konfigurationen gewählt wird, desto genauer wird der Erwartungswert für die Observable.

Um zufällige Konfigurationen gemäß der Wahrscheinlichkeit aus Gleichung (2.2) verteilt zu generieren, wird eine sogenannte Markov-Kette (auch Markov-Chain) verwendet. Dabei wird mit einer zufälligen Konfiguration  $C_0$  gestartet und folgende Konfigurationen aus der vorherigen generiert. Das bedeutet insbesondere, dass die zukünftige Konfiguration nur von der aktuellen Konfiguration abhängt:

$$C_0 \rightarrow C_1 \rightarrow C_2 \rightarrow \dots \rightarrow C_n \rightarrow \dots \rightarrow C_N,$$

wobei der Index  $n$  für das  $n$ -te Update und damit die  $n$ -te Konfiguration steht (nicht zu verwechseln mit der euklidischen Zeit). Der Übergang von einer Konfiguration zur nächsten wird auch Monte-Carlo Update oder Monte-Carlo Schritt genannt. Die Markov-Kette wird dabei so konstruiert, dass Konfigurationen mit geringerer Wahrscheinlichkeit seltener generiert werden, als solche mit höherer Wahrscheinlichkeit. Für die Wahrscheinlichkeit  $P$  von Konfiguration  $U$  zu einer anderen Konfiguration  $U'$  zu gelangen gilt

$$0 \leq P(U|U') \leq 1 \quad \wedge \quad \sum_{U'} P(U|U') = 1.$$

Außerdem muss jede mögliche Konfiguration in einer endlichen Anzahl von Updates erreichbar (*Ergodizität*) und die Updates sollten reversibel sein (*detailed balance*). Letzteres bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit von einer Konfiguration  $U$  nach  $U'$  zu gelangen genau der von  $U'$  nach  $U$  entsprechen muss. Es darf also keine Vorzugsrichtung zu erkennen sein (vorwärts und rückwärts sind nicht zu unterscheiden) (Gattringer, 2010). Zuletzt sollte die Zielverteilung Fixpunkt des Markov-Prozesses sein.

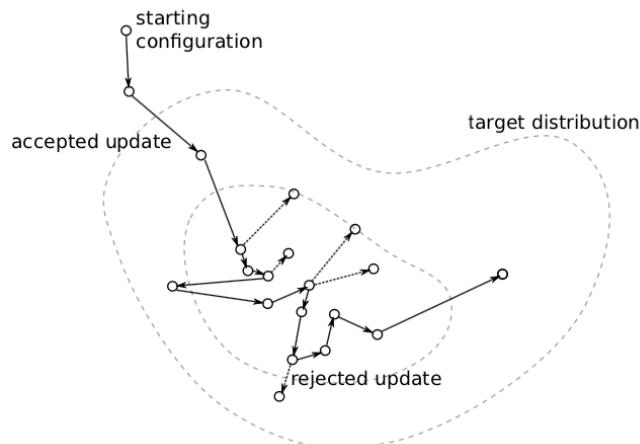
Ein besonders einfacher MCMC (Markov-Chain-Monte-Carlo) Algorithmus, welcher auf das detaillierte Gleichgewicht aufbaut, ist der sogenannte Metropolis Algorithmus.

### 3.1. Metropolis Algorithmus

Der Metropolis Algorithmus ist ein MCMC-Verfahren, welches Konfigurationen eines Systems gemäß der Boltzmann-Verteilung generiert. Dabei wird zunächst eine Anfangskonfiguration  $C_0$  festgelegt und danach folgende Schritte wiederholt:

1.  $\hat{C}_{i+1}$  wird ausgehend von  $C_i$  mit einer kleinen zufälligen Änderung erzeugt
2. Die Änderung in der Wirkung  $\Delta S_E = S_E(\hat{C}_{i+1}) - S_E(C_i)$  wird gemessen.
3. Wird die Wirkung kleiner oder bleibt gleich, also  $\Delta S_E \leq 0$  wird die Änderung der Konfiguration akzeptiert:  $C_{i+1} = \hat{C}_{i+1}$ . Wird die Wirkung größer wird sie mit der Wahrscheinlichkeit  $e^{-\Delta S_E(\hat{C}_{i+1})}$  akzeptiert und  $C_{i+1} = \hat{C}_{i+1}$ . Ansonsten gilt  $C_{i+1} = C_i$ .

Dieses Rezept erzeugt Konfigurationen, die gemäß Gleichung (2.2) verteilt sind, wenn die Ergodizität gilt und die Updates symmetrisch sind. Dies wird durch eine geeignete Wahl der zufälligen Änderung im ersten Schritt gewährleistet (Varnhorst, 2019). In Abbildung 4 ist der Ablauf einiger Metropolis Updates schematisch dargestellt.



**Abbildung 4:** Schematisch dargestellter Metropolis Algorithmus (Varnhorst, 2019).

Konfigurationen, welche die Wirkung erhöhen, werden zwar exponentiell unterdrückt, besitzen jedoch eine endliche Wahrscheinlichkeit. Das gewährleistet zum einen, die gewünschte Verteilung. Zum anderen kann dadurch, zusammen mit symmetrischen Updates, verhindert werden in einem vermeintlichen lokalen Minimum festzusitzen.

Da das Ising-Modell ein Spin-System beschreibt und jeder Gitterpunkt nur die Werte +1 oder -1 besitzt, vereinfachen sich die obigen drei Schritte wie folgt:

1. Ein Spin wird zufällig ausgewählt und umgedreht.
2. Die Änderung  $\Delta = \beta(E' - E)$  wird gemessen, wobei  $E'$  die Energie mit einem gedrehtem Spin beschreibt.
3. Wenn  $e^{-\Delta} \geq r$ , wobei  $r$  eine zufällige Zahl zwischen 0 und 1 ist, wird der gedrehte Spin akzeptiert, sonst wird die Drehung rückgängig gemacht.

Dabei entspricht der dritte Schritt dem vorherigen Schema, denn wenn  $\Delta \leq 0$  ist gilt  $e^{-\Delta} \geq 1$  und wird damit immer akzeptiert. Ansonsten wird die Änderung exponentiell unterdrückt. Da der Algorithmus eine lokale Änderung vornimmt und nur die Wechselwirkung zwischen den nächsten Nachbarn betrachtet wird, vereinfacht sich die Berechnung von  $\Delta$ .

Beim 2D Ising-Modell wird das System durch ein zweidimensionales Gitter beschrieben und besteht damit aus  $N_x \times N_y$  Gitterpunkten, wobei  $N_x$  und  $N_y$  jeweils die Länge in x- und y-Richtung angeben. Für einen Monte-Carlo Update muss das gesamte Gitter abgefragt und je nach  $\Delta$  geändert werden. Dazu kann entweder Gitterpunkt für Gitterpunkt nacheinander upgedatet oder zufällig  $N_x \times N_y$  mal durch das Gitter gegangen werden. In dieser Arbeit wurde sich für Letzteres entschieden. Wenn folgend von einem Monte-Carlo Schritt gesprochen wird, ist damit das einmalige Updaten des gesamten Gitters gemeint.

In der Regel wird nicht im thermischen Gleichgewicht gestartet und somit dauert es, abhängig von der gewählten Startkonfiguration, einige Monte-Carlo Schritte, bis das thermische Gleichgewicht erreicht ist und die folgenden Konfigurationen um diese streuen. Anhand der Messung der Energie kann beobachtet werden, ab wann sich ein thermisches Gleichgewicht einstellt. Auch eine schwarz-weiß Visualisierung des Gitters abhängig von den Monte-Carlo Updates ermöglicht eine Abschätzung, wie viele Monte-Carlo Schritte zu Beginn übersprungen werden müssen, um im thermischen Gleichgewicht anzukommen. Insbesondere für sehr kleine Temperaturen und somit große  $\beta$  kann es sehr lange dauern, bis das Gleichgewicht erreicht wird. Hier bietet es sich an, abhängig von der Temperatur einen *cold start* oder *hot start* zu wählen. Beim *cold start* sind alle Spins +1 oder -1 gewählt, sodass das Gitter die höchste Magnetisierung besitzt. Wie der Name erahnen lässt, befindet man sich hier schon in einer Gleichgewichtslage für kalte Temperaturen. Beim *hot start* werden alle Spins zufällig auf +1 oder -1 gesetzt, sodass im Mittel keine Magnetisierung des Gitters vorhanden ist. Dies entspricht dem thermischen Gleichgewicht für besonders hohe Temperaturen, also kleine Werte für  $\beta$ . Als Grenzwert

wurde das kritische  $\beta_c$  (vgl. Gleichung (2.9)).

Da bei einer Markov-Kette die nächste Konfiguration nur von der vorherigen Konfiguration abhängt, sind aufeinander folgende Konfigurationen stark korreliert. Insbesondere bei großen Gittern, dauert es sehr lange, bis eine vorherige Konfiguration *vergessen* wurde.

Um Autokorrelationseffekte zu vermeiden, werden einige Konfigurationen künstlich gelöscht, indem zwischen den gespeicherten Konfigurationen immer erst eine Anzahl an MC Updates vergessen wird.

Auch hier muss experimentiert und anhand der Observablen beobachtet werden, welche Größenordnung benötigt wird. In der Regel reicht es, einige Male das gesamte Gitter abzufragen (mehrere MC Updates).

### 3.2. Fehleranalyse durch Bootstrap-Verfahren

Da die Menge auf eine Stichprobe begrenzt ist und das Verfahren eine statistische Methode ist, müssen die Fehler der Observablen mit Hilfe von Resampling geschätzt werden. Dabei werden künstlich neue Stichproben aus der alten erzeugt. Eine Möglichkeit bietet das klassische Bootstrap-Verfahren. Hierbei wird jeweils wiederholend eine neue Stichprobe gebildet, indem aus der ursprünglichen Datenmenge (der Größe N) N zufällige Daten (mit Zurücklegen) ausgewählt werden. Nun wird für jede so generierte Stichprobe die zu messende Observable  $O$  ermittelt. Sei  $\langle O \rangle_i$  der Erwartungswert der Observablen der i-ten Stichprobe mit

$$(3.2) \quad \langle O \rangle_i = \frac{1}{N} \sum_{\{C\}_i} O_{\{C\}_i},$$

wobei  $\{C\}_i$  die Menge der Konfigurationen aus der i-ten Stichprobe darstellt. Aus der so erhaltenen Menge an Observablen  $\{\langle O \rangle_i\}$  mit  $i \in \{1, \dots, s\}$  kann die Varianz

$$(3.3) \quad \text{Var}(O) = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s (\langle O \rangle_i - \hat{O})^2$$

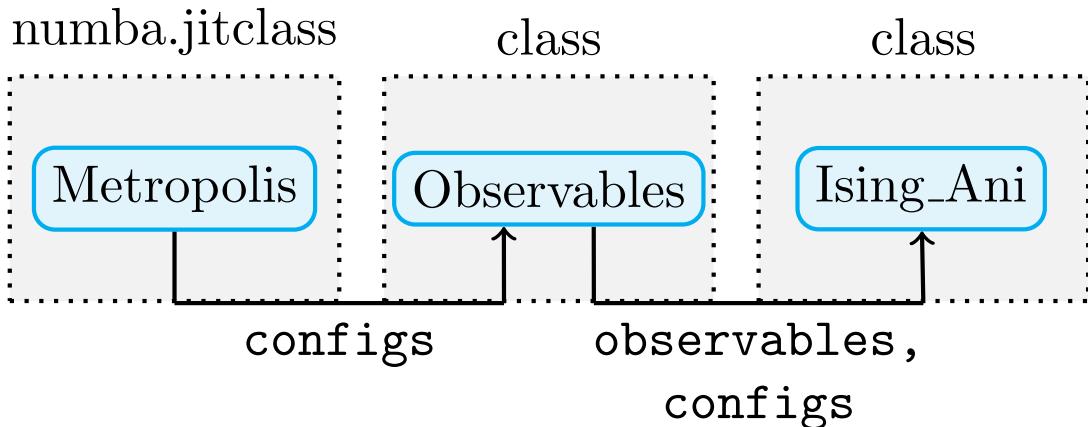
abgeschätzt werden, wobei  $\hat{O}$  der Mittelwert

$$(3.4) \quad \hat{O} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \langle O \rangle_i$$

aus den Erwartungswerten der Observablen O der Stichproben ist.

### 3.3. Das Programm

Das Programm (L. Debus, M. J. Weitz) besteht aus drei verschiedenen Klassen: der Metropolis, Observables und Ising\_Ani Klasse. Wie in Abbildung 5 dargestellt, generiert die Metropolis Klasse Konfigurationen (configs), welche der Observables Klasse übergeben werden. Diese wiederum misst die Observablen. Zuletzt können die Observablen



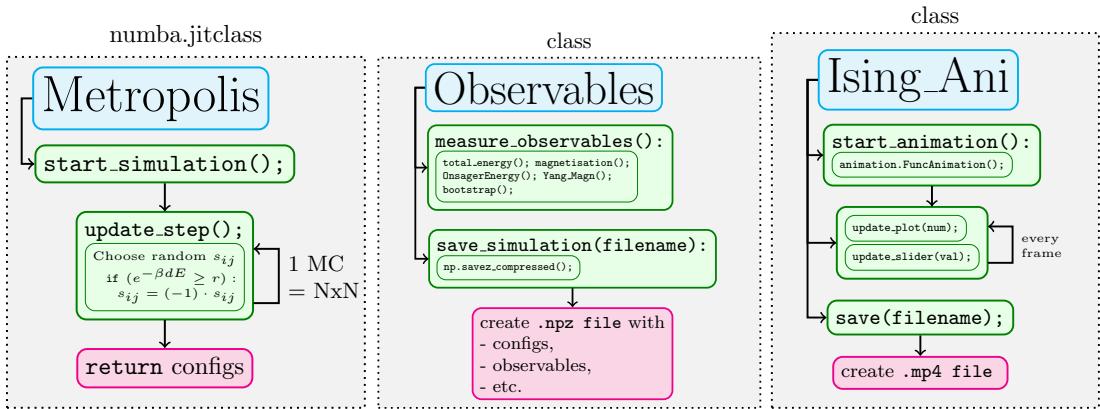
**Abbildung 5:** Aufteilung des Programms in Klassen.

und Konfigurationen der Ising\_Ani Klasse übergeben werden, welche zur Visualisierung und Animation der Daten dient.

Abbildung 6 liefert eine Übersicht zum Aufbau und der Funktionsweise der drei Klassen. Da die Simulation wie bereits erwähnt sehr rechenintensiv werden kann und mit großen Datenmengen gearbeitet wird, wurde an der Stelle in der Metropolis Klasse mit `numba.jitclass` gearbeitet. Numba ist ein open source JIT compiler, welcher explizit für Python Code ausgearbeitet wurde. Unter anderem lassen sich damit Funktionen und Klassen in Python kompilieren und so wird die Performance deutlich verbessert. An der Stelle wird auf die Implementierung und den Zeitgewinn nicht näher eingegangen.

Die Hauptmethode der Metropolis Klasse besteht darin, die Simulation des Ising Modells zu starten (`start_simulation()`). Dabei wird in jedem `update_step()` ein zufällig gewählter Spin gedreht und die in Abschnitt 3.1 beschriebene Abfrage des Metropolis Algorithmus durchgeführt. Wie bereits erläutert, ist mit einem Monte-Carlo Schritt (MCS) ein (NxN)-maliges Wiederholen dieser Update Routine gemeint. Damit die generierten Werte der gewünschten Zielverteilung entsprechen, werden die ersten Konfigurationen *vergessen*. Wie viele MCS zu Beginn übersprungen werden, wird in der Variablen `first_skip` festgelegt. Weiter werden, um Autokorrelationen zu vermeiden, immer erst einige Konfigurationen generiert, bis schließlich wieder eine behalten wird. Alle anderen werden *vergessen*. Wie viele MCS vergessen werden, wird mit der Variablen `skip` angegeben. Nach einer vorgegebenen Anzahl an MCS (`itersteps`) werden schließlich die generierten und nicht *vergessenen* Konfigurationen zurückgegeben.

Die Hauptmethode der Observables Klasse ist `measure_observables()` in der sowohl die theoretischen als auch Erwartungswerte der Observablen berechnet werden. Für die Varianzen der Erwartungswerte der Observablen wird eine `bootstrap()` Methode aufgerufen. Das Bootstrap-Verfahren wurde bereits in Abschnitt 3.2 vorgestellt. Anschließend kann die `save_simulation()` Methode aufgerufen werden, die alle Observablen (theoretische und gemessene mit den jeweiligen Standardabweichungen) sowie die Konfi-



**Abbildung 6:** Vereinfachte Übersicht der Klassen Metropolis, Observables und Ising\_Ani.

gurationen in einer `.npz` Datei speichert. Dabei wird eine Funktion der `numpy` Bibliothek verwendet. Diese ermöglicht das komprimierte Speichern von `numpy.arrays`, die jeweils mit einem `keyword` versehen werden. Das Zugreifen auf die arrays erfolgt dann ähnlich wie bei `dictionaries` in python.

In Quellcode 1 findet sich ein beispielhafter Codeausschnitt zur Demonstration der Nutzung der verschiedenen Klassen und Methoden.

#### Quellcode 1: Nutzung von Metropolis, Observables und Ising\_Ani

---

```

from Metropolis import Metropolis, Observables
from Ising_Visualizing import Ising_Ani

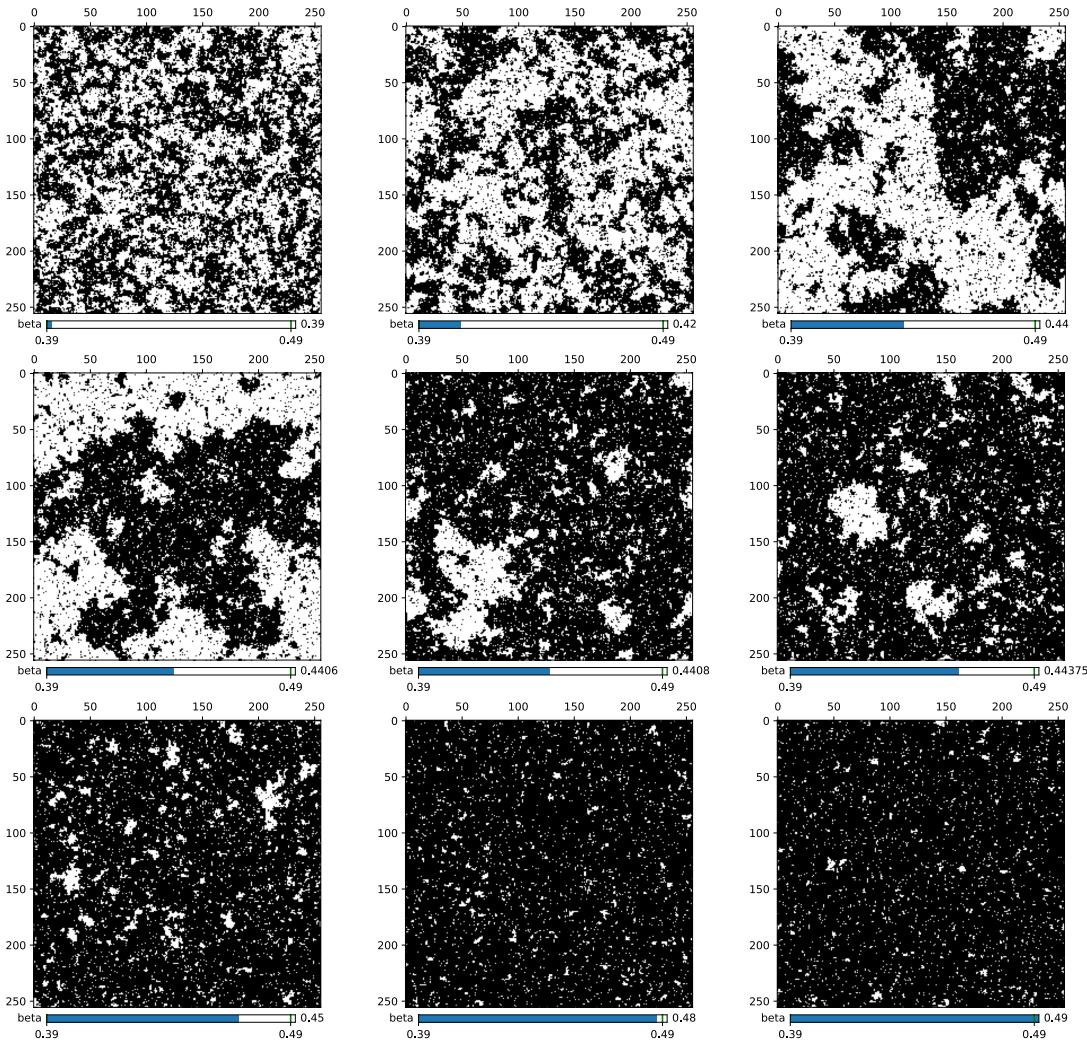
for beta in beta_arr:
    metro = Metropolis(*lat, beta)
    configs = metro.start_simulation()
    observables = Observables(configs, beta)
    observables.measure_observables()
    observables.save_simulation(filename)

ani = Ising_Ani(ising_data=config_arr,
                slider_data=beta_arr)
ani.start_animation()

```

---

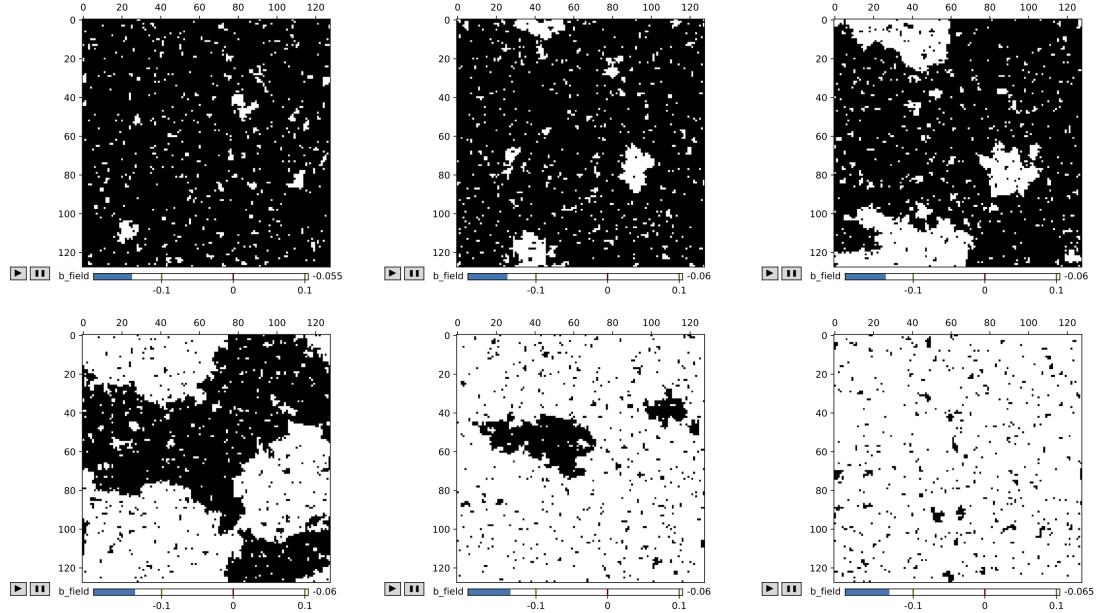
Die Hauptmethode `start_animation()` der Ising\_Ani Klasse ruft das Tool `FuncAnimation` der Bibliothek `matplotlib.animation` auf. Dieser wird im Grunde ein Objekt sowie eine update Funktion (hier `update_plot()` und `update_slider()`) übergeben. Für jede Frame wird schließlich das übergebene Objekt mit Hilfe der update Funktion aktualisiert. Das Tool liefert zudem eine `save()` Methode, sodass die Animation als `.mp4` Datei gesichert werden kann.



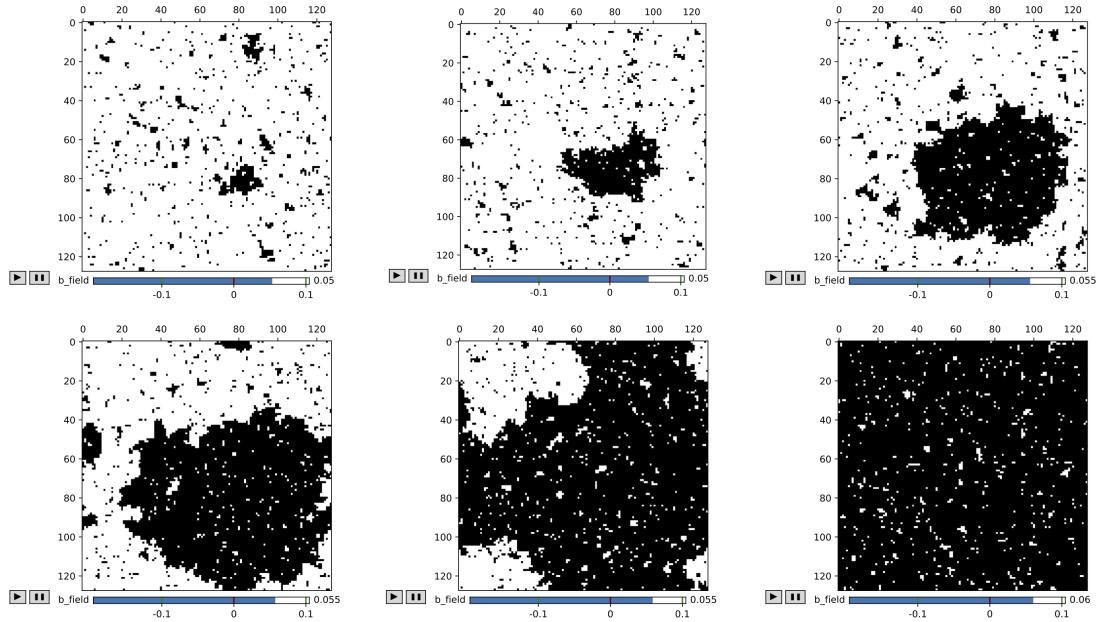
**Abbildung 7:** Qualitativer Verlauf des Ising Modells für verschiedene  $\beta$ .

Die Animation des Ising Modells erlaubt einen Einblick in die Dynamik des Systems. So findet sich in Abbildung 7 ein qualitativer Verlauf des Ising Models für verschiedene Werte von  $\beta$ .

Für sehr kleine Werte von  $\beta$  ( $\beta = 0.39$ ) also hohe Temperaturen ist eine zufällige Verteilung der Spins deutlich erkennbar. Mit abnehmender Temperatur (also wachsendem  $\beta$ ) zeichnen sich deutliche Bereiche aus, in denen alle Spins  $+1$  oder  $-1$  sind (Weiss'sche Bezirke). Unmittelbar nach dem kritischen Punkt ( $\beta = 0.4407$ ) richten sich die Spins in eine gemeinsame Richtung aus, dabei bleiben zu Beginn noch kleinere entgegengerichtete Bereiche übrig bis schließlich für sehr kalte Temperaturen ( $\beta=0.49$ ) nahezu alle Spins in dieselbe Richtung zeigen.



(a) Von positiver zu negativer Magnetisierung.



(b) Von negativer zu positiver Magnetisierung.

**Abbildung 8:** Qualitativer Verlauf der Hysterese im Ising Modell. Gestartet wurde bei einem externen Magnetfeld  $b_{field} = 0$  und bis  $b_{field} = 0.1$  wird in die Sättigung gelaufen. Von dort wurde das Magnetfeld schrittweise bis  $b_{field} = -0.1$  in die nächste Sättigung laufen gelassen und von dort wieder schrittweise zurück nach  $b_{field} = 0.1$  gegangen.

Auch das Hystereseverhalten kann durch eine entsprechende Animation wie in Abbil-

dung 8 veranschaulicht werden. Hier wird deutlich, dass sich die Spins deutlich verzögert nach dem externen Magnetfeld ausrichten. Weit hinter dem Nulldurchgang bei einem externen Magnetfeld von  $b_{field} = -0.06$  beginnt sich in Abbildung 8(a) das Gitter innerhalb weniger Frames (und damit MC Updates) umzupolen. Nachdem dort in die Sättigung gelaufen wurde und das Magnetfeld wieder schrittweise erhöht wird, zeigt sich in Abbildung 8(b) erneut der Hystereseffekt dadurch, dass das Feld erst bei  $b_{field} = 0.05$  beginnt sich umzudrehen.

## 4. Messung und Analyse

In diesem Abschnitt wird auf die Messung und auf dessen Analyse eingegangen. Es ist noch einmal zu betonen, dass in diesem Versuch das 2D Ising-Modell untersucht wird. Zudem wurde während aller Messungen eine Kopplungskonstante von  $J = 1$  gewählt, um nur eine Veränderliche in dem Produkt  $\beta \cdot J$  zu erhalten.

In diesem Versuch werden die innere Energie  $U$  und die Magnetisierung  $M$  als Observablen untersucht. Mithilfe Gleichung (2.7) wurde  $U$  und mit Gleichung (2.8)  $M$  je Konfiguration gemessen.

### 4.1. Festlegung der Gittergröße

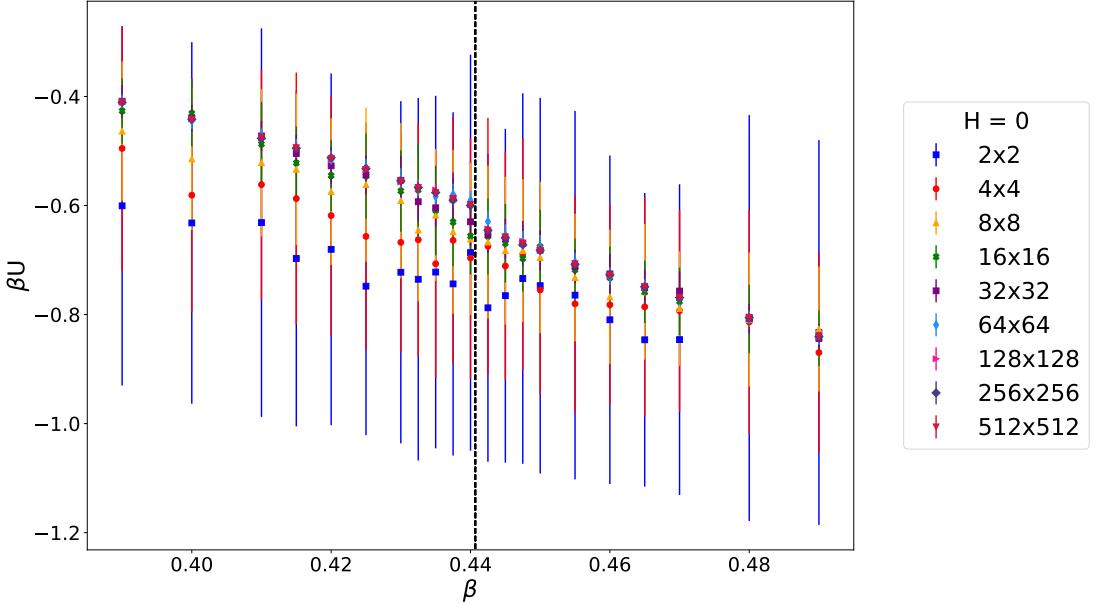
Die Gittergröße ist von entscheidender Bedeutung, da durch die Wahl eines zu kleinen Gitters (wie (2x2)) der Phasenübergang verschmiert ist und bei einem zu großen (wie (512x512)) die Simulationszeit sehr lang werden kann. Demnach ist es von großer Wichtigkeit eine geeignete Gittergröße zu wählen, sodass ein guter Kompromiss zwischen diesen beiden Extrema entsteht.

In diesem Abschnitt widmen wir uns der Wahl einer geeigneten Gittergröße um die Observablen zu untersuchen. Dafür wurden neun verschiedene Gitter mit Größen zwischen (2x2) und (512x512) der  $2^n$ -Reihe für die betrachteten Observablen in Abhängigkeit von verschiedenen  $\beta \in [0.39, 0.49]$  betrachtet. Dabei wurde das äußere Magnetfeld bei  $H = 0$  belassen.

Bei dieser Messung wurden 100 Konfigurationen abgespeichert, wo die erste Konfiguration nach 220 Monte-Carlo Schritten (MCS) durch das Gitter und alle weiteren nach 20 MCS abgespeichert wurden. Danach wurden die Observablen  $U$  und  $|M|$  anhand der 100 Konfigurationen bestimmt.

#### Innere Energie U

In Abbildung 9 ist die innere Energie  $U$  in Abhängigkeit verschiedener  $\beta$  für unterschiedliche Gittergrößen dargestellt. Dabei ist erkennbar, dass  $U$  mit steigendem  $\beta$ , d.h. fallender Temperatur, abfällt. Dies entspricht den Erwartungen, da sich das System in einen Gleichgewichtszustand entwickelt, in der die Spins mit fallender Temperatur in dieselbe Richtung ausgerichtet sind und laut Gleichung (2.7) wird der Betrag der Summe bei gleich ausgerichteten Spins größer.

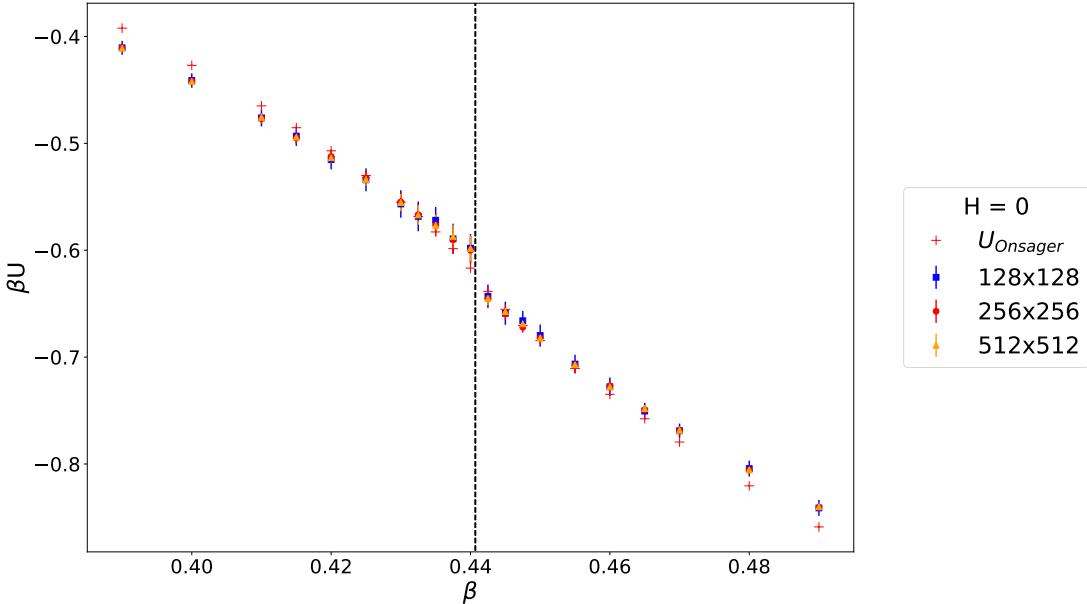


**Abbildung 9:** Dargestellt ist die innere Energie  $U$  in Abhängigkeit von  $\beta$  für verschiedene Gittergrößen. Dabei ist das äußere Magnetfeld  $H = 0$ . Zusätzlich wurde das kritische  $\beta_c$  mit einer gestrichelten schwarzen Linie eingezeichnet sowie 100 Konfigurationen pro Datenpunkt und Gitter abgespeichert.

Im Hinblick auf die Gittergröße ist ersichtlich, dass kleinere Gittergrößen wie (2x2), (4x4) oder (8x8) große Fluktuationen aufweisen als höhere Gittergrößen ab (16x16). Dies wird auch in den sehr großen Fehlerbalken deutlich, welche mithilfe des Bootstrap-Verfahrens bestimmt wurden.

Ebenfalls ist erkennbar, dass auch die Verläufe der kleineren Größen für  $\beta = 0.39$  bei niedrigerem  $U$  starten als größere, aber auf etwa derselben Höhe bei  $\beta = 0.49$  mit ihnen enden. Bei kalten Temperaturen und verschiedenen Gittergrößen ist  $U$  annähernd gleich, wobei sie bei wärmeren Temperaturen und Gittergrößen kleiner (16x16) sich signifikant unterscheiden. Diese Schwankungen resultieren daraus, dass sich bei kleineren Gittergrößen statistische Schwankungen stärker auswirken als bei höheren. Als Beispiel kann sich das (2x2)-Gitter vorgestellt werden, bei dem sich insgesamt vier Gitterpunkte befinden. Schwankt der Spin einer der Punkte, so fällt dies für die Summe stark ins Gewicht. Mit größeren Gittern fallen solche Schwankungen immer geringer aus.

In Abbildung 10 ist aus Gründen der Übersicht  $U$  in Abhängigkeit von  $\beta$  für Gittergrößen ab (128x128) dargestellt. Auffällig ist, dass an den Randwerten  $\beta = 0.39$  und  $\beta = 0.49$  kaum Unterschiede zwischen den jeweiligen Datenpunkten der einzelnen Gittergrößen auftreten, sich diese jedoch systematisch von den theoretischen Werten  $U_{Onsager}$  unterscheiden. Je näher man sich  $\beta_c$  nähert (d.h. sich im kritischen Bereich befindet), so erkennt man kleinere Unterschiede zwischen den Gittergrößen. Im Vergleich mit  $U_{Onsager}$  ist erkennbar, dass das (512x512)-Gitter näher an diesen Werten liegen, gefolgt von (256x256). Die größte Abweichung zeigt (128x128) im kritischen Bereich.

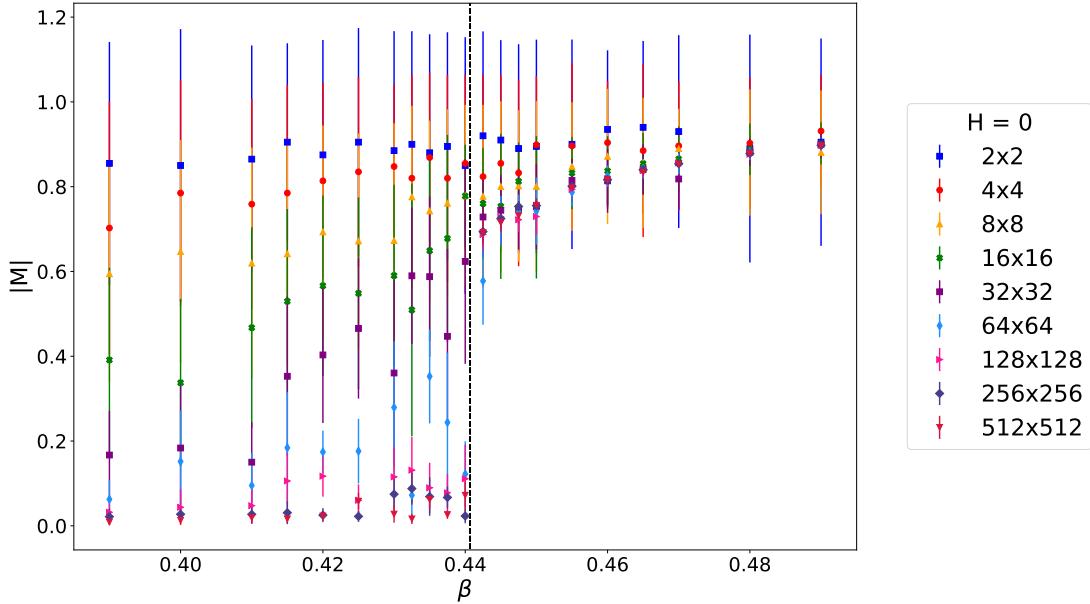


**Abbildung 10:** Dargestellt ist die innere Energie  $U$  in Abhängigkeit von  $\beta$  für Gittergrößen größer (128x128). Dabei ist das äußere Magnetfeld  $H = 0$ . Zusätzlich wurde das kritische  $\beta_c$  mit einer gestrichelten schwarzen Linie eingezeichnet sowie 100 Konfigurationen pro Datenpunkt und Gitter abgespeichert. Es wurde zudem noch die Onsager Energie  $U_{Onsager}$  reskaliert mit  $\beta$  mitgeplottet.

Zu bemerken ist auch, dass alle drei Größen keine größeren Fluktuationen nahe  $\beta_c$  aufweisen sowie einen ähnlichen Verlauf untereinander haben.

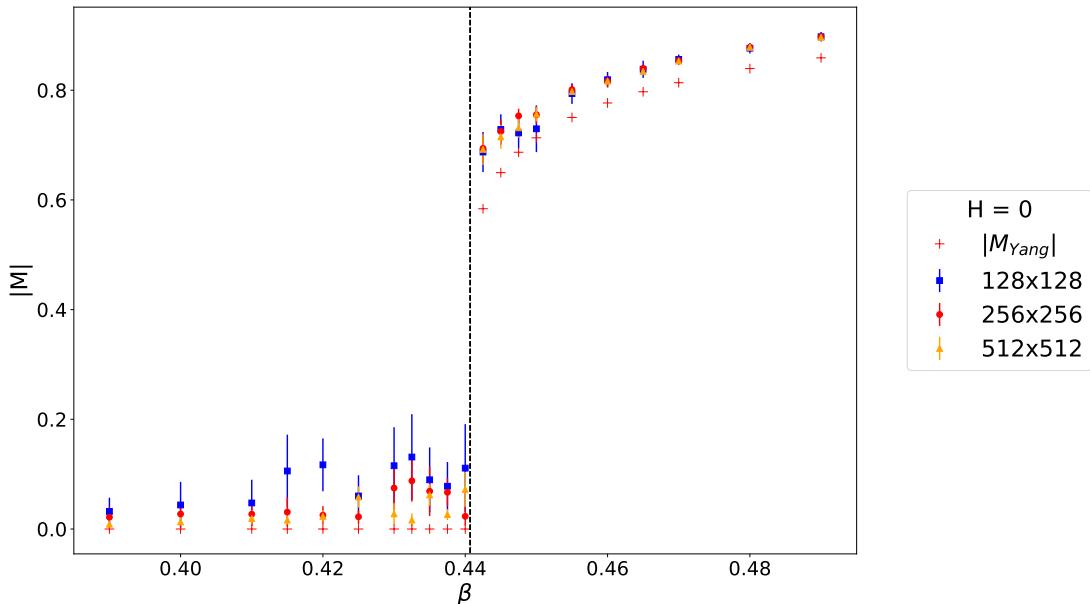
### Magnetisierung $M$

In Abbildung 11 ist der Betrag der Magnetisierung  $|M|$  in Abhängigkeit von  $\beta$  dargestellt. Der theoretische Verlauf laut Gleichung (2.11) besagt, dass die Magnetisierung bei  $\beta < \beta_c$  gleich Null sein soll. Bei keinem der hier betrachteten Gittergrößen ist dies erkennbar, jedoch ist eine Annäherung dieser Erwartung mit größerer Gittergröße zu bemerken. Dies lässt die Vermutung zu, dass bei Gittergrößen kleiner (64x64) eine deutliche Verschmierung des Phasenübergangs auftritt. Die Betrachtung von Gittergrößen kleiner als (128x128) ergibt demnach keinen wirklichen Sinn und bei der genaueren Betrachtung kann sich auf größere Größen fokussiert werden, bei denen der Phasenübergang deutlich erkennbar ist.



**Abbildung 11:** Dargestellt ist der Betrag der Magnetisierung  $|M|$  in Abhängigkeit von  $\beta$  für verschiedene Gittergrößen. Dabei ist das äußere Magnetfeld  $H = 0$ . Zusätzlich wurde das kritische  $\beta_c$  mit einer gestrichelten schwarzen Linie eingezeichnet sowie 100 Konfigurationen pro Datenpunkt und Gitter abgespeichert.

In Abbildung 12 sind Gittergrößen ab (128x128) dargestellt.



**Abbildung 12:** Dargestellt ist der Betrag der Magnetisierung  $|M|$  in Abhängigkeit von  $\beta$  für Gittergrößen ab (128x128). Dabei ist das äußere Magnetfeld  $H = 0$ . Zusätzlich wurde das kritische  $\beta_c$  mit einer gestrichelten schwarzen Linie eingezeichnet sowie 100 Konfigurationen pro Datenpunkt und Gitter abgespeichert.

Man erkennt, dass der Phasenübergang beim (128x128) Gitter verschmierter ist und im Vergleich die Gittergröße (256x256) deutlich besser abschneidet. Die Gittergröße (512x512) hat im direkten Vergleich den besten Verlauf, allerdings wird diese Größe aufgrund ihrer Rechenintensivität nicht in Erwägung gezogen.

Es ist allerdings zu bemerken, dass bei allen hier aufgeführten Gittergrößen der Phasenübergang deutlich sichtbar ist sowie der Verlauf der Datenpunkte dem von  $|M_{Y_{ang}}|$  entspricht.

Da im direkten Vergleich das (256x256)-Gitter deutlich besser abschneidet als (128x128), wird dieses zur Untersuchung der Observablen genutzt.

## 4.2. Betrachtung der Observablen bei $H = 0$

Für ein Gitter der Größe (256x256) werden in diesem Unterabschnitt die innere Energie  $U$  und der Betrag der mittleren Magnetisierung  $|M|$  ohne äußeres Magnetfeld näher untersucht.

Um das Verhalten der Observablen nahe dem Phasenübergang zu untersuchen, wurde die Anzahl der Datenpunkte vergrößert und der Abstand zwischen ihnen um das  $\beta_c$  herum verkleinert. Während der Messung betrug das äußere Magnetfeld  $H = 0$ .

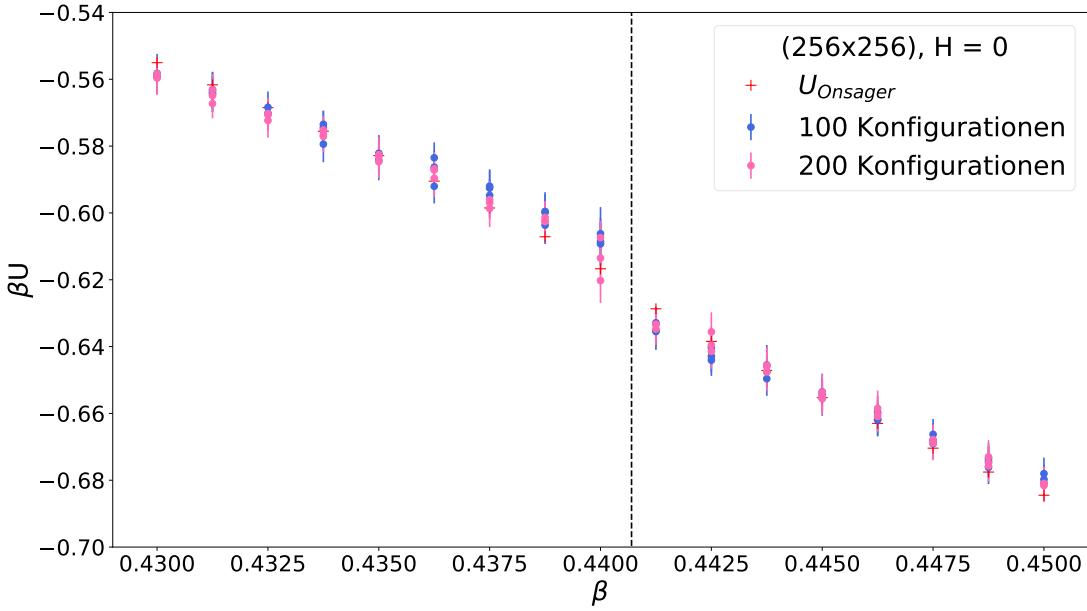
### 4.2.1. Abschätzung der optimalen Konfigurationsgröße

Bevor sich jedoch der Observablen gewidmet werden kann, wird eine Abschätzung der optimalen Konfigurationsgröße getroffen. Da in diesem Projekt Praktikum nur begrenzt Zeit zur Verfügung steht, wird überprüft, ob es einen bemerkbaren Unterschied zwischen der Anzahl der Konfigurationen und der Korrelationen der einzelnen Punkte gibt und ob gegebenenfalls eine kleine Konfigurationsgröße zur Messung ausreicht. Zudem wollte untersucht werden, ob sich die Fluktuationen um  $\beta_c$  mithilfe von größeren Konfigurationsgrößen beeinflussen lassen, vor allem im Hinblick auf  $|M|$ .

Gemessen wurde in einem Bereich von  $\beta \in [0.43, 0.45]$  in 0.00125-er Schritten. Dabei wurden einmal 100 Konfigurationen pro Datenpunkt mit einem ersten Abspeichern nach 220 MCS und jede weitere nach 20 MCS durch das Gitter und einmal 200 Konfigurationen pro Datenpunkt mit einem ersten Abspeichern nach 500 MCS und jede weitere nach 20 MCS durch das Gitter vermessen.

#### Innere Energie $U$

In Abbildung 13 ist die innere Energie  $U$  der beiden Messungen und die theoretischen Werte der Onsager Lösung  $U_{Onsager}$  in Abhängigkeit von  $\beta$  dargestellt. Jede Konfigurationsgröße weist drei Messungen auf.

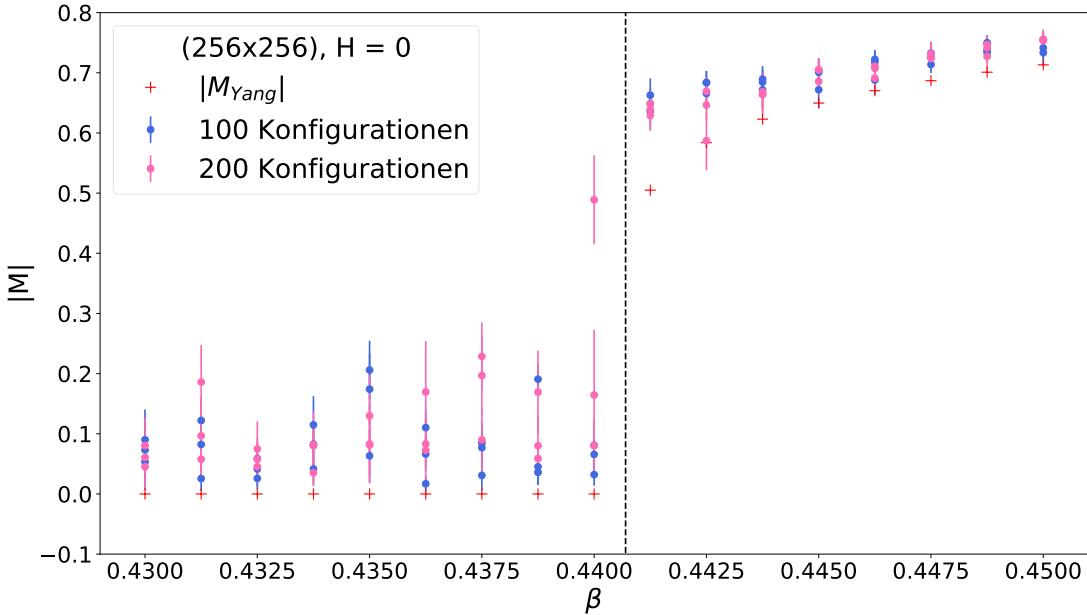


**Abbildung 13:** Dargestellt ist die innere Energie  $U$  in Abhängigkeit von  $\beta$  für zwei verschiedene Konfigurationsgrößen. Vermessen wurden einmal 100 Konfigurationen pro Gitterpunkt, welches die erste Konfiguration nach 220 und alle weiteren Konfigurationen nach 20 MCS durch das Gitter abgespeichert hat, und einmal 200 Konfigurationen, welche die erste Konfiguration nach 500 und alle weiteren Konfigurationen nach 20 MCS abgespeichert hat. Jede Konfigurationsgröße wurde drei mal vermessen. Das äußere Magnetfeld betrug  $H = 0$  und das kritische  $\beta_c$  wurde mithilfe einer gestrichelten Linie eingezeichnet. Zusätzlich ist in rot die Onsager Energie  $U_{Onsager}$  mitgeplottet.

Bemerkbar ist, dass beide Konfigurationsgrößen die Theoriewerte  $U_{Onsager}$  nicht treffend genug beschreiben und von der Theorie abweichen. Je näher man sich dem Phasenübergang nähert, erkennt man eine größer werdende Abweichung. Größere Fluktuationen sind jedoch bei 100 Konfigurationen pro Datenpunkt zu vermerken, vor allem im Bereich  $\beta \in [0.435, 0.445]$ . Nichtsdestotrotz kann man einen ähnlichen Verlauf zu den Theoriewerten feststellen.

### Magnetisierung $M$

In Abbildung 14 ist der Betrag der Magnetisierung  $|M|$  der Messungen beider Konfigurationsgrößen und der Betrag der theoretischen Werte der Yang Lösung  $|M_{Yang}|$  in Abhängigkeit von  $\beta$  dargestellt. Jede Konfigurationsgröße weist drei Messungen auf.



**Abbildung 14:** Dargestellt ist der Betrag der Magnetisierung  $|M|$  in Abhängigkeit von  $\beta$  für zwei verschiedene Konfigurationsgrößen. Vermessen wurden einmal 100 Konfigurationen pro Gitterpunkt, welches die erste Konfiguration nach 220 und alle weiteren Konfigurationen nach 20 MCS durch das Gitter abgespeichert hat, und einmal 200 Konfigurationen, welche die erste Konfiguration nach 500 und alle weiteren Konfigurationen nach 20 MCS abgespeichert hat. Jede Konfigurationsgröße wurde drei Mal vermessen. Das äußere Magnetfeld betrug  $H = 0$  und das kritische  $\beta_c$  wurde mithilfe einer gestrichelten Linie eingezeichnet. Des Weiteren wurde die Yang Magnetisierung  $|M_{Yang}|$  in rot mitgeplottet.

Betrachtet man den Bereich  $\beta < \beta_c$  so fallen starke Fluktuationen bei beiden Konfigurationsgrößen auf. Es gibt aber eine leichte Tendenz, dass die 200er Größe etwas höhere Fluktuationen aufweist als die 100er, jedoch zeigt im Vergleich der Bereich  $\beta > \beta_c$  eine leichte Tendenz bei den 100er Werten auf. Da bekannt ist, dass  $|M|$  mit dem hier genutzten Metropolis Algorithmus eine unsichere Observable im Bereich  $\beta < \beta_c$  ist, wird sich auf den Bereich  $\beta > \beta_c$  gestützt ebenso auf die sicherere Observable  $U$ . Festzuhalten ist also, dass man mit einer höheren Konfigurationszahl keinen wirklichen Einfluss auf die auftretenden Fluktuationen im Bereich  $\beta < \beta_c$  hat.

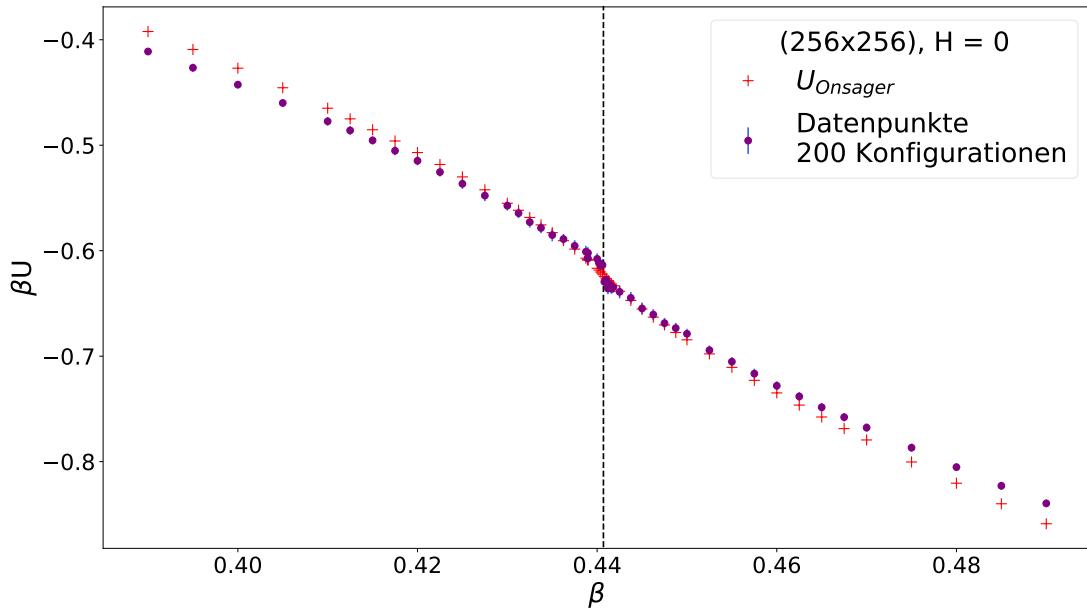
Da sowohl bei  $U$  als auch bei  $|M|$  im Bereich  $\beta > \beta_c$  die Konfigurationsgröße von 200 sicherer und mit weniger Fluktuationen als 100 erschienen ist, wird diese beim Vermessen der Observablen verwendet. Zudem hat man so eine doppelt so große Statistik.

#### 4.2.2. Vermessung und Analyse der Observablen

Nach der Feststellung, dass eine Konfigurationsgröße von 200 für die Vermessung der Observablen optimal sind, bei dem das erste Abspeichern nach 500 MCS und jede weitere nach 20 MCS erfolgt, kann mit dem Vermessen der Observablen für das (256x256)-Gitter angefangen werden. Während aller Messungen betrug  $H = 0$ ; gemessen wurde in einem Bereich von  $\beta \in [0.39, 0.49]$ .

## Innere Energie $U$

In Abbildung 15 wurde die mithilfe der Gleichung (2.5) berechnete innere Energie  $U$  in Abhängigkeit von  $\beta$  graphisch gegeneinander aufgetragen. Ebenso wurde die theoretische Onsager Energie  $U_{Onsager}$  in Abhängigkeit von  $\beta$  mitgeplottet.



**Abbildung 15:** Dargestellt ist die innere Energie  $U$  in Abhängigkeit von  $\beta$  bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes  $H$ . Zusätzlich wurde das kritische  $\beta_c$  mithilfe einer gestrichelten schwarzen Linie eingezeichnet, sowie die Onsager Energie  $U_{Onsager}$  in rot und mit  $\beta$  reskaliert. Es wurden 200 Konfigurationen pro Messpunkt abgespeichert.

Erkennbar ist, dass der Verlauf der inneren Energie  $U$  mit steigendem  $\beta$  kontinuierlich abfällt und das am Phasenübergang bei  $\beta_c$  ein deutlicher Knick erkennbar ist. Dies war jedoch auch zu erwarten, da im kritischen Bereich die Autokorrelationslänge (AKL), also der Länge welche die Konfigurationen voneinander haben müssten um nicht miteinander korreliert zu sein, immer größer wird. Im kritischen Bereich um  $\beta_c$  kann also diese Länge größer als der angesetzte MCS werden, da ein endlich großes Gitter von (256x256) verwendet wird.

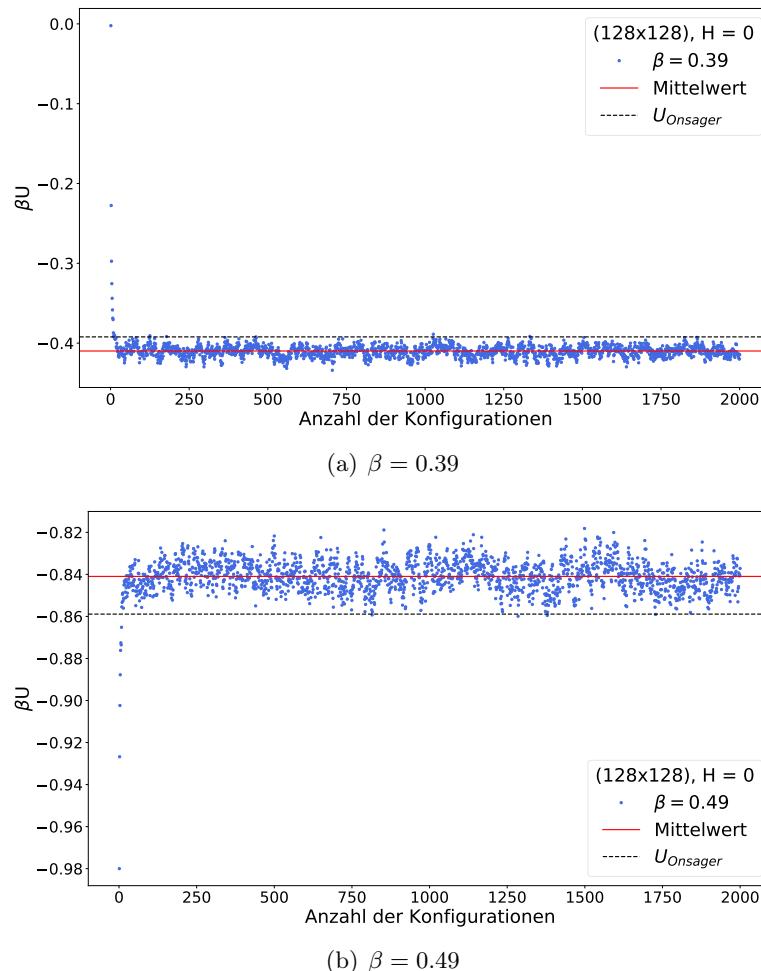
Es tritt ein weiteres Problem auf, das sogenannte *Critical Slowing Down*. Je näher man sich dem Phasenübergang nähert, desto träger reagiert das System. Dies hängt einerseits mit der AKL zusammen, da die Konfigurationen immer mehr korreliert sind und andererseits auch damit, dass das System sich mit überschreiten von  $\beta_c$  schlagartig verändert soll. Dies geschieht jedoch aufgrund des doch trägeren Metropolis' Algorithmus nicht schnell genug.

Erkennbar ist auch, dass beidseitig eine symmetrische Abweichung aufzutreten scheint, d.h. das der Verlauf von  $U$  um  $\beta_c$  gespiegelt scheint.

Betrachtet man die Ränder bei  $\beta = 0.39$  und  $\beta = 0.49$  so erkennt man eine systematische

Abweichung von  $U_{Onsager}$ . Dies ist recht ungewöhnlich, da man in den Randbereichen in den besten Anfangskonfigurationen des Equilibrium startet. So erwartet man z.B. für kleine  $\beta$ , dass sich das Equilibrium relativ schnell einpendelt, da man im Hot Start startet. Dasselbe gilt natürlich auch bei großen  $\beta$ , bei dem im Cold Start gestartet wird.

Um eventuelle Fehler im Code auszuschließen, wird  $U$  in Abhängigkeit der Konfigurationszahl für das (128x128)-Gitter<sup>1</sup> für  $\beta = 0.39$  und  $\beta = 0.49$  geplottet und überprüft, ob das System überhaupt in einen Gleichgewichtszustand kommt oder nicht. Das Ergebnis ist in Abbildung 16 einsehbar.



**Abbildung 16:** Dargestellt ist  $U$  in Abhängigkeit der Anzahl der Konfigurationen für das (128x128)-Gitter und zwei verschiedene  $\beta$ . Aufgenommen wurde die Messung mit  $H = 0$  und insgesamt 2000 Konfigurationen. In rot ist zudem der Mittelwert der Daten und in der gestrichelten schwarzen Linie  $U_{Onsager}$  eingezeichnet.

<sup>1</sup>Die kleinere Gittergröße wurde aufgrund der kurzfristigen Überprüfung gewählt.

Erkennbar ist einmal für  $\beta = 0.39$  der Hot-Start, d.h. bei der ersten Konfiguration beträgt  $U = 0$ , und für  $\beta = 0.49$  der Cold-Start, d.h. bei der ersten Konfiguration ist  $U = -1$ . Mit fortschreitender Anzahl der Konfigurationen (d.h. der MCS) erkennt man, dass sich das System in einen Gleichgewichtszustand einpendelt und dort um einen Mittelwert (vgl. rote Linie) schwankt - so erhält man den Wert von  $U$  für ein bestimmtes  $\beta$ . Vergleicht man den Mittelwert der Messung mit  $U_{Onsager}$  (vgl. schwarze Linie) des jeweiligen  $\beta$  so fällt auf, dass sich für  $\beta = 0.39$  auf ein Equilibrium systematisch unterhalb des Theoriewertes und für  $\beta = 0.49$  eines oberhalb einstellt. Da sich bei  $\beta = 0.49$  das höchste  $M$  einstellt, erwartet man dort den vom Betrag her größten Wert für  $U$ .

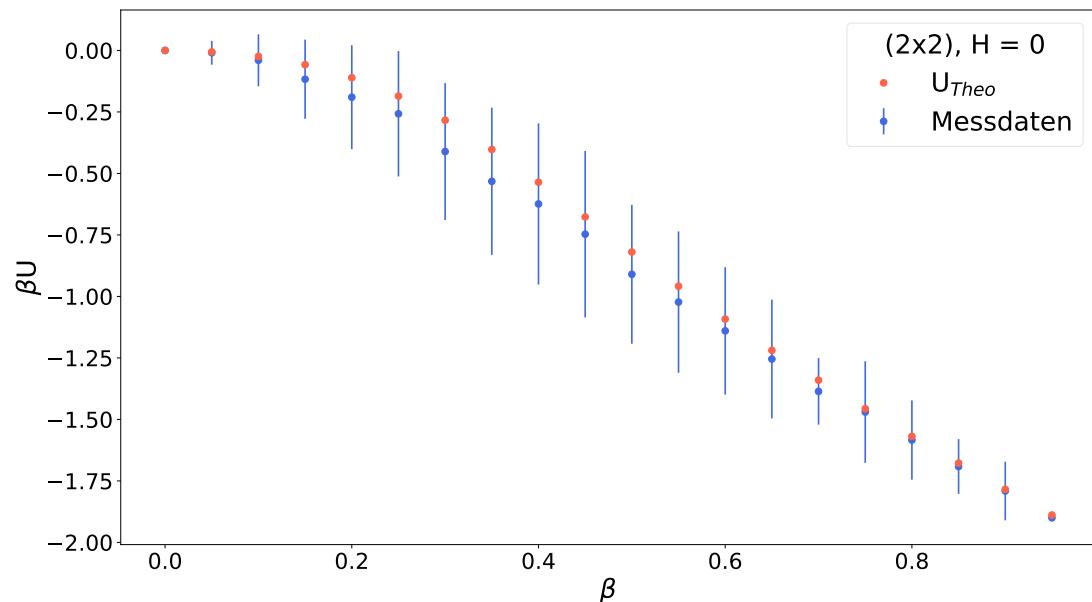
Um die allgemeine Richtigkeit des Programms zu überprüfen, wird für ein (2x2)-Gitter die Zustandssumme theoretisch nach (2.1) ermittelt und mit der gemessenen Energie verglichen. Für eine so kleine Gittergröße bleiben die möglichen Spinkonfigurationen überschaubar, denn es existieren 16 Konfigurationen, von denen einige aus energetischer Sicht identisch sind und es bleiben schließlich 2x6 Konfigurationen mit der Energie 0 und je zwei mit Energien +8 und -8. Damit folgt für die Zustandssumme schließlich:

$$(4.1) \quad Z = 2(6 + e^{8\beta} + e^{-8\beta}) = 12 + 4 \cosh 8\beta$$

und der Erwartungswert der Energie ergibt sich damit nach (2.3) zu

$$(4.2) \quad U_{Theo} = \langle E \rangle = -\frac{16 \sinh 8\beta}{12 + 2 \cosh 8\beta}.$$

Zum Vergleich wird der theoretisch ermittelte Erwartungswert pro Gitterplatz der Energie sowie die gemessene Observable des (2x2)-Gitters in Abhängigkeit von  $\beta$  aufgetragen. Dargestellt ist dies in Abbildung 17.



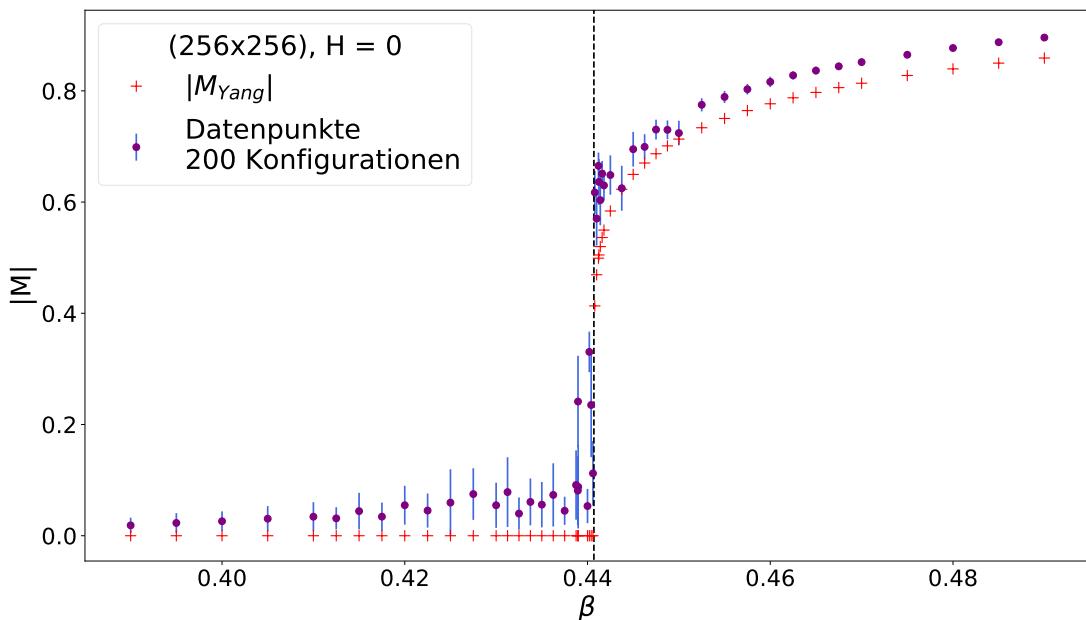
**Abbildung 17:** Dargestellt ist der theoretische und der gemessene Erwartungswert der Energie eines (2x2)-Gitters in Abhängigkeit von  $\beta$ . Dabei betrug das äußere Magnetfeld  $H = 0$ .

Erkennbar ist, dass die gemessenen Werte des Erwartungswertes der Energie in den Randbereichen den theoretischen entsprechen. Nähert man sich dem Phasenübergang, so weichen die Werte etwas voneinander ab, gleichzeitig erhöht sich jedoch die Unsicherheit der Messung. Dies entspräche jedoch dem erwarteten Verhalten und demnach ist die bei  $U$  und  $U_{Onsager}$  auftretende Abweichung in den Randbereichen hier nicht wiederzufinden. Dies spricht gegen einen systematischen Fehler im Programm. Im Rahmen des Projekt Praktikums wird an der Stelle auf eine weitere Fehlersuche verzichtet und die Messungen werden fortgeführt.

### Magnetisierung

In Abbildung 18 ist der Betrag der Magnetisierung  $|M|$  gegen  $\beta$  sowie zusätzlich der Betrag der Yang Magnetisierung  $|M_{Yang}|$  aufgetragen.

Dabei wurden für jeden Datenpunkt einer Messung 200 Konfigurationen abgespeichert, indem die erste Konfiguration erst ab 500 MCS durch das Gitter abgespeichert wurde und alle folgenden nach 20 MCS.



**Abbildung 18:** Dargestellt ist der Betrag der Magnetisierung  $|M|$  in Abhängigkeit von  $\beta$  bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes  $H$ . Zusätzlich wurde das kritische  $\beta_c$  mithilfe einer gestrichelten schwarzen Linie eingezeichnet, sowie der Betrag der Yang Magnetisierung  $|M_{Yang}|$  aus Gleichung (2.11) in rot. Es wurden 200 Konfigurationen pro Datenpunkt abgespeichert.

Deutlich erkennbar sind die auftretenden Fluktuationen im Bereich  $\beta < \beta_c$ . Auffällig sind weiterhin die doch großen Abweichungen für die gemessenen Werte von den theoretischen  $|M_{Yang}|$ . Erklärbar ist dies dadurch, dass eine systematische Abweichung sowohl im positiven als auch negativen Bereich vorliegt jedoch durch den Betrag diese Schwankung permanent auf den Wert aufaddiert wird. Nichtsdestotrotz kann der erwartete Verlauf beobachtet werden, in dem insbesondere der Phasenübergang klar erkennbar

ist.

Da im kritischen Bereich die Schwankungen immer größer werden, muss jedoch festgehalten werden, dass die mithilfe der Bootstrap-Methodik bestimmten Fehler nicht ausreichen um die Schwankungen zu erklären. Somit werden an dieser Stelle die Unsicherheiten der Messung leicht unterschätzt. Die Schwankungen kurz vor  $\beta_c$  sind erklärbar durch die immer größer werdende Autokorrelationslänge (AKL), welche schon bei  $U$  angesprochen wurde. In dieser Simulation wird mit einem endlichen Gitter und einer gleich bleibenden Anzahl von MCS und Konfigurationen gearbeitet. Demnach wird die AKL ab einem bestimmten Zeitpunkt zu groß für die hier vorliegenden Voraussetzungen.

Ebenfalls ist auch hier das Critical Slowing Down zu erkennen, da bei  $\beta_c$  eindeutig eine schnell auftretende Änderung des Systems zu erwarten ist, jedoch der Algorithmus zu träge reagiert.

Auffällig ist weiterhin, dass im Bereich  $\beta > \beta_c$  Abweichungen der simulierten Daten von  $|M_{Y_{ang}}|$  vorliegen, jedoch der Fehler mit größerem  $\beta$  kleiner werden bis sie augenscheinlich kaum mehr vorhanden sind. Dies ist erklärbar dadurch, dass das System bei einem Cold Start startet und es starr ist. Dadurch ändert sich  $|M|$  in diesem Bereich sehr wenig, wodurch man kaum Schwankungen und somit Unsicherheiten besitzt.

Es kann an dieser Stelle festgehalten werden, dass das von uns umgesetzte Ising-Modell in 2D funktioniert und alle Eigenschaften erfüllt, ebenfalls sind die Problematiken aufgrund des genutzten Metropolis-Algorithmus deutlich geworden. Die einzige Unsicherheit bilden die bei  $U$  festgestellten Abweichungen in den Randbereichen, die jedoch nicht durch einen Skalierungsfaktor erklärt werden können. Ebenfalls wurde überprüft, ob das System sich in eine erwartete Gleichgewichtslage einfand und auch das ist der Fall. Die Ursache für die auftretenden Abweichungen lassen sich an der Stelle nicht ausfindig machen, behindern jedoch die nachfolgenden Messungen nicht und werden demnach weiter durchgeführt.

### 4.3. Hysterese

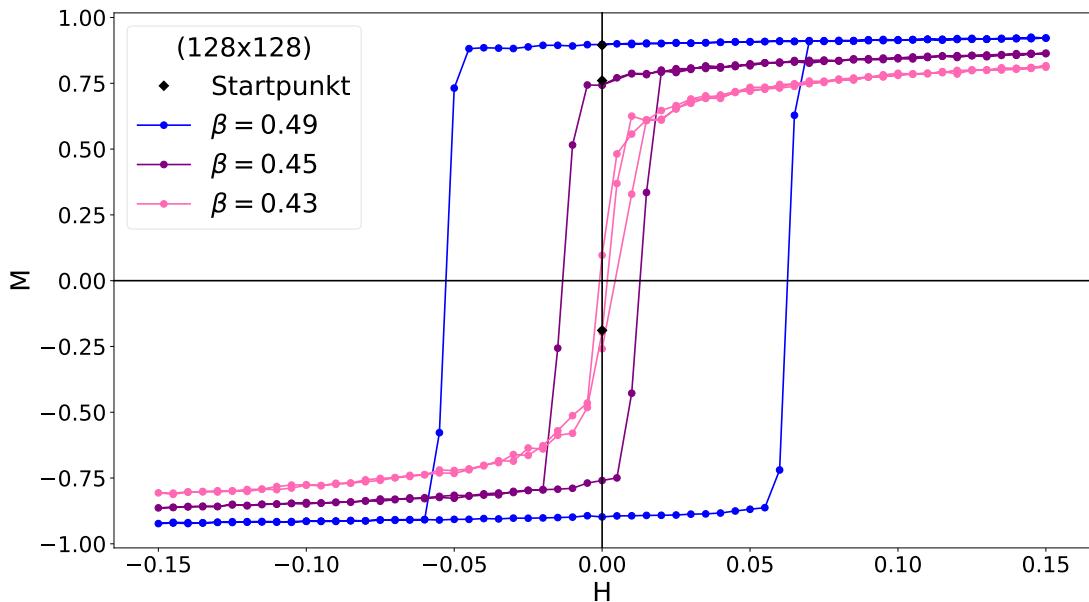
In diesem Abschnitt wird das Hysterese-Verhalten des 2D Ising-Modells untersucht, welches in diesem Projekt Praktikum mithilfe des Metropolis-Algorithmus' realisiert wurde. Die Untersuchung findet einmal hinsichtlich der Abhängigkeit von  $\beta$ , der Anzahl an Messungen, der Konfigurations- und der Gittergröße statt.

Gemessen wurde die Magnetisierung  $M$  in Abhängigkeit des äußeren Magnetfeldes mit der Feldstärke  $H$ . Jeder der hier durchgeföhrten Messungen fand in einem Bereich von  $H \in [-0.15, 0.15]$  in 0.005-er Schritten für das externe Magnetfeld statt, wobei zunächst bei  $H = 0$  gestartet und bis  $H = 0.15$  durchfahren wurde um in die Sättigung  $M_{Sat}$  zu laufen. Danach wurde  $H$  kontinuierlich verkleinert bis  $H = -0.15$  erreicht worden ist, um auch hier  $-M_{Sat}$  zu erreichen. Um die Messung und die Kurve abzuschließen wurde wieder kontinuierlich bis  $H = 0.15$  erhöht.

### 4.3.1. Abhangigkeit von $\beta$

In der Natur findet sich eine Temperaturabhangigkeit im Hystereseverhalten fur magnetische Materialien (vgl. Kapitel 2.4). In diesem Fall spiegelt sich die Temperaturabhangigkeit in der Variable  $\beta$  wieder und wurde fur das 2D Ising-Modell vermessen.

Um diese Abhangigkeit zu untersuchen, wurde  $M$  in Abhangigkeit von  $H$  fur ein (128x128)-Gitter bei  $\beta \in \{0.43, 0.45, 0.49\}$  vermessen. Zu sehen ist diese Messung in Abbildung 19. Wahrend dieser Messung wurden pro Datenpunkt 20 Konfigurationen abgespeichert, wobei die erste Konfiguration nach 200 MCS und jede weitere nach 100 MCS gespeichert wurde.



**Abbildung 19:** Dargestellt sind drei Hysteresekurven fur  $\beta \in \{0.43, 0.45, 0.49\}$  bei einem (128x128)-Gitter. Dabei sind pro Datenpunkt 20 Konfigurationen abgespeichert worden. Der Startpunkt jeder Messung ist in schwarz markiert.

Man kann erkennen, dass mit kleinerem  $\beta$  die Breite der Hysteresekurve immer weiter abnimmt. Außerdem kann man bei  $\beta = 0.43$  kein Hystereseverhalten feststellen, da im Vergleich zu den anderen Kurven keine feste Remanenz existiert. Im Anhang B.1 ist in Abbildung 24 der genaue Verlauf der Neukurve sowie der abfallenden und aufsteigenden Kurve verdeutlicht. Diese Schwankungen resultieren aus statischen Unsicherheiten des Algorithmus'.

Somit kann man den in der Natur ahnlichen Verlauf der Hysteresekurven und auch die  $\beta$ -Abhangigkeit fur das Ising-Modell in 2D beobachten. Mit kleinerem  $\beta$  nert man sich dem Phasenwechsel und ndert so die Materialeigenschaft von ferro- in paramagnetisch. Dadurch wird die anfangs vorhandene Magnetisierung bei  $H = 0$  des Materials immer weniger (vgl.  $\beta = 0.49$  mit  $\beta = 0.45$ ) bis sie letztendlich ganz entfllt (vgl.  $\beta = 0.43$ ), wodurch auch die Hysterese nicht mehr auftritt.

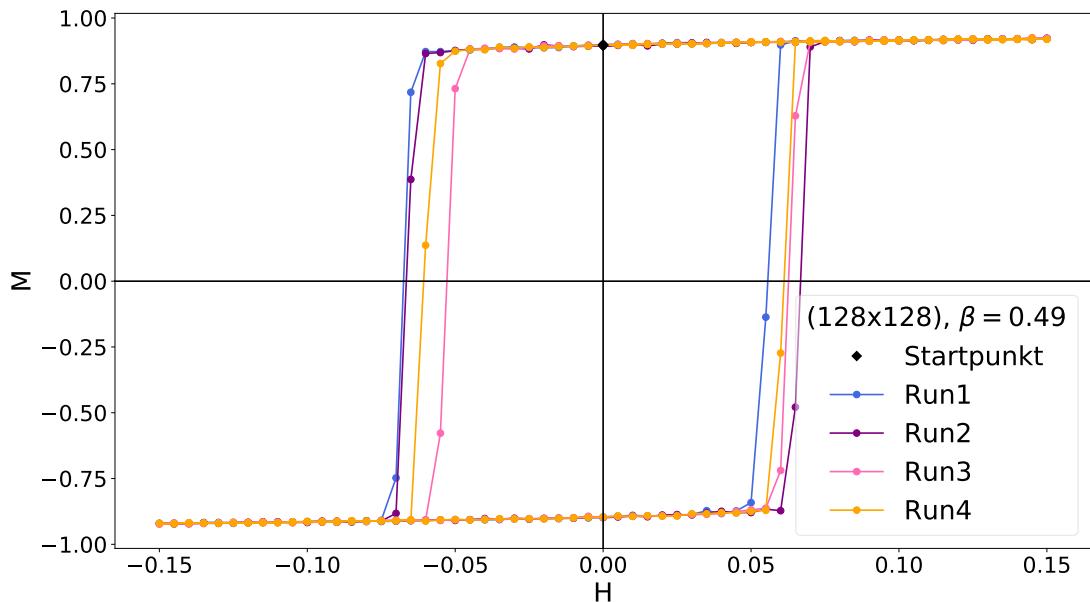
Ein Erklrungsansatz fur dieses Phenomen ist die Trigkeit des Metropolis' Algorithmus. Eine Vermutung ist an der Stelle, dass mit der Zunahme der Effektivitt des

genutzten Algorithmus' um das Ising-Modell in 2D zu realisieren, das Verhalten der Hysterese immer weniger beobachtbar wird. Dies müsste jedoch weiter untersucht werden. In diesem Projekt Praktikum wird in Abschnitt 4.3.4 mithilfe der Abhängigkeit der Konfigurationszahl versucht, eine Messung mit diesem Hinblick zu starten.

#### 4.3.2. Breite der Hysteresekurve

Um eventuell auftretende Schwankungen in der Breite der Hysteresekurve zu berücksichtigen, wurden vier Durchläufe (Runs) der Messungen mit den Gittergrößen (64x64) und (128x128) sowie drei Runs mit (256x256) und (512x512) bei  $\beta = 0.49$  durchgeführt. Dabei wurde auch die Konfigurationsgröße von 20 beibehalten.

An der Stelle wird beispielhaft die Gittergröße (128x128) betrachtet und diskutiert. Dargestellt ist diese Messung in Abbildung 20. Die anderen drei Plots sind im Anhang B.2 in den Abbildungen 25 bis 27 zu finden.



**Abbildung 20:** Dargestellt sind vier Durchläufe der Hysterese für ein (128x128)-Gitter und  $\beta = 0.49$ . Dabei wurde der Startpunkt schwarz markiert und es wurden 20 Konfigurationen pro Datenpunkt abgespeichert.

In Abbildung 20 sind verschiedene Koerzitivfelder vorhanden, das heißt man kann eine Verschiebung der Durchgangspunkte bei  $M = 0$  für die verschiedenen Runs feststellen. Ein Ansatz für die Erklärung könnte sein, dass sich durch die zufällige Wahl eines Spins im Gitter eines MCS der Punkt, an dem sich die Magnetisierung vollständig anfängt umzupolen, manchmal früher oder später getroffen wird. Dieses Verhalten zeigen auch die Messungen der anderen Gittergrößen (vgl. Anhang B.2).

Da dadurch die Koerzitivfelder als quantitative Größe nicht nutzbar sind, wird die Breite der Hysteresekurve im weiteren Verlauf genutzt.

### 4.3.3. Abhangigkeit von der Gittergroe

Um die Hysterese auf eine Abhangigkeit von der Hysterese zu untersuchen, werden die Breiten der zu untersuchenden Hysteresekurven (vgl. Abbildungen 20, 25, 26 und 27) ermittelt und miteinander verglichen. Die Breiten werden mithilfe von gemittelten Koerzitivfeldern bestimmt, indem alle Punkte innerhalb der abfallenden bzw. aufsteigenden Flanke pro Messung gemittelt werden und der Abstand zwischen den resultierenden Punkten berechnet wird. Zu sehen sind die so ermittelten Breiten in Tabelle 1. Jede Messung wurde mit 20 abgespeicherten Konfigurationen pro  $H$  wie in den vorherigen Kapiteln durchgefuhrt.

**Tabelle 1:** Dargestellt sind die Hysteresebreiten fur mehrere Durchlaufe (Runs) verschiedener Gittergroen sowie deren Mittelwert  $\mu$  und Standardabweichung  $\sigma$ . Durchgefuhrt wurden alle Messungen bei  $\beta = 0.49$  sowie 20 Konfigurationen pro  $H$ . Aufgrund der groen Rechenzeit fur die Gittergroen (256x256) und (512x512) wurden beide nur jeweils drei Mal vermessen, wohingegen (64x64) und (256x256) vier Mal vermessen wurden.

Run	(64x64)	(128x128)	(256x256)	(512x512)
1	0.117	0.120	0.110	0.105
2	0.115	0.135	0.100	0.108
3	0.125	0.120	0.105	0.110
4	0.133	0.115	-	-
$\mu \pm \sigma$	$0.119 \pm 0.004$	$0.125 \pm 0.007$	$0.105 \pm 0.004$	$0.107 \pm 0.002$

Erkennbar sind deutliche Schwankungen in den Hysteresebreiten pro Run. Die deutlichste Abweichung besitzt das (256x256)-Gitter im zweiten Run, jedoch lasst sich auch eine sehr groe Schwankung im (64x64)-Gitter ausmachen.

Um die Werte noch besser untersuchen zu konnen, wurden in Abbildung 21 die jeweiligen Mittelwerte und ihre Standardabweichungen in Abhangigkeit der Gittergroe visualisiert. Erkennbar ist, dass sich sowohl die Gittergroen (64x64) und (128x128) (folgend als *klein*) als auch (256x256) und (512x512) (folgend als *gro*) in ihren Breiten innerhalb ihrer Standardabweichungen uberschneiden. Allerdings uberschneiden sich die Werte der kleinen nicht mit den groen Gittern. Des Weiteren ist auffallig, dass die kleineren deutlich groere Breiten als die groeren besitzen.

Man kann weder sagen, dass die Breiten der Hysterese unabhangig von der Wahl der Gittergroe sind noch kann man festhalten, was fur eine Abhangigkeit besteht. Dazu mussten entweder weitere Runs durchgefuhrt werden, um eine besser fundierte Statistik ausfuhren zu konnen, oder aber groere Gittergroen als (512x512) hinzugenommen werden, um so eventuelle Schwankungen in der Berechnung der Magnetisierung zu minimieren.

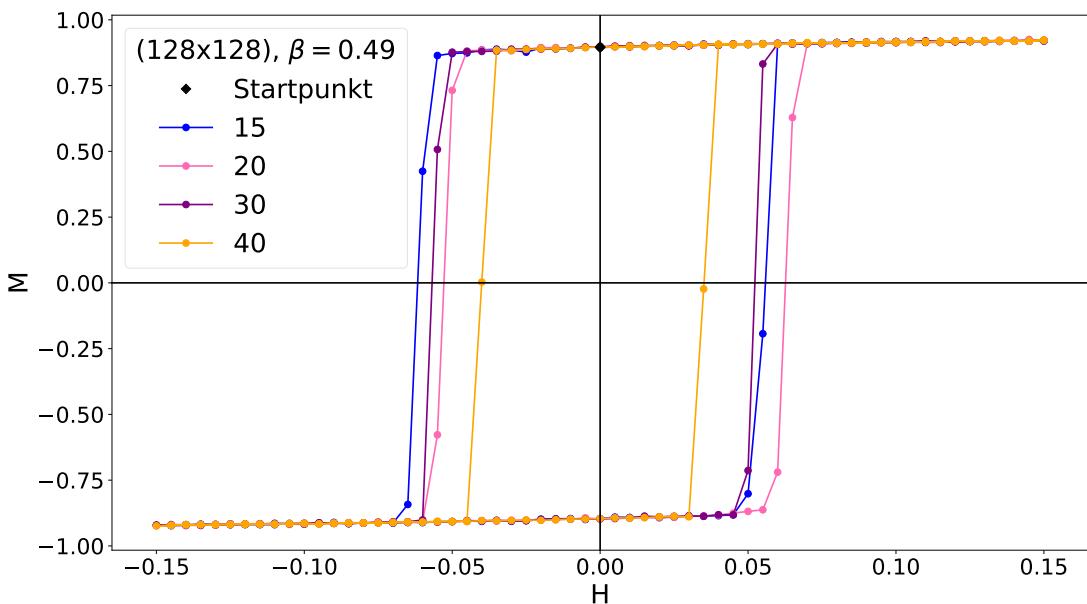
### 4.3.4. Abhangigkeit von der Konfigurationszahl

In diesem Abschnitt wird die Hysterese auf die Abhangigkeit von der Konfigurationszahl untersucht, welche pro  $H$  abgespeichert werden. Dabei bleiben sowohl die Gittergroe (128x128) als auch  $\beta = 0.49$  bei allen Messungen gleich.



**Abbildung 21:** Dargestellt sind die Breiten für verschiedene Hysteresekurven von unterschiedlichen Gittergrößen. Verwendet wurden die in Tabelle 1 dargestellten Mittelwerte  $\mu$  und ihre Standardabweichungen  $\sigma$ .

In Abbildung 22 sind die Ergebnisse der Messungen dargestellt.



**Abbildung 22:** Dargestellt sind Hysteresekurven für vier verschiedene Konfigurationsgrößen, welche pro Datenpunkt abgespeichert wurden. Gemessen wurde für ein  $(128 \times 128)$ -Gitter und einem festen  $\beta = 0.49$ . Der Startpunkt wurde schwarz markiert.

Jede Messung wurde mit der gleichen Anzahl von 200 ersten MCS durch das Gitter vermessen, variiert wurde nur nach wie vielen MCS jede weitere Konfiguration abge-

speichert wurde.

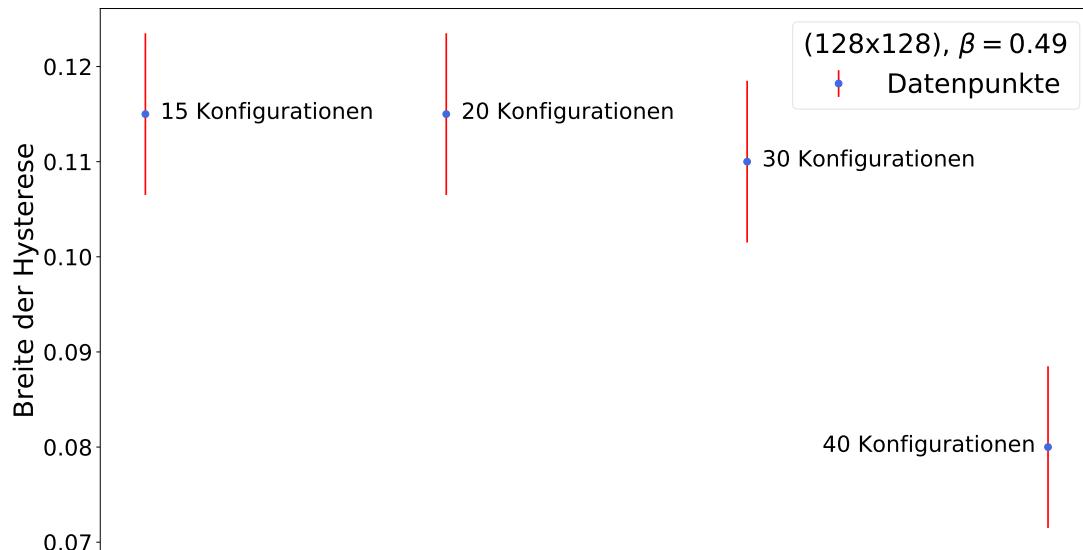
In dieser Messung sind wieder die Schwankungen in den Koerzitivfeldern sichtbar. Da aber im vorherigen Abschnitt bemerkt wurde, dass diese sich nicht als quantitative Größe eignet, werden die Breiten der Hysteresekurven betrachtet, welche in Tabelle 2 aufgelistet sind.

**Tabelle 2:** Dargestellt sind die Breiten der Hysteresekurven von vier verschiedenen Konfigurationsgrößen für das (128x128)-Gitter. Dabei betrug  $\beta = 0.49$ .

Konfigurationsgröße	15	20	30	40
Breite der Hysterese	0.115	0.115	0.110	0.080

Sichtbar ist, dass sich die Breiten für die Konfigurationszahlen 15 und 20 nicht voneinander unterscheiden. Ab einer Konfigurationszahl von 30 sinkt der Wert der Breite leicht ab und bei 40 ist diese schon deutlich kleiner im Vergleich zu 15 oder 20. Dies lässt sich dadurch erklären, dass mit jeder höheren Konfigurationszahl die Hysterese, also die Trägheit des Systems, immer weiter verschwindet.

Nimmt man zusätzlich den bestimmten Fehler  $\sigma_{(128 \times 128)}$  für die jeweiligen Breiten an und plottet die Breite in Abhängigkeit der Konfigurationsgrößen, so ergibt sich die Abbildung 23.



**Abbildung 23:** Dargestellt sind die Breiten für verschiedene Hysteresekurven von unterschiedlichen Konfigurationsgrößen des (128x128)-Gitters. Dabei wurde als Fehler der Breite  $\sigma_{(128 \times 128)}$  angenommen.

Es wird auch hier noch einmal deutlich, dass sich zwar die 30 Konfigurationen noch in einem Schwankungsbereich von 20 befinden, jedoch die für 40 sich nicht mit den vorherigen Werte der Breite überschneiden.

Somit hängt die Hysterese von der Anzahl der Konfigurationen pro  $H$  ab. Erklärbar ist dies dadurch, dass mit einer höheren Konfigurationsanzahl und den dadurch höheren

MCS das System sich in ein Equilibrium einfinden kann. Dadurch verschwindet die Trägheit des Systems und damit die Hysterese.

Der Erklärungsansatz aus Kapitel 4.3.1 könnte sich somit an der Stelle bestätigen, dass mit fehlender Trägheit die Hysterese nicht mehr beobachtbar wäre.

## 5. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieses Projekt Praktikums wurde das 2D Ising-Modell mithilfe eines in Python programmierten Codes umgesetzt. Zudem konnten die Eigenschaften des Modells im Hinblick auf den Phasenübergang 1. und 2. Ordnung untersucht werden.

Für die Umsetzung wurde der Metropolis-Algorithmus mit einem zufällig bestimmten Gitterpunkt pro Monte-Carlo Schritt (MCS) sowie das Bootstrap-Verfahren für die Bestimmung der Unsicherheiten der simulierten Werte genutzt. Ebenfalls ist es gelungen, neben einer geordneten Code-Struktur die Simulationsgeschwindigkeit in Python mithilfe der *Jitclass*-Funktion zu beschleunigen. Ebenfalls konnte mithilfe der *FuncAnimation*-Funktion der animation-Klasse das Gitter einer Messung dargestellt werden. Diese konnten anschließend zu einem Film zusammen gefasst und so ein Messvorgang animiert werden.

Ebenfalls ist es gelungen, den Finite-Size-Volume-Effekt der Gittergrößen von 2 bis 512 der  $2^n$ -Reihe sowie das qualitative Verhalten der Observablen der inneren Energie  $U$  und den Betrag der Magnetisierung  $|M|$  für ein (256x256)-Gitter im Bereich  $\beta \in [0.39, 0.49]$  mit einem Übergang 2. Ordnung in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes zu zeigen. Dieser beschreibt den Übergang einer paramagnetischen ( $\beta < \beta_c$ ) in eine ferromagnetische ( $\beta > \beta_c$ ) Phase.

Bei der Untersuchung von  $U$  ist aufgefallen, dass die Datenpunkte an den Randgebieten bei  $\beta = 0.39$  und  $\beta = 0.49$  eine unerwartete Abweichung von den theoretischen Onsager-Werten  $U_{Onsager}$  zeigten. Um Fehler im Code auszuschließen wurde zum einen überprüft, ob sich ein mithilfe des Codes umgesetztes (128x128)-Gitter überhaupt in einen Gleichgewichtszustand einfindet. Dies tut es, zwar mit einer kleinen jedoch systematischen Abweichung von  $U_{Onsager}$ . Und zum anderen wurde der Erwartungswert der Energie für ein (2x2)-Gitter sowohl theoretisch (mit Hilfe der Zustandssumme) als auch gemessen gegen das  $\beta \in [0, 1]$  aufgetragen. Dabei konnte das korrekte Verhalten des Algorithmus' bestätigt werden.

Aufgrund des Zeitfaktors wurde die Fehlersuche aufgegeben und der Code für weitere Messungen genutzt, da die erwarteten Eigenschaften des Ising-Modells in 2D für einen Phasenübergang 2. Ordnung gezeigt und nachgewiesen werden konnten.

Eine ergänzende Messung wurde getätigt, um die optimale Konfigurationsgröße zu ermitteln mit der die Observablen vermessen werden sollten. Da auch hier der Zeitfaktor eine große Rolle spielte, wurden einmal 100 abgespeicherte Konfigurationen, mit einem ersten Abspeichern nach 220 MCS und jedem weiteren nach 20 MCS, und einmal 200, mit einem ersten Abspeichern nach 500 MCS und jedem weiteren nach 20 MCS, miteinander verglichen. Aufgrund der weniger auftretenden Unsicherheiten bei der Ob-

servablen  $U$  sowie des besseren Verlaufs im Bereich  $\beta > \beta_c$  bei  $|M|$  wurde sich für 200 abgespeicherte Konfigurationen pro Datenpunkt entschieden. Ebenfalls spricht für die doppelt so hohe abgespeicherte Anzahl die doppelt so große Statistik.

Als Kern dieses Projektpraktikums wurde das Hysterese-Verhalten des hier umgesetzten Ising-Modells als Phasenübergang 1. Ordnung untersucht. Dabei konnte die Abhängigkeit von  $\beta$  anhand eines (128x128)-Gitters für ein externes Magnetfeld mit einer Feldstärke im Bereich  $H \in [-0.15, 0.15]$  nachgewiesen werden. Um die Abhängigkeit der Hysterese von der Gittergröße zu untersuchen, wurde als quantitative Größe die Breite der Hysterese-Kurven genutzt. Zum Vergleich wurden die Breiten von (64x64)-, (128x128)-, (256x256)- sowie (512x512)-Gittern verschiedener Runs bestimmt und dessen Mittelwerte sowie Standardabweichungen verglichen. Als Resultat ergab sich, dass eine Abhängigkeit nicht ausgeschlossen werden konnte. Jedoch konnte nicht festgestellt werden, wie diese aussieht.

Abschließend konnte nachgewiesen werden, dass die Hysterese abhängig von der Anzahl der abgespeicherten Konfigurationszahl pro Datenpunkt ist: Je höher die Anzahl desto geringer ist die Hysteresebreite.

Abschließend lässt sich festhalten, dass das Projekt Praktikum erfolgreich verlaufen ist: Einerseits konnte zumindest qualitativ die Eigenschaften des Ising-Modells in 2D am Phasenübergang 2. Ordnung nachgewiesen und untersucht werden. Dabei wäre jedoch eine Erklärung des abweichenden Verhaltens an den Randgebieten als Verbesserungsmöglichkeit zu erwähnen. Ebenfalls könnten sich größere Gittergrößen als weitere Verifizierung des beobachteten Final-Size-Volume-Effekts sowie des Critical-Slowing-Down angeschaut werden. Als Zusatz könnten die Observablen im Hinblick auf ein externes Magnetfeld  $H \neq 0$  untersucht werden.

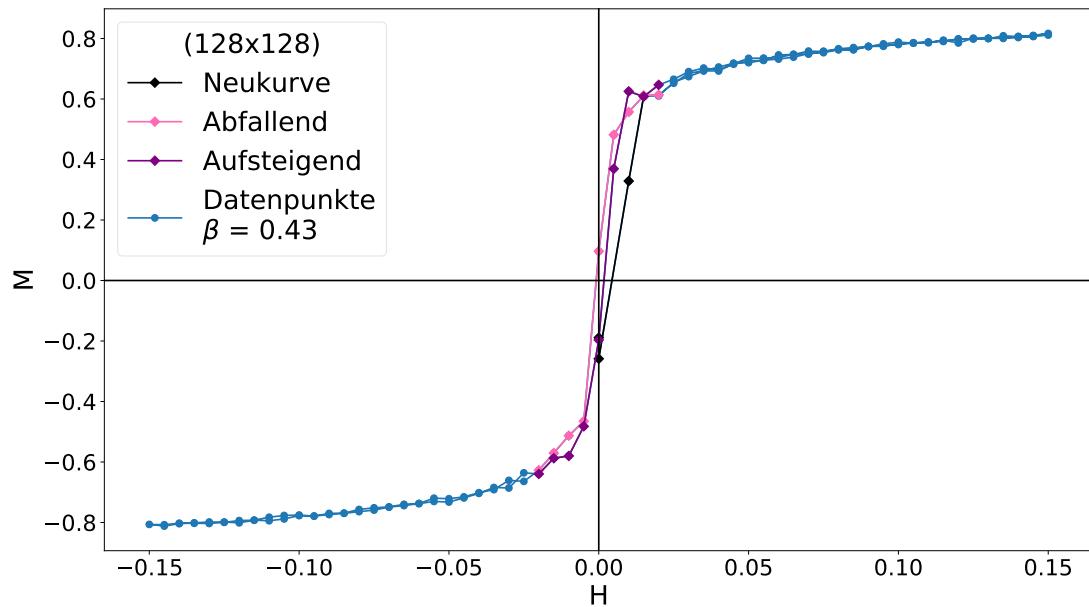
Um einen weiteren Erfolg dieses Projekt Praktikums zu erwähnen, konnte als Phasenübergang 1. Ordnung die Hysterese für das Ising-Modell in 2D nachgewiesen werden. Es konnte die Abhängigkeit von  $\beta$  und von der Anzahl an gespeicherten Konfigurationen pro Datenpunkt gezeigt und erklärt werden. Ebenfalls konnte eine Abhängigkeit von der Gittergröße gezeigt, allerdings nicht erklärt werden. Dies wäre als Ansatz für den Ausblick zu erwähnen, da auch hier weitere Messungen und größere Gitter nötig wären um einen deutlichen Erklärungsansatz liefern zu können. Abschließend könnte die These weiter untersucht werden, ob mit höherer Effizienz des Algorithmus' die Hysterese nicht mehr beobachtbar ist. Dafür könnten weitere Algorithmen im Hinblick auf ihr Hystereseverhalten untersucht werden.

## A. Literaturverzeichnis

- P. Bovenkamp. *Phasenübergänge im frühen Universum*. 2011. Seminar zur Theorie der Teilchen und Felder, <https://www.uni-muenster.de/Physik.TP/archive/fileadmin/lehre/teilchen/ws1112/Phasenuebergaenge.pdf> (Zugriff: 18.08.20).
- H. Büch. *Das Ising-Modell*. 2005. Seminar der Uni Münster, [https://www.uni-muenster.de/Physik.TP/archive/Seminare/teilchen/teilchen\\_ws05/Ising.pdf](https://www.uni-muenster.de/Physik.TP/archive/Seminare/teilchen/teilchen_ws05/Ising.pdf) (Zugriff: 10.08.20).
- C. B. Gattringer, C. Lang. *Quantum Chromodynamics on the Lattice - An Introductory Presentation*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010. Kapitel 4.
- Universität Hannover. Website, 2013. Praktikumsmaterial, [https://ap.iqo.uni-hannover.de/doku.php?id=b\\_waermelehre:p-t-diagramm](https://ap.iqo.uni-hannover.de/doku.php?id=b_waermelehre:p-t-diagramm) (Zugriff: 07.08.20).
- K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 1987. Kapitel 1, 14 & 15.
- C. Hölbling. *The two-dimensional Ising-model on lattices with Trivial Homotopy Group*. 1995. Dissertation, Karl-Franzens Universität Graz.
- L. Debus, M. J. Weitz. *2d-Ising*. Github Project. <https://github.com/Lotterbe/2d-Ising> (Zugriff: 11.02.21).
- D. Meier. *Untersuchung des zweidimensionalen Ising-Spinsystems auf Phasenübergänge*. 2009. Bachelor Arbeit, Universität Bielefeld, <https://obelix.physik.uni-bielefeld.de/~schnack/examina/bachelor-meier-2009.pdf> (Zugriff: 03.08.20).
- H.-Ch. Mertins. Website, 2015. [https://www.fh-muenster.de/physiklabor/downloads/Pr\\_PhII\\_FK04\\_Magnetismus\\_07.pdf](https://www.fh-muenster.de/physiklabor/downloads/Pr_PhII_FK04_Magnetismus_07.pdf) (Zugriff: 18.08.20).
- W. Nolting. *Grundkurs theoretische Physik 6 - Statistische Mechanik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014.
- M. Pangallo, A. Sala, and C. Panigutti. *Monte Carlo simulations of the ising model on lattices and power law networks*. 2014.
- Duden Physik Schülerlexikon. Website. <https://learnattack.de/schuelerlexikon/physik/ferromagnetismus> (Zugriff: 18.08.20).
- Spektrum. Website. <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/phasenuebergang/11136> (Zugriff: 30.12.20).
- L. Varnhorst. *Selected topics of lattice gauge theory*. Lattice QCD Seminar Uni Wuppertal, 2019. Kapitel 1.

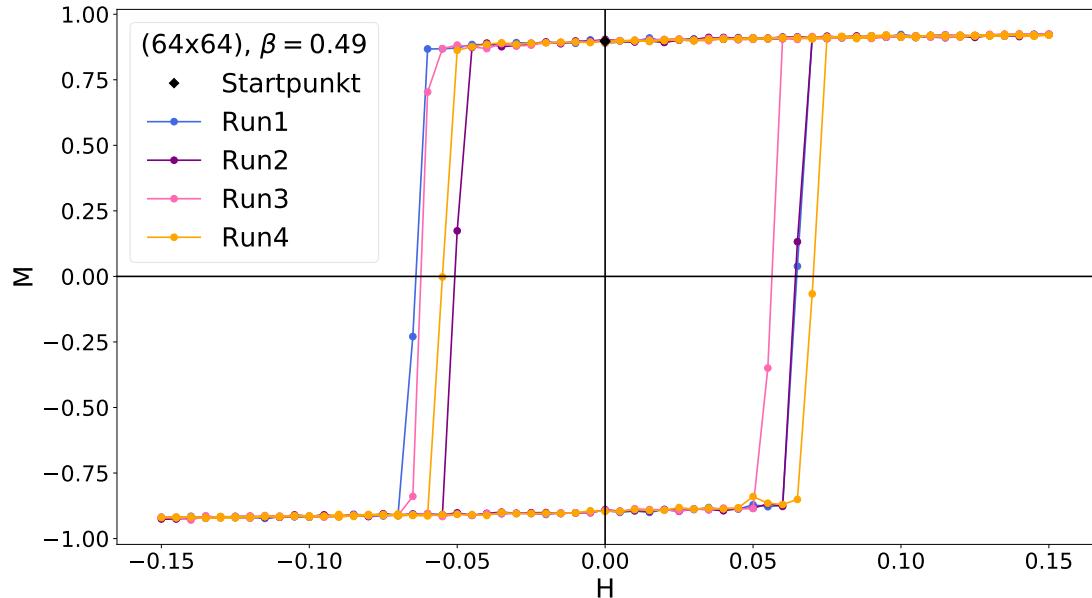
## B. Anhang

### B.1. Einfärbung der Hysterese-Kurve des (128x128)-Gitters bei $\beta = 0.43$

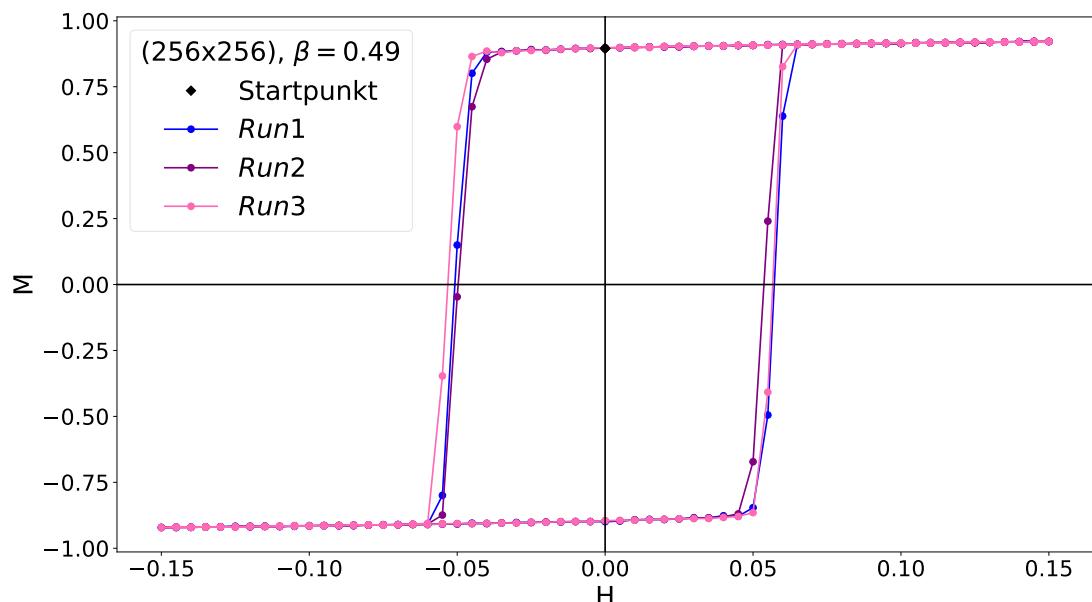


**Abbildung 24:** Dargestellt ist die Hysterese-Kurve des (128x128)-Gitters für  $\beta = 0.43$ . Der Startpunkt wurde schwarz markiert und es wurden 20 Konfigurationen pro Datenpunkt eingespeichert. Zudem wurden einerseits die Neukurve, die abfallende und aufsteigende Flanke farblich verschieden markiert.

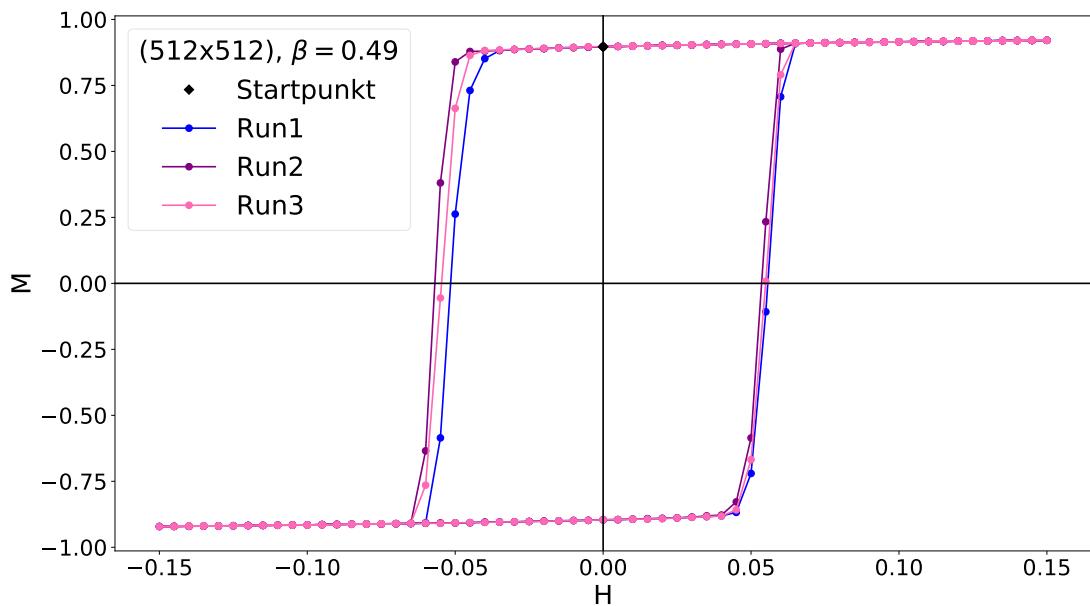
## B.2. Hysteresekurven für verschiedene Runs und Gittergrößen



**Abbildung 25:** Dargestellt sind vier Durchläufe der Hysterese für ein  $(64 \times 64)$ -Gitter bei  $\beta = 0.49$ . Dabei wurden der Startpunkt schwarz markiert und es wurden 20 Konfigurationen pro Datenpunkt abgespeichert.



**Abbildung 26:** Dargestellt sind drei Durchläufe der Hysterese für ein  $(256 \times 256)$ -Gitter bei  $\beta = 0.49$ . Dabei wurden der Startpunkt schwarz markiert und es wurden 20 Konfigurationen pro Datenpunkt abgespeichert.



**Abbildung 27:** Dargestellt sind zwei Durchläufe der Hysterese für ein (512x512)-Gitter bei  $\beta = 0.49$ . Dabei wurden der Startpunkt schwarz markiert und es wurden 20 Konfigurationen pro Datenpunkt abgespeichert.