

Kapitel 5

Monte-Carlo-Simulation des Ising-Modells

M. Quandt & G. Burgio

5.1 Problemstellung

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

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

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

Elektronenhülle bestimmt, so daß man sich auf die Untersuchung atomarer Spinfreiheitsgrade auf fixen Positionen eines Kristallgitters konzentrieren kann. Solche Modelle des Magnetismus nennt man *Spinmodelle*.

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

5.2 Klassische Spinmodelle

Wie in der Einleitung dargelegt, betrachten wir ein Modell aus Spinfreiheitsgraden $\{s_x\}$, die auf den Punkten (*sites*) eines regulären Kristallgitters $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ in d Raumdimensionen lokalisiert sind, vgl. Abbd. 5.1. Die Spins sind hierbei *klassisch*, d.h. zahlenwertige Funktionen anstelle quantenmechanischer Operatoren. Hierbei geht man von der Vorstellung aus, daß das wesentliche Verhalten eines Spinmodells von seinen thermischen Fluktuationen herrührt, und über die Quantenfluktuationen seiner atomaren Freiheitsgrade effektiv gemittelt werden kann. Auf diese Weise reduziert sich z.B. die Wechselwirkung eines quantenmechanischen Spinoperators $\hat{\sigma}$ mit einem externen magnetischen Feld \mathbf{B} auf den klassischen Energieterm¹

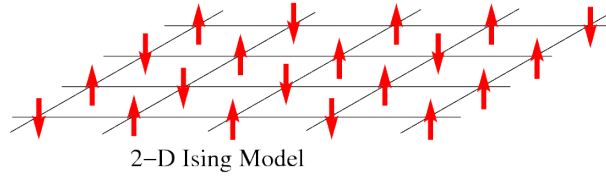
$$E = \langle \hat{H} \rangle = -\mathbf{B} \cdot \langle \boldsymbol{\mu} \rangle = -B_z \cdot g \mu_B \left\langle \frac{\sigma_z}{\hbar} \right\rangle = -h \left\langle \frac{2\sigma_z}{\hbar} \right\rangle \equiv -hs,$$

wobei das externe Magnetfeld in z -Richtung gelegt wurde und irrelevante Konstanten im reskalierten Magnetfeld $h = g\mu_B B_z/2$ absorbiert wurden. Der *klassische* Spin $s \equiv \langle 2\sigma_z/\hbar \rangle$ ist nun kein Operator mehr und nimmt für den Elektronenspin $\sigma = \frac{1}{2}$ die beiden numerischen Werte $s = \pm 1$ an.

Die magnetische Wechselwirkung zweier Kristallelektronen ist etwas komplizierter. Für *freie* magnetische Momente $\boldsymbol{\mu}_x$ und $\boldsymbol{\mu}_y$ an fixen Positionen \mathbf{x} und \mathbf{y} mit Abstand $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ gilt klassisch

$$\begin{aligned} V_{xy} &= \frac{1}{4\pi r^3} \left[\boldsymbol{\mu}_x \cdot \boldsymbol{\mu}_y - 3(\boldsymbol{\mu}_x \cdot \hat{\mathbf{r}})(\boldsymbol{\mu}_y \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right] \\ &= s_x s_y \frac{|\boldsymbol{\mu}|^2}{4\pi r^3} \left[\hat{n}_x \cdot \hat{n}_y - 3(\hat{n}_x \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{n}_y \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right] \\ &\equiv -J_{xy} s_x s_y, \end{aligned} \tag{5.1}$$

¹Das magnetische Moment wird in der Atomphysik zweckmäßigerweise in Einheiten des Bohr'schen Magnetons $\mu_B = e\hbar/(2m)$ gemessen.

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

wobei $\hat{r} = \mathbf{r}/r$ und $\hat{n} = \boldsymbol{\mu}/|\boldsymbol{\mu}|$ Einheitsvektoren sind. Eine analoge Formel gilt wegen des schnellen Abfalls der Dipol-Wechselwirkung auch quantenmechanisch, wenn die atomaren Wellenfunktionen im Wesentlichen in der Nähe des jeweiligen Gitterplatzes lokalisiert sind (*tight binding*):

$$\left\langle \frac{2\sigma_z(x)}{\hbar} \cdot \frac{2\sigma_z(y)}{\hbar} \right\rangle \approx \left\langle \frac{2\sigma_z(x)}{\hbar} \right\rangle \cdot \left\langle \frac{2\sigma_z(y)}{\hbar} \right\rangle = s_x \cdot s_y.$$

Die Kopplungsmatrix J_{xy} ist im Fall eines realen Kristallgitters allerdings komplizierter als der Ausdruck (5.1) für freie Dipole; in jedem Fall hängt J_{xy} von der Kristallstruktur, der relativen Orientierung und dem Abstand r der Spins ab. Ein externes Feld und die Kristallstruktur des Gitters zeichnen i.a. eine (oder mehrere) Vorzugsrichtungen aus, bzgl. derer die Spinzustände quantisiert sind. Man erhält so ein Bild ausgerichteter atomarer Dipole wie in Abb. 5.1. Die effektive Kopplungsmatrix J_{xy} hängt nur noch vom Gitterabstand $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ der beteiligten Spins ab und fällt mit größerem Abstand sehr schnell ab. Als Ergebnis dieser heuristischen Betrachtungen ergibt sich bereits die effektive Hamiltonfunktion der klassischen Spin-Modelle,

$$H = - \sum_{x,y \in \Lambda} J_{xy} s_x s_y - \sum_{x \in \Lambda} h_x s_x, \quad (5.2)$$

wobei die s_x an den Gitterpunkten keine Operatoren, sondern (ganze) Zahlen sind; für einen Spin $\frac{1}{2}$ etwa wäre die atomare Dynamik auf ein simples *bit* $s_x \in \{\pm 1\}$ reduziert. Das Raumgitter Λ wird üblicherweise *hyperkubisch* angenommen,² d.h. jeder Gitterpunkt $x \in \Lambda$ ist durch ein d -Tupel ganzer Zahlen $\vec{n} = (n_1, \dots, n_d)$ charakterisiert,

$$x = \sum_{i=1}^d a_i (n_i \mathbf{e}_i) = a \sum_{i=1}^d n_i \mathbf{e}_i = a \vec{n}, \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad (5.3)$$

wobei der Gitterabstand a in allen Raumrichtung gleich angesetzt wurde und die Basisvektoren \mathbf{e}_i des kubischen Gitters karthesisch sind. Falls der Gitterabstand a explizit auftritt, kann man ihn in den Kopplungen des Modells (5.2) absorbieren; man unterscheidet daher nicht mehr zwischen dem tatsächlichen räumlichen Gitterpunkt x und seinem Index \vec{n} . Jeder Gitterpunkt x hat $2d$ nächste Nachbarn und $2d$ Gitterkanten (*bonds*), die zu diesen Nachbarn führen.

In der Realität (und noch mehr in Computersimulationen) ist die tatsächliche Zahl von Freiheitsgraden natürlich endlich, d.h. das Gitter $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ verfügt nur über eine

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

endliche Zahl L_i von Gitterpunkten in der i -ten Raumdimension, und die Zahl der Spins ist $L \equiv L_1 \cdots L_d$. Um ein mathematisch definiertes Modell zu bekommen muss man an den Rändern des Gitters in jeder Raumdimension geeignete Randbedingungen stellen. Die genaue Form dieser Randbedingungen sollte für ein ausreichend großes System unerheblich sein; um die Homogenität und (Gitter-)Translationsinvarianz des unendlichen Kristalls \mathbb{Z}^d beizubehalten, wählt man aber üblicherweise *periodische Randbedingungen*,

$$s_x = s_{x'} \quad x' = x + L_k \mathbf{e}_k \quad \forall k = 1, \dots, d. \quad (5.4)$$

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

Wegen des schnellen Abfalls der Kopplungsmatrix mit dem Gitterabstand genügt es oftmals, bei der Spin-Spin-Wechselwirkung in (5.2) nur die Kopplung an die $2d$ nächsten Nachbarn mitzunehmen. Hierfür führt man zweckmäßigerweise das Symbol

$$\sum_{\langle x, y \rangle} \equiv \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda} \sum_{\substack{y \in \Lambda \\ |y-x|=1}} \quad (5.5)$$

ein, wobei $\langle x, y \rangle$ eine *Kante* des Gitters bezeichnet, und der Faktor $\frac{1}{2}$ auf der rechten Seite berücksichtigt, daß jede Kante doppelt gezählt wird, wenn man alle $2d$ nächsten Nachbarn y berücksichtigt. Darüberhinaus ist das System üblicherweise *isotrop*, so dass die Spin-Spin-Kopplung $J_{xy} \equiv J$ richtungsunabhängig konstant ist. Man erhält so die Hamiltonfunktion des klassischen Ising-Modells mit einem homogenen externen Magnetfeld $h_x \equiv h$:

$$H = -J \sum_{\langle x, y \rangle} s_x s_y - h \sum_{x \in \Lambda} s_x, \quad s_x \in \{-1, 1\}. \quad (5.6)$$

Ferromagnetische Wechselwirkungen $J > 0$ bevorzugen parallel ausgerichtete Spins an nächsten Nachbarn, während antiferromagnetische Wechselwirkungen $J < 0$ die gegenteilige Tendenz haben. Die Parameter J und h haben die Dimension einer *Energie*, treten aber im Folgenden nur in der dimensionslosen Kombination βJ und βh auf, wobei $\beta = 1/(k_B T)$ die inverse Temperatur in Einheiten der Boltzmannkonstante k_B ist. Misst man die Energie also in Einheiten von $|J|$, so kann man H , h und β dimensionslos machen und $|J| = 1$ erzwingen; hiervon wird im Folgenden ausgegangen.

5.3 Spinmodelle im thermischen Gleichgewicht

Im isolierten Zustand nimmt das Spinmodell die Konfiguration mit minimaler Energie an. Für ferromagnetische Systeme bedeutet dies, dass alle Spins denselben mikroskopischen Zustand annehmen, d.h. im Falle des Ising-Modells alle Spins parallel sind. Ohne äußeres Magnetfeld $h = 0$ sind die beiden möglichen Grundzustände ($s_x = \pm 1$

für alle Gitterpunkte x) gleich wahrscheinlich und würden bei sehr vielen identischen Kopien des Systems tatsächlich jeweils in etwa der Hälfte aller Fälle beobachtet werden. Liegt jedoch nur ein einziges System vor, so wählt dieses System seinen Grundzustand zufällig (*spontan*) und bricht damit die Symmetrie $s_x \rightarrow (-s_x)$ der Hamilton-Funktion (5.6) mit $h = 0$. Dieses kollektive Verhalten resultiert also in einer permanenten *Magnetisierung* des Systems und ist einer der Hauptcharakteristika von Ferromagneten.

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

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

Man bezeichnet die Gesamtheit der aktuellen Werte aller Spinvariablen als *Mikrozustand* oder *Konfiguration* $\omega = \{s_x\}$. Der Zustandsraum Ω des Ising-Modells (5.6) enthält demnach $|\Omega| = 2^L$ mögliche Konfigurationen. Im thermodynamischen Gleichgewicht tragen alle Konfigurationen $\omega \in \Omega$ zu den thermischen Mittelwerten mit einer temperaturabhängigen Wahrscheinlichkeit $P_\beta(\omega)$ bei. Unter den gegebenen Bedingungen (feste Teilchen- bzw. Spinzahl und Temperatur) ist diese Wahrscheinlichkeit durch die *Boltzmann-Verteilung* gegeben:

$$P_\beta(\omega) = Z^{-1} \exp[-\beta H(\omega)]$$

$$Z \equiv \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H(\omega)} = \text{tr } e^{-\beta H} \quad (5.7)$$

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

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T} \quad (5.8)$$

und allen weiteren Parametern der Hamilton-Funktion ab; für das Ising-Modell (5.6) gilt also $Z = Z(\beta, h)$ bzw. $Z = Z_L(\beta, h)$ wenn man endliche Systeme betrachtet.³ Aus

³Im Prinzip ist $Z = Z(\beta J, \beta h)$, aber wie bereits oben erklärt kann man durch Wahl der Energieeinheit immer $|J| = 1$ erreichen und sowohl β als auch h dimensionslos machen. Darüberhinaus ist es nicht unüblich, die dimensionslose Kombination βh selbst als externes Feld h zu bezeichnen. Zumindest in den Endformeln notieren wir aber immer βJ und βh explizit um Verwirrung zu vermeiden.

der Zustandssumme erhält man die *freie Energie*

$$F = F_L(\beta, h) = -\beta^{-1} \ln Z. \quad (5.9)$$

Dies ist eine extensive Größe und divergiert daher für eine große Zahl L von Freiheitsgraden (spins) proportional zu L . Es ist somit sinnvoll die *freie Energiedichte*

$$f_L(\beta, h) = \frac{F_L(\beta, h)}{L} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} f(\beta, h) \quad (5.10)$$

einzuführen, die – wie angegeben – unter recht allgemeinen Voraussetzungen einen thermodynamischen Limes besitzt. Die Kenntnis der Zustandssumme (5.7) bzw. der freien Energiedichte (5.10) entspricht einer vollständigen Lösung des Systems, da sich alle makroskopisch relevanten Observablen daraus berechnen lassen. Zum Beispiel folgt für die innere Energiedichte⁴

$$\epsilon = \epsilon_L(\beta, h) \equiv \frac{\langle H \rangle}{L} = f_L + \beta \frac{\partial f_L}{\partial \beta}, \quad (5.11)$$

und die Magnetisierung am Gitterpunkt x ergibt sich als

$$m_x = \langle s_x \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial F_L}{\partial h_x} \stackrel{h=\text{const}}{=} \frac{1}{\beta} \frac{\partial f_L}{\partial h}. \quad (5.12)$$

5.4 Analytische Methoden

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

In $d = 1$ Raumdimension können die L Gitterpunkte einfach abgezählt werden, $x \in \{1, \dots, L\}$, und die periodischen Randbedingungen haben $s_{L+1} = s_1$ sowie $s_0 = s_L$ zur Folge. Somit besteht eine Konfiguration aus L bits $\omega = \{s_1, \dots, s_L\}$, und die Zustandssumme (5.7) des Ising-Modells kann explizit berechnet werden:⁵

$$\begin{aligned} Z_L(\beta, h) &= \sum_{\omega} e^{-\beta H(\omega)} \\ &= \sum_{s_1, \dots, s_L} e^{\beta J s_1 s_2 + \beta h(s_1 + s_2)/2} \cdot e^{\beta J s_2 s_3 + \beta h(s_2 + s_3)/2} \cdot \dots \cdot e^{\beta J s_L s_1 + \beta h(s_L + s_1)/2} \\ &= \sum_{s_1, \dots, s_L} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \cdot \dots \cdot T_{s_L s_1} = \text{tr } T^L. \end{aligned} \quad (5.13)$$

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

$$T_{ss'} = e^{\beta J s s' + \beta h(s + s')/2} \quad \implies \quad T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

⁴Hier und im Folgenden bezeichnet $\langle \dots \rangle$ den thermischen Mittelwert mit der Dichte (5.7).

⁵Wir nehmen der Einfachheit halber ein konstantes externes Magnetfeld $h_x = h$ an.

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

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} (\cosh \beta h \pm c) \quad \text{mit} \quad c \equiv \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}}. \quad (5.15)$$

Nach dem Spektralsatz ergibt sich somit

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

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

$$\begin{aligned} f(\beta, h) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{F_L(\beta, h)}{L} = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+ \\ \epsilon(\beta, h) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\langle H \rangle_L(\beta, h)}{L} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \lambda_+. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Die Magnetisierung ist der thermische Mittelwert eines einzelnen Spins, also

$$m = \langle s_x \rangle = \frac{\partial f(\beta, h)}{\partial h} = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}}}. \quad (5.17)$$

Ohne externes Feld ($h = 0$) verschwindet die Magnetisierung m für jede positive Temperatur; lediglich bei Temperatur 0, also $\beta \rightarrow \infty$, verbleibt eine spontane Magnetisierung. Die eindimensionale Ising-Kette hat somit keinen Phasenübergang bei endlichen Temperaturen und demnach eine Curie-Temperatur von $T^* = 0$ (*van Hove-Theorem*).

Am Phasenübergang $T = 0$ ergibt sich eine Magnetisierung von $m = \text{sign}(h = \pm 0)$: Ein infinitesimales externes Feld $h \rightarrow 0$ legt das Vorzeichen der Magnetisierung fest, und diese Magnetisierung bleibt erhalten, auch wenn das externe Feld anschließend adiabatisch abgeschaltet wird (*Hysterese*). Ganz ohne externes Feld wird das Vorzeichen der Magnetisierung hingegen spontan gewählt, wie oben beschrieben. Da die Magnetisierung, also die erste Ableitung des thermodynamischen Potentials $f(\beta, h)$, am Phasenübergang unstetig ist, liegt formal ein Phasenübergang erster Ordnung vor.

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

$$-\beta f(\beta) = \ln \cosh(2\beta J) - 2\beta J + \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \ln \left(1 + \sqrt{1 - \xi^2 \sin^2 \theta} \right) \quad (5.18)$$

wobei wir die Abkürzung

$$\xi \equiv 2 \frac{\tanh(2\beta J)}{\cosh(2\beta J)}. \quad (5.19)$$

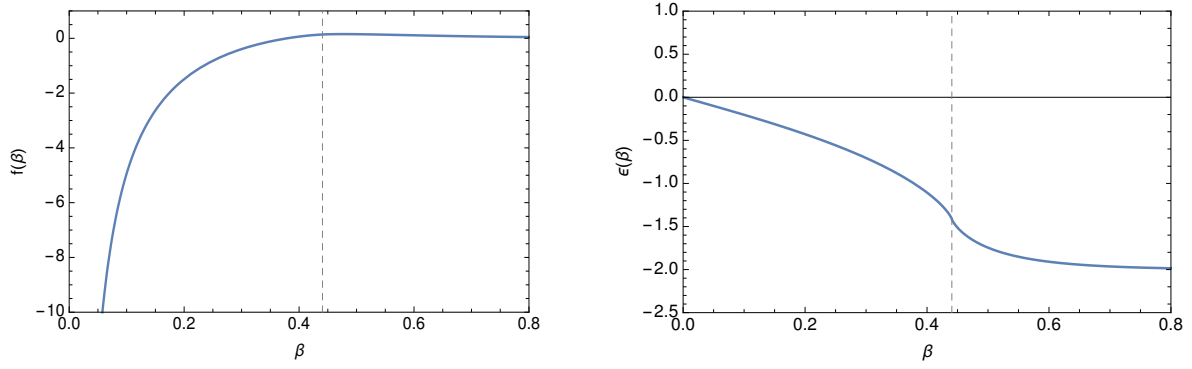


Abbildung 5.2: Freie Energiedichte (links) und innere Energiedichte (rechts) des planaren Ising-Modells ohne externes Feld ($h = 0$).

verwendet haben. Hieraus ergibt sich wie üblich die innere Energiedichte (5.11) zu

$$\epsilon(\beta) = -J \coth(2\beta J) \cdot \left[1 + \{2 \tanh^2(2\beta J) - 1\} \frac{2}{\pi} K(\xi^2) \right], \quad (5.20)$$

mit dem vollständigen elliptische Integral erster Art

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

Dieses Integral hat in einen Verzweigungspunkt bei $\xi = 1$, wobei aber der beidseitige Limes in der Energiedichte (5.20) existiert, d.h. die Energiedichte ist für alle Temperaturen stetig und endlich. Leitet man nochmals nach der Temperatur ab, so findet man jedoch eine Singularität in der *spezifischen Wärme*

$$\frac{c}{k_B} = \frac{1}{k_B} \frac{\partial \epsilon}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial \epsilon}{\partial \beta}. \quad (5.21)$$

Wir haben somit bei $\xi = 1$ einen Phasenübergang zweiter Ordnung von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase. Aus (5.19) folgt für die inverse kritische Temperatur

$$\beta^* J = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.440687 \quad (5.22)$$

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

$$|m(\beta)| = |\langle s \rangle| = \left[1 - \sinh^{-4}(2\beta J) \right]^{\frac{1}{8}}. \quad (5.23)$$

Abbildung 5.2 und 5.3 zeigen Onsagers exakte Lösung des planaren Ising-Modells im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$.

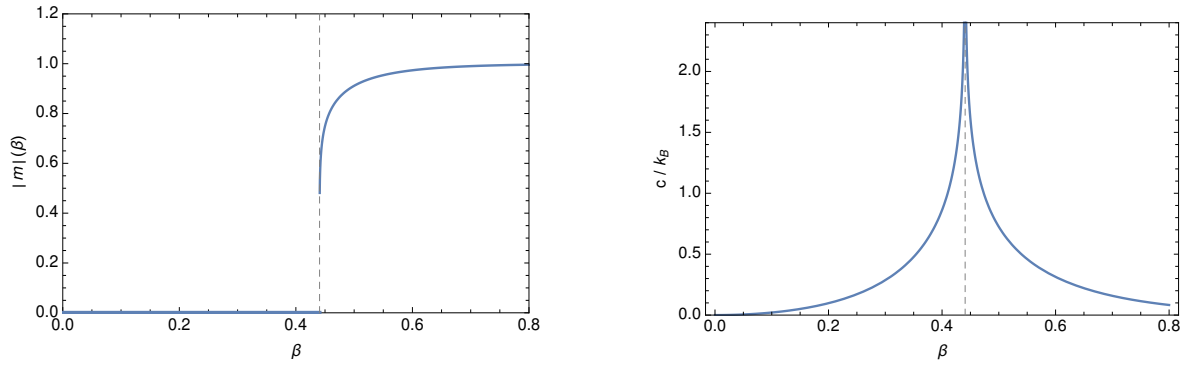


Abbildung 5.3: Spontane Magnetisierung (links) und spezifische Wärme (rechts) des planaren Ising-Modells ohne externes Feld ($h = 0$).

Für Spin-Modelle in $d = 3$ existieren i.a. keine exakten Resultate und man ist auf Näherungsverfahren angewiesen. Neben den systematischen Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen bietet sich in der Nähe des Phasenübergangs die Molekularfeldmethode (*mean field approximation*) an. Hierbei geht man von der Vorstellung aus, daß der einzelne Spin s_x in der Nähe des Phasenübergangs nicht mehr das Feld seiner nächsten Nachbarn individuell sieht, sondern nur ein von allen Nachbarn erzeugtes kollektives Magnetfeld u entsprechend eines mittleren Spins bzw. magnetischen Moments (*Magnetisierung*) $m = \langle s \rangle$. Die Hamiltonfunktion lautet in dieser Näherung also

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

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

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

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

$$m = \tanh(2d\beta J m + \beta h) . \quad (5.24)$$

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

$$\beta^* J = \frac{1}{2d} \quad (\text{mean field}) . \quad (5.25)$$

Eine genauere Analyse [2] ergibt, daß die mean-field-Näherung immer einen Übergang zweiter Ordnung vorhersagt. Für das planare Ising-Modell ist die Curie-Temperatur in MF-Näherung $\beta^* J = 0.25$, was mit dem exakten Wert $\beta^* J = 0.44$ verglichen werden sollte. Die MF-Näherung wird mit zunehmender Zahl d der Raumdimensionen

immer besser, da die Zahl der nächsten Nachbarn zunimmt und somit die Annahme der Wechselwirkung mit einem mittleren Feld immer realistischer wird.⁶

5.5 Monte-Carlo-Simulationen

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

$$\langle G \rangle = \sum_{\omega \in \Omega} G(\omega) P_\beta(\omega) \quad (5.26)$$

als Funktion der Temperatur und des externen Felds, wobei P_β das Gibbs-Maß aus (5.7) ist.

Die Summe in (5.26) enthält 2^L Terme und ist daher – außer für sehr kleine Systemgrößen L – nicht explizit auswertbar, vgl. Aufgabe **A1**. Im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ nimmt der Aufwand exponentiell zu, und man ist daher auf einen besser skalierenden Algorithmus, das sog. *Monte-Carlo-Verfahren*, angewiesen. Hierbei handelt es sich ursprünglich um ein Verfahren zur Berechnung eines hochdimensionalen *Integralmittelwertes*,

$$\langle G \rangle = \int_{\Omega} d^L x G(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}), \quad (5.27)$$

wobei ρ eine normierte Wahrscheinlichkeitsdichte ist. Um den Mittelwert mit möglichst wenig Funktionsauswertungen zu bestimmen, wählt man eine Stichprobe aus N repräsentativ ausgewählten Stellen $\mathbf{x}_i \in \Omega$ und nähert den Integralmittelwert durch das arithmetische Stichprobenmittel an. Grundlage hierfür ist das *MC-Theorem*:⁷

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

$$\langle G \rangle = \int_{\Omega} d^L x G(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) \approx \overline{G} \pm \sigma_G = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N G(\mathbf{x}_i) \pm \sigma_G, \quad (5.28)$$

wobei der Überstrich das arithmetische Stichprobenmittel bezeichnet. Der beste Schätzwert für die statistische Unsicherheit des Mittelwertes ist durch den Standardfehler σ_G gegeben,

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

⁶Für das Ising-Modell in $d = 3$ Raumdimensionen ist aus numerischen Simulationen $\beta^* J = 0.2215$ bekannt, während die MF-Näherung $\beta^* J = 0.1667$ voraussagt.

⁷Die Annahme der Ergodizität bedeutet vereinfacht, daß die Stichprobenauswahl bei $N \rightarrow \infty$ den ganzen Zustandsraum Ω dicht ausfüllt.

```

1 input: inverse temperature  $\beta$ , external field  $h$ ,
2       lattice extensions  $L_i$ , sample size  $N$ 
3
4 allocate spin-lattice  $\omega = \{s_x\}$ 
5 allocate real vectors  $G_1(1, \dots, N)$ ,  $G_2(1, \dots, N)$ 
6
7  $\omega = \text{init}(\beta, h)$  // for later use
8
9 for i=1 to N do
10 {
11    $\omega = \text{draw}(\beta, h)$  // draw from canonical ensemble (5.7)
12    $u = G(\omega)$  // evaluate observable
13    $G_1[i] = u$  // store observable
14    $G_2[i] = u * u$  // and its square
15 }
16  $g = \text{amean}(G_1)$  // arithmetic mean
17  $g_2 = \text{amean}(G_2)$ 
18  $dg = \text{sqrt}((g_2 - g^2)/(N-1))$  // standard error
19
20 output: average  $g$ , standard error  $dg$ 

```

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

Die statistische Unsicherheit des Mittelwertes kommt durch die stochastische Auswahl der Stichprobenpunkte \mathbf{x}_i zustande, also durch die zufällige Wahl einer großen Zahl von Freiheitsgraden. Jeder dieser Freiheitsgrade (z.B. ein einzelner Spin im Ising-Modell) hat einen infinitesimalen Einfluss auf das Gesamtergebnis. Sind die einzelnen Freiheitsgrade und somit die Stichprobenpunkte statistisch unabhängig, so folgt aus dem zentralen Grenzwertsatz, daß die Observable G Gauß-verteilt ist, unabhängig von der zugrundeliegenden Verteilung ρ der Stichprobenauswahl. Dieser Sachverhalt erlaubt dann die Schätzung des Standardfehlers wie oben angegeben.⁸ Es gibt jedoch auch Situationen, in denen die Elemente der Stichprobe aus praktischen oder algorithmischen Gründen nicht ausreichend unabhängig sein können. In diesem Fall liefert die Gauß'sche Fehleranalyse ein falsches (weil viel zu optimistisches) Resultat und alternative Modelle der Fehlerabschätzung wie *bootstrap* oder *jackknife* sind nötig. In jedem Fall konvergiert das MC-Verfahren nur sehr langsam, da der Standardfehler σ_G nur wie $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ verschwindet.

Listing 5.1 formuliert das allgemeine MC-Verfahren für das Ising-Modell als Pseudocode. Der entscheidende Punkt ist offenbar die Implementierung der function `draw()` in Zeile 9, d.h. die zufällige Erzeugung der Spinkonfiguration ω nach der kanonischen Wahrscheinlichkeitsverteilung (5.7). Dies ist i.a. nicht direkt möglich, da alle Spins des Gitters simultan erzeugt werden müssen, und die entsprechende Verteilung (5.7) die verschiedenen Spins koppelt. Stattdessen erzeugt man die notwendigen Konfigurationen der MC-Stichprobe iterativ mit Hilfe von *Markov-Ketten*.

⁸Der *Standardfehler* gibt die statistische Unsicherheit des Mittelwertes einer Stichprobe an und ist daher deutlich kleiner als die *Standardabweichung*, die die Verteilung der zugrundeliegenden Einzelmessungen charakterisiert.

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

$$P(X_{k+1} = \omega \mid X_k = \omega_k, \dots, X_0 = \omega_0) = P(X_{k+1} = \omega \mid X_k = \omega_k). \quad (5.29)$$

Beim mehrfachen Werfen eines idealen Würfels wären sämtliche Zufallsvariablen X_k identisch mit der Gleichverteilung auf $\Omega = \{1, \dots, 6\}$. Insbesondere wäre die Verteilung im k -ten Wurf unabhängig von den Vorgängerresultaten, d.h. der Prozess hätte *kein Gedächtnis*. Im Gegensatz hierzu haben Markov-Prozesse ein (maximal kurzes) Gedächtnis, da die Zukunft X_{k+1} nur von der Gegenwart X_k , aber nicht von der Vergangenheit abhängt. Da X_k selbst wiederum von X_{k-1} abhängt, gibt es dennoch eine indirekte Korrelation zwischen X_{k+1} und X_{k-1} usw. Solche Korrelationen sterben allerdings i.a. sehr schnell aus: Der Prozess „vergisst“ dann die Abhängigkeit von der Anfangsverteilung X_0 und strebt einem Gleichgewichtszustand zu, in dem alle Variablen X_k ($k \gg 1$) dieselbe Verteilung besitzen. Unser Ziel ist es, einen Markov-Prozess so zu steuern, daß die asymptotische Verteilung mit dem Gibbs-Maß (5.7) zusammenfällt.

Ein Markov-Prozess ist offenbar neben der Anfangsverteilung $W(X_0)$ durch die *Übergangswahrscheinlichkeit* $P(X_{k+1} = \omega \mid X_k = \omega')$ im k -ten Schritt charakterisiert. Ist diese Übergangswahrscheinlichkeit in jedem Schritt k identisch, so heisst der Prozess *zeitlich homogen*. Um die Notation weiter zu vereinfachen (und einigen maßtheoretischen Subtilitäten aus dem Weg zu gehen) nehmen wir im Folgenden an, daß der Zustandsraum abzählbar ist, $\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_M\}$.⁹ Die Übergangswahrscheinlichkeit $P(X_{k+1} = \omega_i \mid X_k = \omega_j) = P(\omega_i \leftarrow \omega_j) \equiv P_{ij}$ ist dann eine $M \times M$ -Matrix, und wir schreiben statt der Konfiguration ω_i auch einfach nur i . Für die Wahrscheinlichkeit $P^{(n)}$ des Übergangs $\omega_i \leftarrow \omega_j$ in n Schritten gilt dann $P_{ij}^{(n)} = (P^n)_{ij}$.

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

Die asymptotische Verteilung eines Markov-Prozesses sollte sich durch weitere Markov-Schritte nicht ändern, also $W_i = W(\omega_i) = P_{ij} W_j$. Eine solche Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Ω heisst *stationär*. Es lässt sich unter recht allgemeinen Bedingungen beweisen, dass jeder hinreichend ergodische Markov-Prozess asymptotisch einer stationären Verteilung zustrebt, $W_i = \lim_{n \rightarrow \infty} (P^n)_{ij}$, und zwar für alle j , also unabhängig vom Startzustand.

Die stationäre Verteilung eines Markov-Prozesses ist also durch die Übergangswahrscheinlichkeit direkt bestimmt. Der Vorteil der Verwendung von Markov-Prozessen für das MC-Verfahren besteht nun darin, daß die benötigte Verteilung (5.7) schrittweise durch einfache Übergangsregeln erzeugt werden kann. Diese Regeln sind relativ unkri-

⁹Im Falle des Ising-Modells gibt es $M = 2^L$ mögliche Konfigurationen des Systems aus L Spins.

tisch, da viele Übergangswahrscheinlichkeiten zur selben stationären Verteilung konvergieren. Um nachzuweisen daß ein gegebener Algorithmus zur gewünschten Endverteilung führt, benutzt man fast ausschließlich das folgende *hinreichende* Kriterium:¹⁰

Theorem 2. (detailed balance) Für einen zeitlich homogenen und hinreichend ergodischen Markov-Prozess gelte für die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{ij} = P(\omega_i \leftarrow \omega_j)$ die Relation

$$P_{ki} r_i = P_{ik} r_k \quad \forall i, k \quad (5.30)$$

mit gewissen positiven Zahlen $r_i > 0$. (Keine Summe über i und k !) Dann existiert die Gleichgewichtsverteilung $W_i = W(\omega_i)$ und

$$W_i = \frac{r_i}{\sum_i r_i}. \quad (5.31)$$

Für das Gibbs-Maß (5.7) wählt man insb. $r_i = e^{-\beta H_i}$ und erhält

$$W_i = W(\omega_i) = Z^{-1} e^{-\beta H(\omega_i)} \quad Z = \sum_i e^{-\beta H_i} = \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H(\omega)}. \quad (5.32)$$

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

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

1. Die stationäre Verteilung stellt sich erst asymptotisch ein, d.h. man muss dem eigentlichen Messprozess eine *Thermalisierungsphase* mit $N_t \gg 1$ Markov-Schritten voranstellen, in der der Prozess seine Abhängigkeit von der Anfangsverteilung verliert. Der optimale Wert von N_t hängt vom verwendeten Algorithmus, der Temperatur, der Systemgröße etc. ab. Er muß empirisch bestimmt werden und schwankt typischerweise zwischen $N_t = 50$ und $N_t = 10000$.
2. Nach Thermalisierung sind zwar alle Zufallsvariablen X_k nach der stationären Wahrscheinlichkeit $W_i = W(\omega_i)$ verteilt, allerdings wegen der Markov-typischen Abhängigkeit vom Vorgänger nicht immer statistisch unabhängig. Da solche *Autokorrelationen* exponentiell mit der MC-Zeit (Zahl der Markov-Schritte) zerfallen, muß man also zwischen zwei Messungen einer Observablen eine gewisse Anzahl N_a von Markov-Zwischenschritten einfügen.

¹⁰Der Beweis, daß die angegebene Form von W_i stationär ist, folgt trivialerweise aus

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

```

1  init( $\beta$ ,  $h$ )
2  {
3      initialize spin-lattice  $\omega = \{s_x\}$  with arbitrary values
4      for i=1 to  $N_t$  do
5           $\omega = \text{sweep}(\beta, h)$  // thermalize with  $N_t$  sweeps
6      }
7
8  draw( $\beta$ ,  $h$ )
9  {
10     for a = 1 to  $N_a$  do
11          $\omega = \text{sweep}(\beta, h)$  // destroy autocorrelations
12     return  $\omega$ 
13 }

```

Listing 5.2: Markov-Prozess zur Erzeugung einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

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

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

5.6 Update-Algorithmen

5.6.1 Der Metropolis-Algorithmus

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

$$P_{ij} = P(\omega_i \leftarrow \omega_j) = \begin{cases} \exp \left[-\beta \left(H(\omega_i) - H(\omega_j) \right) \right] & : H(\omega_i) \geq H(\omega_j) \\ 1 & : H(\omega_i) < H(\omega_j) . \end{cases} \quad (5.33)$$

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

Wie oben bereits erwähnt kann der *update* $\omega_i \leftarrow \omega_j$ der gesamten Konfiguration durch sukzessive *updates* jedes einzelnen Spins nach derselben Vorschrift ersetzt werden. Dies gilt generell, da mit P auch $\tilde{P}_{ij} = \sum_k P_{ik}P_{kj}$ eine korrekte Übergangswahrscheinlichkeit ist, d.h. \tilde{P} erfüllt *detailed balance* wenn dies für P gilt und umgekehrt. Man kann also einen gültigen Übergang für das gesamte Gitter immer aus lokalen Updates der einzelnen Spins zusammensetzen. Insbesondere ist es nicht notwendig, alle L^2 Spins des Gitters in einer bestimmten Reihenfolge zu besuchen. Um Korrelationen zu vermeiden wird ein *sweep* oft auch so organisiert, daß L^2 Spins *zufällig* ausgewählt und einem Metropolis-Update unterzogen werden. Hierbei können, dem Zufall folgend, manche Spins mehrfach besucht und andere ausgelassen werden.

Der Metropolis-Algorithmus ist sehr universell, aber auch ineffizient, da er sich nur langsam der stationären Gibbs-Verteilung annähert. Da die Wahrscheinlichkeit für ein Spin-Update — anders als etwa beim Wärmebad-Algorithmus im nächsten Abschnitt — zudem vom aktuellen Wert des Spins abhängt, sind die Konfigurationen des Metropolis-Prozesses stark autokorreliert, was wiederum durch eine große Zahl von Zwischenschritten N_a verringert werden muß.

Zur Verbesserung der Effizienz wendet man daher oft das sog. *multihit*-Verfahren an. Hierbei wird ein ausgewählter Spin sukzessive $N > 1$ Metropolis-Updates unterzogen, wobei der Spin ev. mehrfach hin- und herwechseln kann. Dies ist ein korrektes Verfahren, da die Reihenfolge der Spin-Updates unerheblich ist und man auch N mal denselben Spin besuchen kann. Der Vorteil des *multihit*-Verfahrens besteht darin, daß die Berechnung der Nachbar-Spinsumme, die wiederum in die Energieänderung beim Metropolis-Schritt eingeht, für alle N *multihit*-Updates nur einmal ausgeführt werden muss. Dies ist besonders wichtig für Modelle in denen diese Auswertung der Nachbarsumme aufwändig ist, z.B. weil die Freiheitsgrade kompliziertere Matrizen sind, oder das Gitter komplizierte Randbedingungen hat. Fasst man jeden *multihit sweep* als einen einzelnen Markov-Schritt auf, so ist der Aufwand also geringer als bei N einzelnen Metropolis-Schritten und die Thermalisierungsgeschwindigkeit i.A. höher, so daß ein insgesamt effizienterer Algorithmus entstehen kann – dies muss im Einzelfall aber experimentell geklärt werden.¹¹

In Listing 5.3 ist der *multihit*-Metropolis-Algorithmus zusammengefaßt. Zu beachten ist, daß der Kandidat für ein möglichen Spin-Update *nicht* zufällig gewählt wird, sondern immer nur Spin *flips* vorgeschlagen werden. Dies ist eine Optimierung gegenüber dem allgemeinen Verfahren, da ein trivialer Spin-Update immer akzeptiert würde, aber die Konfiguration auch nicht ändert. Der Effekt ist also so als wäre der triviale Update niemals vorgeschlagen worden, weshalb man ihn auch einfach weglassen kann.

Der Metropolis-Algorithmus hat heute keine praktische Bedeutung mit Ausnahme der folgenden Anwendung: Liegt ein Markov-Prozess mit einer Übergangswahrscheinlichkeit Q_{ij} vor, die *nicht* zur gewünschten stationären Verteilung führt, so kann dieser Algorithmus durch einen nachgeschalteten Metropolis-Schritt angepasst bzw. korrigiert werden. Der Gesamtalgorithmus ergibt die richtige stationäre Verteilung, und die Akzeptanzrate des zusätzlichen Metropolis-Schrittes ist umso höher, je „näher“ die Ausgangsverteilung Q_{ij} an der gewünschten Zielverteilung P_{ij} liegt.

¹¹Die optimale Wahl des *multihit*-Parameters hängt i.a. von der Temperatur ab, vgl. Aufgabe A3.

```

1  sweep( $\beta$ , h)
2  {
3    for all spins s in the lattice do
4    {
5      dH = change(s, -s)           // energy change due to spin flip
6      for t=1 to  $N_{\text{try}}$            // multihits
7      {
8        if (dH < 0)
9          s = -s                   // accept update
10       else
11       {
12         r = uniform(0,1)         // uniformly distributed number
13         if r < exp(- $\beta$  dH)
14           s = -s                 // accept increase in energy
15         else
16           pass                   // reject: keep old spin s
17       }
18     }
19   }
20 }

```

Listing 5.3: *multihit* Metropolis-Algorithmus

5.6.2 Der Wärmebad-Algorithmus

Hierbei handelt es sich formal um den $N \rightarrow \infty$ Limit des N -hit Metropolis-Algorithmus. Jeder Spin im Gitter wird so gewählt, dass er im thermodynamischen Gleichgewicht mit seinen nächsten Nachbarn ist:

$$\begin{aligned}
 P_{ij} &= Z^{-1} \exp(-\beta H(\omega_i)) && \text{unabhängig von } j \\
 Z &= \sum_{\omega_k} \exp(-\beta H(\omega_k)).
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

Da der *update* also gar nicht vom vorherigen Wert eines Spins abhängt, hat dieser Algorithmus viel geringere Autokorrelationen und thermalisiert wesentlich schneller als *Metropolis*. Er ist jedoch weniger universell, und die lokale *update*-Regel muss für jede Hamiltonfunktion individuell gefunden werden, sofern eine analytische Formel und eine effiziente Implementierung überhaupt existieren, was nicht selbstverständlich ist. (Ggf. kann auch ein approximativer Wärmebad-Algorithmus durch einen nachgeschalteten Metropolis-Schritt angepasst werden.) Für den Fall des Ising-Modells lässt sich ein Wärmebad-Algorithmus jedoch leicht finden, cf. Listing 5.4.


```
1 sweep( $\beta$ , h)
2 {
3   for all spins  $s_x$  in the lattice do
4     {
5       delta = sum of  $2d$  nearest neighbouring spins of  $s_x$ 
6        $k = \beta$  (delta + h)
7        $z = 2 \cosh(k)$ 
8        $q = \exp(k) / z$ 
9        $r = \text{uniform}(0, 1)$ 
10      if ( $r < q$ )  $s_x = 1$  else  $s_x = -1$ 
11    }
12 }
```

Listing 5.4: Wärmebad-Algorithmus für das Ising-Modell ($J = 1$).

5.7 Aufgaben

Aufgabe 1:

- a. Berechnen Sie π nach dem MC-Verfahren durch gleichverteilte Stichprobenpunkte (x, y) im Einheitsquadrat.
- b. Implementieren Sie einen Generator für eine normalverteilte reelle Zufallszahl mit Mittelwert μ und Breite σ . Berechnen Sie hiermit

$$I = (2\pi)^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \cos t \exp(-t^2/2)$$

durch MC-Integration, und vergleichen Sie mit dem exakten Resultat $I = e^{-\frac{1}{2}} \approx 0.606531$.

Aufgabe 2:

Betrachten Sie das Ising-Modell in $d = 2$ Dimensionen mit verschwindendem externen Feld $h = 0$ und periodischen Randbedingungen auf einem $(L \times L)$ -Gitter. Berechnen Sie die innere Energiedichte $\epsilon = \langle H \rangle / L^2$ sowie die Magnetisierung $\langle m \rangle$ und $\langle |m| \rangle$ als Funktion der inversen Temperatur $\beta \in [0, 1]$ durch direkte Summe über alle Konfigurationen, vgl. (5.26). Verwenden Sie Gitter der Größe $L = 2, 3, 4$. Vergleichen Sie die Resultate mit den analytischen Vorhersagen in Abschnitt 5.4.

Aufgabe 3:

- a. Implementieren Sie den *multihit* Metropolis-Algorithmus für das planare Ising-Modell und berechnen Sie innere Energiedichte, Magnetisierung und spezifische Wärme als Funktion der Temperatur bei $h = 0$. Arbeiten Sie mit einem Gitter der Größe 128×128 und bestimmen Sie die optimalen Thermalisierungszeiten und *multihit*-Parameter.
- b. Wählen Sie jetzt $\beta = 0.4406868$ und bestimmen Sie Energiedichte, $\langle |m| \rangle$ und $\langle m^2 \rangle$ mit jeweils 200000 *sweeps* auf Gittern der Größe (4×4) , (8×8) und (32×32) . Vergleichen Sie die (4×4) - Resultate mit den exakten Vorhersagen aus Abschnitt 5.4

Aufgabe 4:

- a. Wiederholen Sie Aufgabe **A3** mit Hilfe des Wärmebad-Algorithmus.
- b. Wählen Sie β in der ferromagnetischen Phase und starten Sie mit einem äußeren Magnetfeld h . Reduzieren Sie h schrittweise auf $h = 0$ bei konstantem β und wiederholen Sie diese Prozedur für beide Vorzeichen von h . Kann bei $h \rightarrow 0$ Hysterese beobachtet werden?
- c. Bestimmen Sie die Magnetisierung $\langle m \rangle$ und $\langle |m| \rangle$ als Funktion von Temperatur β sowie externem Feld h und geben Sie das Phasendiagramm als 3D-Plot aus.

5.8 Literatur

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