

Untersuchung des Ising Models mit Hilfe von Monte Carlo Methoden

Jenish Adhikari

März 2024

Bachelorarbeit in Physik angefertigt im
Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik
vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität
Bonn

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, 13.03.2024
Datum

.....
Unterschrift

1. Gutachter*in: Prof. Dr. Carsten Urbach
2. Gutachter*in: Prof. Dr. Thomas Luu

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	3
2. Theorie	4
2.1. Ising Modell	4
2.2. Phasenübergänge	5
2.2.1. Phasenübergang zweiter Ordnung	5
2.3. Kritische Phänomene	5
2.3.1. Korrelationsfunktion	5
2.3.2. Kritische Exponenten	5
2.3.3. Universalität und Skalengesetz	6
2.4. Finite Size Scaling Ansatz	7
2.5. Binder-Kumulante	7
2.6. Monte Carlo	8
2.6.1. Markov Kette	8
2.6.2. Metropolis Algorithmus	9
3. Simulation und Daten Analyse	11
3.1. Simulation	11
3.2. Autokorrelation	11
3.3. Daten „Blocking“	12
3.4. Kritische Verlangsamung	12
3.5. Observable und Unsicherheit	13
4. Daten Auswertung	14
4.1. Bestimmung der Stationarität der Markov-Kette	14
4.2. Bestimmung der Blocklänge	15
4.3. Bestimmung der „Bootstrap“-Anzahl	16
4.4. Verhalten des Ordnungsparameters (Magnetisierung)	16
4.5. Bestimmung der kritischen Temperatur	17
4.6. Berechnung kritischer Exponenten	17
4.6.1. Berechnung von ν	18
4.6.2. Berechnung von β	19
4.6.3. Berechnung von γ	20
4.6.4. Berechnung von α	20
4.7. Ergebnisse und Fehler Diskussion	20
5. Fazit	22

A. Anhang	24
A.1. Abbildungen	24

1. Einleitung

„Quantum physics thus reveals a basic oneness of the universe,“ Erwin Schrödinger [9]. Alle physikalische Vorgänge lassen sich mithilfe Quantenmechanik erklären. Diese Vorgänge werden durch Wechselwirkung von vielen Teilchen hervorgerufen. Doch man gelangt sehr schnell an eine Grenze, wenn man das System analytisch lösen will. Eine Alternative bietet die statistische Quantenmechanik, bei der nicht einzelne Teilchen wechselwirken, sondern das gesamte System als statistischer Vorgang untersucht wird. Jedoch sind einige Vorgänge in der Natur nur näherungsweise, bis gar nicht analytisch lösbar. In diesem Fall bietet die numerische Lösung bzw. Simulation eine sehr gute Alternative.

Das Ising-Modell ist ein einfaches Modell, das einen Phasenübergang aufweist. Diese Arbeit dient als eine Einführung in der Simulation und fortgeschrittenen Methoden der Daten-Analyse. Dabei werden mittels Markov-Kette Monte Carlo (MCMC) [6] Zustände im thermischen Gleichgewicht generiert und kritische Phänomene im Ising-Modell untersucht. Für die Bestimmung von der kritischen Temperatur und Exponenten wird die Binder-Kumulante mit dem „Finite-Size-Scaling“ Ansatz [11] verwendet. Als Ausgangspunkt dient das 2D-Ising-Modell, welches einen Phasenübergang zeigt und bereits analytisch gelöst wurde.

2. Theorie

2.1. Ising Modell

Das nach Ernst Ising benannte Modell des Hamiltones [5] ist ein spezieller Fall dem Heisenberg-Modell, Gl. 2.1 [10]. Wobei g_J der Landé Faktor, μ_B das Bohr'sche Magneton, B_0 ein homogenes Magnetfeld, $\hat{\mathbf{J}}_{ij}$ die Austauschintegrale, \mathbf{J}_i der Drehimpulsoperator ist.

$$H = - \sum_{i,j} \hat{\mathbf{J}}_{ij} \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{J}_j + g_J \mu_B \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{B}_0 \quad (2.1)$$

Zerlegt man das Produkt der Drehimpulsoperatoren $\mathbf{J}_i \cdot \mathbf{J}_j$ mit einem Gewichtungsfaktor, erhält man folgende Relation:

$$\mathbf{J}_i \cdot \mathbf{J}_j \longrightarrow \alpha J_i^x J_j^x + \beta J_i^y J_j^y + \gamma J_i^z J_j^z$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 1 : \text{Heisenberg-Modell,}$$

$$\alpha = \beta = 1; \gamma = 0 : \text{XY-Modell,}$$

$$\alpha = \beta = 0; \gamma = 1 : \text{Ising-Modell.}$$

Mit $J_{ij} = J/2$ wird ein Ferromagnet realisiert. Betrachtet man den Fall $B_0 = 0$ in einem kanonischen Ensemble, interessiert man sich für die spontane Magnetisierung bzw. die spontane Symmetriebrechung des Spin-Systems im thermischen Gleichgewicht. Der Dichteoperator hat die Form der Boltzmannverteilung¹,

$$p(E) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad (2.2)$$

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2.3)$$

$$p(E) = \frac{1}{Z} e^{\frac{\beta J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j} \quad (2.4)$$

wobei Z die Zustandssumme, σ der Spin in Z-Richtung, $\langle i, j \rangle$ die Summe über die Nachbaratome ist [10].

¹Es wird natürliche Einheit $\hbar = k_B = 1$ verwendet

2.2. Phasenübergänge

2.2.1. Phasenübergang zweiter Ordnung

Als Phase bezeichnet man eine mögliche Zustandsform eines makroskopischen Systems im thermischen Gleichgewicht [10]. Als Phasenübergang n-ter Ordnung versteht man die (n-1)-te stetige Ableitung der freien Enthalpie G nach ihren natürlichen Variablen (T , p , B_0 , usw.), während mindesten eine n-te Ableitung Unstetigkeit aufweist. Das Ising-Modell zeigt einen Phasenübergang zweiter Ordnung bezüglich Wärmekapazität, Suszeptibilität. Dabei ist die Magnetisierung der Ordnungsparameter, d.h. ab einer kritischen Temperatur T_c gewinnt das System spontane Magnetisierung ohne äußeres Magnetfeld. Dieser Vorgang wird auch als spontane Symmetriebrechung bezeichnet. Da unterhalb der kritischen Temperatur Rotationsinvarianz nicht mehr erfüllt wird [10].

2.3. Kritische Phänomene

Als kritische Phänomene versteht man thermodynamische Eigenschaften von Systemen nahe der kritischen Temperatur. Dabei ist der Ordnungsparameter die interessante Größe.

2.3.1. Korrelationsfunktion

In dem Ising-Modell ist die Korrelationsfunktion definiert als [10],

$$g_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle. \quad (2.5)$$

Betrachtet man jedoch die Korrelationsfunktion im Kontinuum, hat sie „Ornstein-Zernike Form“ [8]

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = c_0 \frac{\exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\xi(T))}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.6)$$

Wobei $\xi(T)$ die Korrelationslänge ist. Die Korrelationslänge ist einer der wichtigsten Größen im Bereich des Phasenübergangs [10].

$$\xi(T) \xrightarrow{T \rightarrow T_c} \infty \quad (2.7)$$

2.3.2. Kritische Exponenten

Eine physikalische Eigenschaft F hängt von der reduzierten Temperatur t in folgender Form ab [10]

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}$$

$$F(t) \sim t^\phi (1 + bt^x + O(x)) ; \quad x > 0 \quad (2.8)$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} F(t) \sim t^\phi \quad (2.9)$$

Die Zahl ϕ ist im kritischen Bereich zu bestimmen und wird als kritischer Exponent genannt. Man muss beachten, von welcher Seite man sich dem kritischen Punkt nähert². In dem Limes $t \rightarrow 0$ kann jede thermodynamische Größe in einen „Regulär“ und „Singulär“ Teil zerlegt werden. Die Gl. 2.9 repräsentiert den „Singulär-Teil“, mit Divergenz oder divergierender Ableitung, und erfüllt folgende Potenzgesetze³ [8]:

$$\text{Wärmekapazität: } C \sim |t|^{-\alpha} \quad (2.10)$$

$$\text{Ordnungsparameter: } M \sim |t|^\beta \quad (2.11)$$

$$\text{Suszeptibilität: } \chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (2.12)$$

$$\text{Korrelationslänge: } \xi \sim |t|^{-\nu} \quad (2.13)$$

2.3.3. Universalität und Skalengesetz

Die Werte dieser kritischen Exponenten ist von Interesse, weil man sie sowohl experimentell als auch theoretisch nach Gl. 2.14 bestimmen kann [10]. Die kritischen Exponenten sind besonders von Interesse wegen der **Universalität** physikalischer Eigenschaften beim Phasenübergang. D.h. sie hängen nicht von der Art und Wechselwirkung des Systems ab, sondern nur von [10]:

1. der Dimension d des Systems
2. Reichweite der Teilchenwechselwirkung
3. der Spindimensionalität n .

$$\phi = \lim_{t^+ \rightarrow 0} \frac{\ln|F(t)|}{\ln(t)} \quad (2.14)$$

$$\phi' = \lim_{t^- \rightarrow 0} \frac{\ln|F(t)|}{\ln(-t)} \quad (2.15)$$

„Die Universalitätshypothese hat sich bewährt und gilt nach der Entwicklung der nobelpriesgewürdigten Renormierungstheorie von K. Wilson praktisch als bewiesen“ Wolfgang Nolting [10]. Z.B. in der Literatur findet man für γ : 1,37 Reales Gas, 1,33 Magnet (exp.), 1,24 Ising-Modell ($d = 3$, approx.), 1,39 Heisenberg-Modell ($d = 3$, approx.). Wie man sehen kann, stimmen die Werte näherungsweise Miteinander Recht gut überein.

Hat eine dimensionbehaftete Größe einen Wert in einer Norm, verändert sich dieser Wert, wenn die Norm verändert wird. Dahingegen bleibt eine dimensionslose Größe invariant unter einer Norm Veränderung. In kritischen Bereich ist nur die Korrelationslänge eine charakteristische Länge und jede Länge soll bezüglich der Korrelationslänge gemessen werden [8]. Wegen des Skalengesetzes sind nur zwei von sechs kritischen Exponenten unabhängig voneinander, es

²Siehe [10] Seite 302 für mehr.

³Hier β ist kritischer Exponent und nicht inverse Temperatur

gilt [8]:

$$\text{Fischer: } \gamma = \nu(2 - \eta) \quad (2.16)$$

$$\text{Ruschbrooke: } \alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (2.17)$$

$$\text{Widom: } \gamma = \beta(\delta - 1) \quad (2.18)$$

$$\text{Josephson: } \nu d = 2 - \alpha \quad (2.19)$$

$$(2.20)$$

2.4. Finite Size Scaling Ansatz

Weist ein unendlich-großes System $L \rightarrow \infty$ für einen Parameter ρ ein Phasenübergang bei einem kritischen Wert ρ_c mit divergierender Korrelationslänge $\xi \sim |\rho - \rho_c|^{-\nu}$ für $\rho \rightarrow \rho_c$ auf, kann folgender Ansatz genutzt werden [11][10],

$$A_\infty(\rho) \sim |\rho - \rho_c|^{-\zeta} \quad (2.21)$$

$$\xi^{\frac{-1}{\nu}} \sim |\rho - \rho_c| \quad (2.22)$$

$$A_\infty(\rho) \sim \xi^{\frac{\zeta}{\nu}} \quad (2.23)$$

für $L \ll \xi$, übernimmt die Systemlänge L als Obergrenze für die Korrelationslänge

$$A_L(\rho) \sim L^{\frac{\zeta}{\nu}} \quad (2.24)$$

$$A_L(\rho) = L^{\frac{\zeta}{\nu}} \tilde{f}(L^{\frac{1}{\nu}}(\rho - \rho_c)) \quad (2.25)$$

$$A_L(\rho) = L^{\frac{\zeta}{\nu}} \tilde{f}(0) \text{ für } \rho \rightarrow \rho_c \quad (2.26)$$

Aus dieser Beziehung kann man sehen, dass die Funktion im kritischen Punkt nur noch von der Systemlänge L abhängt [4][11].

2.5. Binder-Kumulante

Laut K. Binder[3] skaliert höheres Moment mit $U_L \sim L^{-d}$. Für $T < T_C$ konvergiert die Binder-Kumulante Gl. 2.27 nach 2/3 und für $T > T_C$ gegen null für ein hinreichend großes System.

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle |m|^4 \rangle_L}{2 \langle |m|^2 \rangle_L^2} \quad (2.27)$$

Die Binder-Kumulante weist keine Unstetigkeit auf, deswegen lässt sie sich in Taylorreihe bei der kritischen Temperatur entwickeln:

$$U_L(T) = U_L(T_C) + \frac{dU_L(T)}{dT} \Big|_{T_C} (T - T_C) + O(T^2) \quad (2.28)$$

Andererseits lässt sich die Binder Kumulante mit Gl. 2.25 im Punkt $T = T_C$ folgendermaßen umformen,

$$U_L(T) = L^{\frac{\zeta}{\nu}} \tilde{f}(L^{\frac{1}{\nu}}(\rho - \rho_c)) = L^{\frac{\zeta}{\nu}} \tilde{f}(0) + L^{\frac{\zeta}{\nu}} \tilde{f}'(0) L^{\frac{1}{\nu}} (T - T_C) + O(T^2) \quad (2.29)$$

2.6. Monte Carlo

Als Monte Carlo versteht man in den Naturwissenschaften, Informatik, Mathematik usw. ein allgemeines Verfahren, um ein Problem mithilfe einer aus Zufallszahlen generierte Wahrscheinlichkeit zu lösen. Es wird die Aussage des zentralen Grenzwertsatzes [6] genutzt und aus einer Verteilung Stichprobe gezogen. Für N Monte-Carlo Schritte, mit $N \rightarrow \infty$ realisiert dieser stochastische Prozess die wahre Verteilung. Es gibt viele Methoden bzw. Algorithmen, um ein Problem zu lösen, z.B. werden Integrale mithilfe von „Accept-Reject“ Methode geschätzt. Diese Arbeit nutzt das Markov-Chain Monte-Carlo (MCMC) [6] verfahren, um die Zustände bzw. Boltzmann-Verteilung im thermischen Gleichgewicht zu finden.

2.6.1. Markov Kette

⁴ Ein stochastischer Prozess ist eine Markov-Kette $(X_n)_{n \geq 0}$ mit Anfang Verteilung f und einer Übergangsmatrix P , falls

1. X_0 hat die Verteilung f
2. für $n \geq 0$, gegeben $X_n = \mu$, X_{n+1} hat die Verteilung $(p_{\mu\nu} : \nu \in \Omega)$ und ist unabhängig von X_0, \dots, X_{n-1} .

Dabei ist μ und ν ein Zustand im Ereignis-Raum Ω und die Übergangsmatrix P eine lineare Abbildung von dem Zustand der Verteilung auf sich selbst. Die zweite Bedingung ist für diese Arbeit sehr wichtig, denn sie besagt, dass das n -te Glied der Kette unabhängig von allen vorherigen Gliedern außer dem $(n - 1)$ -ten ist. In anderen Worten kann man jedes zweite Glied der Kette als eine Stichprobe aus einer Verteilung f betrachten.

Eine weitere Eigenschaft der Markov-Kette ist, dass jeder beliebige Zustand im Ereignisraum Ω mit einer nicht verschwindenden Wahrscheinlichkeit von einem Anfangs-zustand erreicht werden kann. μ „kommuniziert“ mit ν , wenn $\mu \rightarrow \nu$ und $\nu \rightarrow \mu$ fuer $n \geq 0$, dabei ist n die Anzahl der Schritte. Sei $C \subseteq \Omega$, falls für alle $\mu, \nu \in C$ kommuniziert, heit C irreduzibel. Wenn der gesamte Ereignisraum Ω irreduzibel ist, so heißt die Übergangsmatrix P irreduzibel. Eine Markov-Kette kann unendlich lang sein, da die Kette ein Zustand mit einer Wahrscheinlichkeit einnehmen soll, soll dieser Zustand unendlich oft besucht werden. Ein Zustand μ heißt wiederkehrend (Rekurrent), falls

$$\mathcal{P}_\mu(X_n = \mu \text{ für unendlich viel } n) = 1 \quad (2.30)$$

Fängt eine Kette mit Anfangszustand $X_0 = \mu$ an, ist τ_μ die Zeit bis der Zustand μ wieder erreicht wird. Eine Rekurrent-Kette mit endlicher zurückkehrenden Zeit heißt Positiv-Rekurrent.

$$\tau_\mu = \inf(n \geq 1 : X_n = \mu | X_0 = \mu) \quad (2.31)$$

⁴Hier wird auf alle Beweise verzichtet. Siehe [6] für die Beweise und detaillierte Erklärungen.

Dieser Abschnitt wurde aus dem Computational Physics-Skript [6] entnommen und verzichtet auf einzelnen Literatur-Zitate

Für eine lange Markov-Kette kann man im stochastischen Limes π_μ , die Zeit welche die Kette in einem Zustand μ verbringt über Gl. 2.32 definieren. Falls der Grenzwert existiert, kann man diese Zeit mit Gl. 2.34 im stochastischen Sinne berechnen.

$$\pi_\mu := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n \mathbb{1}_{(X_m=\mu|X_0=\nu)} \quad (2.32)$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n \mathcal{P}(X_m = \mu | X_0 = \nu) \quad (2.33)$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n p_{\mu\nu}^{(m)} \quad (2.34)$$

Falls π_μ für alle $\mu \in \Omega$ unabhängig vom Anfangszustand ν mit $\sum_\mu \pi_\mu = 1$ existiert, heißt $\pi = (\pi_{\mu_0}, \pi_{\mu_1}, \dots)$ stationäre Verteilung. Soll die Verteilung π eine invariante Verteilung von P sein, muss immer $\pi = \pi P$ gelten. Dies kann man mit dem sogenannten detaillierten Gleichgewicht sicher stellen. Es gilt für alle μ und ν

$$\pi_\nu P_{\nu\mu} = \pi_\mu P_{\mu\nu} \quad (2.35)$$

Ist eine irreduzible Markov-Kette mit π invariante Verteilung von Übergangsmatrix P , dann ist sie Positiv-Rekurrent und π eine eindeutige invariante Verteilung von P . Ein Zustand μ heißt aperiodisch, falls $p_{\mu\mu}^{(n)} > 0$ für genügend großes n gilt. Wenn ein Zustand einer irreduziblen Übergangsmatrix P aperiodisch ist, sind alle Zustände aperiodisch. Somit ist P irreduzible und aperiodisch.

2.6.2. Metropolis Algorithmus

⁵ Ein MCMC ist ein allgemeines Verfahren, um eine irreduzible und aperiodische Markov-Kette mit einer stationären Verteilung π zu generieren. Dazu wird der sogenannte Metropolis-Algorithmus, eine vereinfachte Version des Metropolis-Hastings-Algorithmus, benutzt. In Abb. 2.1 ist Metropolis-Hastings Algorithmus zu sehen, dabei sind x und y Zustände und $q(x|y)$ ist die Verteilungsdichte. Aus der Verteilung q wird ein Kettenglied vorgeschlagen und mit der Wahrscheinlichkeit $\rho(x_n, Y_n)$ akzeptiert. Wird folgende Bedingung erfüllt,

$$\sup(f) \subset \bigcup_{x \in \sup(f)} \sup(q(., x)), \quad (2.36)$$

werden alle Zustände durch die Kette besucht.

Es soll durch MCMC die Verteilung in Gl. 2.37 simuliert werden. Da es für N Atome 2^N mögliche Zustände gibt, wird für ein großes System die Zustandssumme Z praktisch nicht numerisch bestimmbar. Im Gleichgewicht ist die Wahrscheinlichkeit den Anfangszustand μ aus allen Zuständen ν zu erhalten gleich der Wahrscheinlichkeit alle Zustände ν aus dem Anfangszustand μ

⁵Dieser Abschnitt wurde aus dem Computational Physics-Skript [6] entnommen und verzichtet auf einzelnen Literatur-Zitate.

Algorithm 7.1.1 METROPOLIS-HASTINGS algorithm

- 1: generate proposal $Y_n \sim q(y | x_n)$
2: $X_{n+1} = \begin{cases} Y_n & \text{with probability } \rho(x_n, Y_n) \\ x_n & \text{with probability } 1 - \rho(x_n, Y_n) \end{cases}$ with

$$\rho(x, y) = \min \left\{ \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \frac{q(x | y)}{q(y | x)}, 1 \right\} .$$

Abbildung 2.1.: Metropolis-Hastings Algorithmus [6]

zu erhalten. Im detaillierten Gleichgewicht bekommt man daraus die Gl. 2.39

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu} \quad (2.37)$$

$$\sum_\nu p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_\nu p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.38)$$

$$\implies \frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (2.39)$$

Das Detaillierte Gleichgewicht wird folgender Maßen sichergestellt,

1. Fall: $E_\nu < E_\mu : P(\mu \rightarrow \nu) = 1$
2. Fall: $E_\nu > E_\mu : P(\nu \rightarrow \mu) = 1$ und $P(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$

3. Simulation und Daten Analyse

3.1. Simulation

Mit dieser theoretischen Kenntnis kann man nun mit der Simulation anfangen. In einem d -dimensionalen Ising-Modell interagieren Nachbaratome, dies führt zur besonderen Behandlung der Interaktion am Rand. Es ist wichtig eine geeignete Randbedingung zu nehmen, denn die Binder-Kumulante hängt zusätzlich von der Randbedingung [1] ab. Diese Arbeit nutzt eine periodische Randbedingung. Im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ ist der Effekt der periodischen Randbedingung vernachlässigbar. Wie in Abs. 2.6 beschrieben, kann als Ausgangszustand jede beliebige Zustand genommen werden. Einfachheitshalber wird der Zustand mit allen Spins in die gleiche Richtung ($\sigma_i = 1$) genommen. Die Simulation wird mittels Algo. 1 durchgeführt, wobei \mathcal{R} eine gleichmäßig verteilte Zufallszahl Abb. A.4 ist. Bei dieser Arbeit verwendeten Source-Code für die Simulation und Datenauswertung sind in GitHub [2] zu finden.

Algorithm 1 Metropolis-Algorithmus

Initialisierung des Anfangszustand

while Sweeps $\leq N$ **do** :

 Schlägt für jeden Spin einen Spin-Flip vor

if $dE \leq 0$ or $\mathcal{R} < e^{-\beta dE}$ **then** $\triangleright \mathcal{R} \in \mathcal{U}[0, 1]$

 Spin-Flip

3.2. Autokorrelation

[1] Mithilfe des oben genannten Algorithmus wird die Markov-Kette simuliert. Da die einzelnen Glieder der Kette jeweils von ihren Vorgänge abhängen, pflanzt sich die Abhängigkeit fort. Man kann jedes Kettenglied als eine stochastische Zufallsvariable mit zeitlicher Korrelation $\{X_t : t \in T\}$ betrachten. Die Autokorrelation, Korrelation mit sich selbst, ist in Gl. 3.1 definiert und in Gl. 3.2 normalisiert.

$$C_X(t) := \langle (X_i - \mu)(X_{i+t} - \mu) \rangle \quad (3.1)$$

$$\Gamma_X(t) := \frac{C_X(t)}{C_X(0)} \quad (3.2)$$

Dabei ist μ der Mittelwert. Die Autokorrelation ist unabhängig von i und hängt nur von dem zeitlichen Unterschied ab. Die Autokorrelation fällt exponentiell Gl. 3.3 ab. Für genügend große

¹Dieser Abschnitt wurde aus dem Computational Physics-Skript [6] entnommen und verzichtet auf einzelnen Literatur-Zitate.

$|t|$ ist nur die 0-te Ordnung von Bedeutung.

$$C_X(t) \propto \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{-\frac{|t|}{\tau_n}} \quad (3.3)$$

3.3. Daten „Blocking“

²Eine physikalische Messung $\langle O \rangle$ ist ein statistisches Ensemble von reinen Zufallsvariablen, d.h. ohne Autokorrelation. Man kann die exponentielle Autokorrelationszeit mit Gl. 3.4 berechnen und jede Messung nach Zeit τ_{exp} betrachten.

$$\tau_{\text{exp}} = \limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{-\ln |\Gamma_X(t)|} \quad (3.4)$$

Eine Alternative bietet das sogenannte „Daten-Blocking“. Hier werden die gesamten Daten (Markov-Kette) N in kleine Teile (Block) mit Blocklänge l geteilt. Es wird durch Gl. 3.5 eine neue Zufallsvariable $x_1^B, \dots, x_{N^B}^B$ ohne Autokorrelation generiert.

$$x_i^B = \frac{1}{l} \sum_{k=1}^l x_{(i-1) \cdot l + k} \quad (3.5)$$

3.4. Kritische Verlangsamung

³Aus Abs. 2.3.1 Gl. 2.7 ist bekannt, dass die Korrelationslänge im kritischen Bereich divergiert. Wegen der endlichen Systemgröße in der Simulation kann die Korrelationslänge nicht divergieren, wird jedoch größer, je weiter sich das System dem kritischen Punkt annähert. Da der Metropolis-Algorithmus die Zustände durch eine lokale Aktualisierung produziert, stellt sich die Frage der Algorithmi'schen Effizienz und die Abhängigkeit mit der Korrelationslänge. Die Algorithmi'sche Effizienz soll als ein Maß für die Fähigkeit eines Algorithmus, unabhängige Zustände zu generieren verstanden werden^[6]. Nach ^[6] ist die Algorithmi'sche Effizienz E definiert als

$$E := \frac{C}{\tau_{\text{int}}}, \quad (3.6)$$

wobei C der Rechenaufwand pro Aktualisierungsschritt und $\tau_{\text{int}} \approx \tau_{\text{exp}}$ ^[6] ist. Tatsächlich besteht eine Abhängigkeit der Korrelationslänge und Autokorrelation gemäß Gl. 3.7, wobei $z \geq 0$ von dem verwendeten Algorithmus abhängt. In endlichem Volumen V^d wird z mit Gl. 3.8 berechnet. Dieses Phänomen wird als kritische Verlangsamung bezeichnet.

$$\tau_{\text{int}} \approx \xi^z \quad (3.7)$$

$$\tau_{\text{int}} \approx L^{d+z} \quad (3.8)$$

²Dieser Abschnitt wurde aus dem Computational Physics-Skript ^[6] entnommen und verzichtet auf einzelnen Literatur-Zitate.

³Dieser Abschnitt wurde aus dem Computational Physics-Skript ^[6] entnommen und verzichtet auf einzelnen Literatur-Zitate.

In dieser Arbeit wird der Wert von z nicht explizit ausgerechnet. Wegen der kritischen Verlangsamung sollen in dieser Arbeit die relevanten Größen z.B. Autokorrelation, Stationarität der Markov-Kette in dem kritischen Punkt ermittelt werden.

3.5. Observable und Unsicherheit

⁴ Eine physikalische Messgröße wird in Quantenmechanik als eine Observable bezeichnet. Die direkten Observablen des Ising-Modells sind die Magnetisierung Gl. 3.9 und die Energie Gl. 2.3. Nach Burn-In Phase Abs. 4.1 werden die Daten aufgenommen, daraus wird ein Schätzer der Observable $\hat{\theta}$ durch 3.10 berechnet.

Natürlich hat jede Messung eine statistische Unsicherheit bzw. Fehler. Ist die Berechnung des Schätzers rechenintensiv, kann man die Methode des „Bootstrap“ für die Berechnung der Standardabweichung Gl. 3.11-3.12 anwenden. Dabei werden aus gegebenen Daten zufällig neue Daten herausgezogen. Bei der Methode des „Bootstrap“ sollte man darauf achten, dass der Mittelwert des Schätzers normalverteilt ist. Wegen des zentralen Grenzwertsatzes [6] muss R genügend groß sein. Die Fehler von abgeleiteten Größen werden mit der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung berechnet.

$$\langle |m| \rangle = \frac{\langle |M| \rangle}{V} = \frac{1}{V} \left| \sum_{i=1}^N \sigma_i \right| \quad (3.9)$$

$$\langle \theta \rangle \approx \hat{\theta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \theta_i \quad (3.10)$$

$$\bar{\theta}^* = \frac{1}{R} \sum_{b=1}^R \hat{\theta}^{*b} \quad (3.11)$$

$$\Delta \bar{\theta}^* = \sqrt{\frac{\sum_b (\hat{\theta}^{*b} - \bar{\theta}^*)^2}{R - 1}} \quad (3.12)$$

$$(3.13)$$

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Berechnung der kritischen Exponenten Gl. 2.10-2.13. Diese Größen werden aus den Observablen abgeleitet:

1. Die spezifische Wärmekapazität [8]

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{V \cdot T^2} \quad (3.14)$$

2. Die magnetische Suszeptibilität [3]

$$\chi = \frac{\langle |M|^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2}{V \cdot T} \quad (3.15)$$

⁴ Großen Teil dieser Abschnitt wurde aus dem Computational Physics-Skript [6] entnommen und verzichtet auf einzelnen Literatur-Zitate.

4. Daten Auswertung

4.1. Bestimmung der Stationarität der Markov-Kette

Wie oben beschrieben, soll die Konvergenzzeit der Markov-Kette nach Stationarität im kritischen Punkt berechnet werden. Aus der Literatur [8] ist der kritische Punkt für das 2D Ising-Modell [8] $\beta J = 0.44$ und für das 3D Ising-Modell [12] $\beta J = 0.22$ bekannt. Wie in der Abb. 4.1 und A.1 zu sehen ist, wird zuerst für die Systemlänge $L = 60$ simuliert. Dann wird die Energie durch Gl. 2.3 und die Magnetisierung durch Gl. 3.9 berechnet. Es ist zu erkennen, dass sowohl für das 2D- als auch für 3D-Modell bereit nach 200 MC-Schritten die Stationarität erreicht wird. Sicherheitshalber werden für die weitere Simulationen aus den ersten $5 \cdot 10^3$ Schritten in der Burn-In Phase die Daten nicht gesammelt.

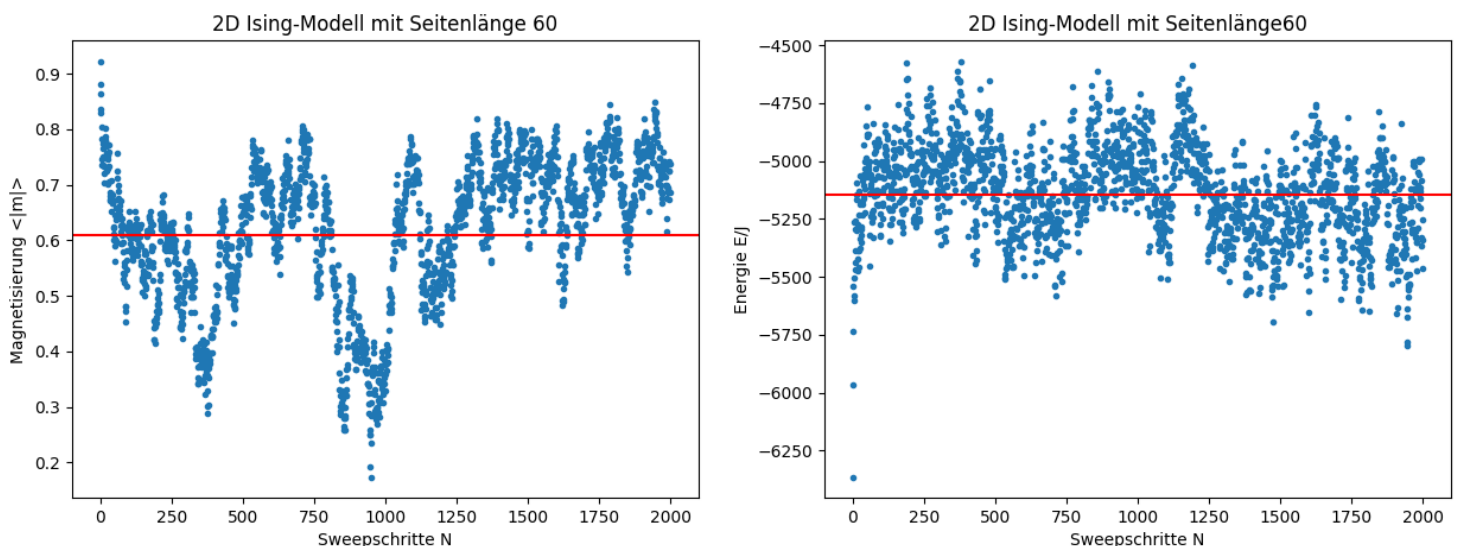
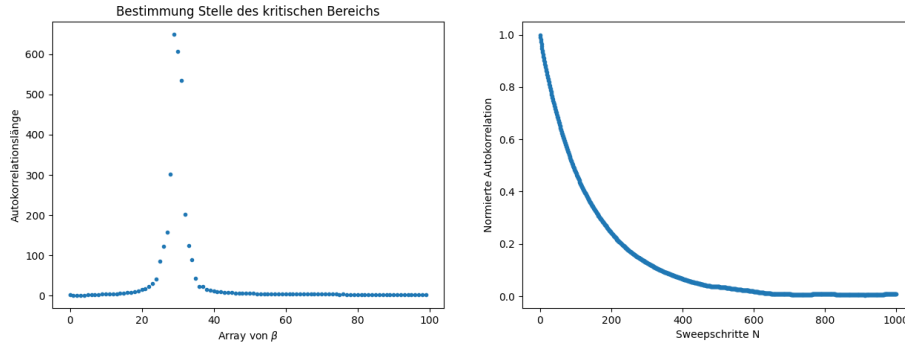


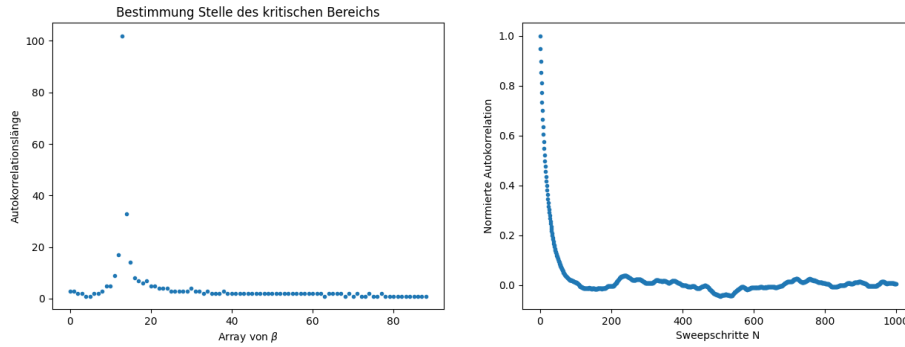
Abbildung 4.1.: Stationarität der Markov-Kette: Simulation des 2D Ising-Modells mit 10^4 MC-Sweeps, zeigt ersten $2 \cdot 10^3$ MC-Sweeps
Links: Magnetisierung gegen MC-Schritte dargestellt. Rote Linie ist der Mittelwert nach $5 \cdot 10^3$ MC-Sweeps.
Rechts: Energie gegen MC-Schritte dargestellt. Rote Linie ist der Mittelwert nach $5 \cdot 10^3$ MC-Sweeps.

4.2. Bestimmung der Blocklänge

¹ Wie in Abs. 3.2 und 3.3 beschrieben, werden autokorrelierte Daten, so geblockt, dass neue Daten als unabhängige Zufallsvariable betrachtet werden können. In Abb. 4.2 sind die Autokorrelationen in 2D- und 3D- Ising-Modell mit Systemlänge $L = 60$ zu sehen.



(a) Autokorrelation für 2D Ising-Modell



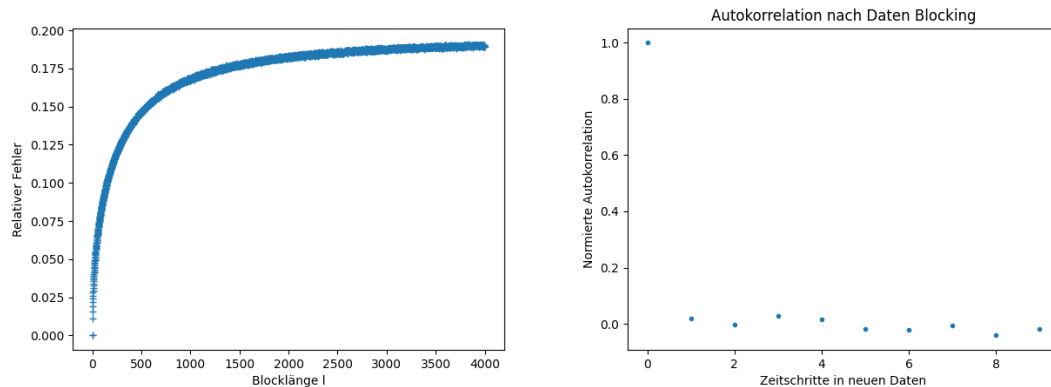
(b) Autokorrelation für 3D Ising-Modell

Abbildung 4.2.: Links: Liste von β gegen Autokorrelation zur Bestimmung der maximale Autokorrelation.

Rechts: Autokorrelation im kritischen Bereich

Sind die stochastischen Zufallsvariable autokorreliert, steigt die Standardabweichung mit steigender Blocklänge l , bis für genügend große Blocklänge ein Plateau erreicht wird. Da die Standardabweichung auch für verschiedene Blocklängen einen Fehler aufweist, wird ein relativer Fehler $\sqrt{l/N}$ zur Standardabweichung abgeschätzt. In der Praxis wird das Plateau mit relativen Fehler Abb. 4.3a beobachtet. Wie in Abb. 4.3a zu sehen ist, ist das Plateau größer als die Autokorrelationszeit. D.h. werden die Daten mit Blocklänge l im Plateau geblockt, sieht man in Abb. 4.3b neue Daten ohne Autokorrelation. Da der Mittelwert unabhängig von der Blocklänge ist, wird die Blocklänge l an dem kritischen Punkt für die Systemlänge $L = 60$ berechnet.

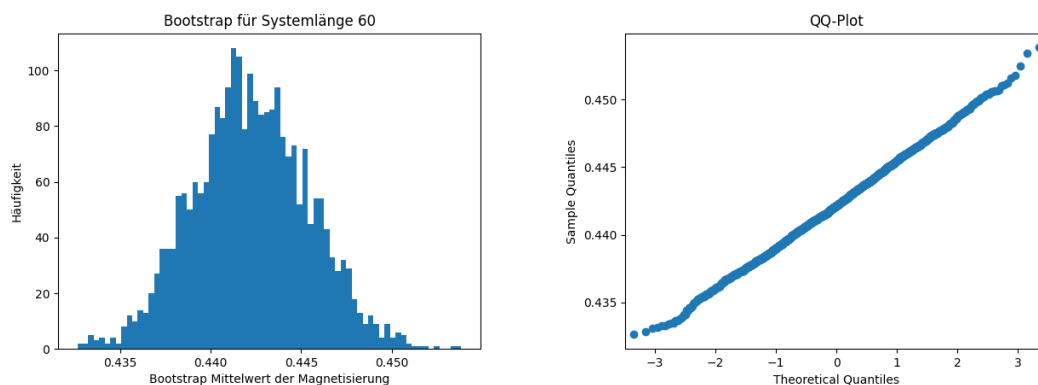
¹ Dieser Abschnitt wurde aus dem Computational Physics-Skript [6] entnommen und verzichtet auf einzelnen Literatur-Zitate.



(a) Blocklänge gegen relativer Fehler zur Bestimmung der Blocklänge (b) Autokorrelation nach Daten Blocking mit Blocklänge $B = 2500$

4.3. Bestimmung der „Bootstrap“-Anzahl

Wie in Abs. 3.5 beschrieben, soll der Mittelwert mit dem „Bootstrap“ normalverteilt sein. Es wird für bereit geblockte Daten mithilfe des „Bootstrap“-Methoden ein Histogramm der Mittelwerte der Magnetisierung wie in Abb. 4.4a abgebildet. Es wird die Anzahl des „Bootstrap“ so lange erhöht, bis das Histogramm in Abb. 4.4b normalverteilt ist.



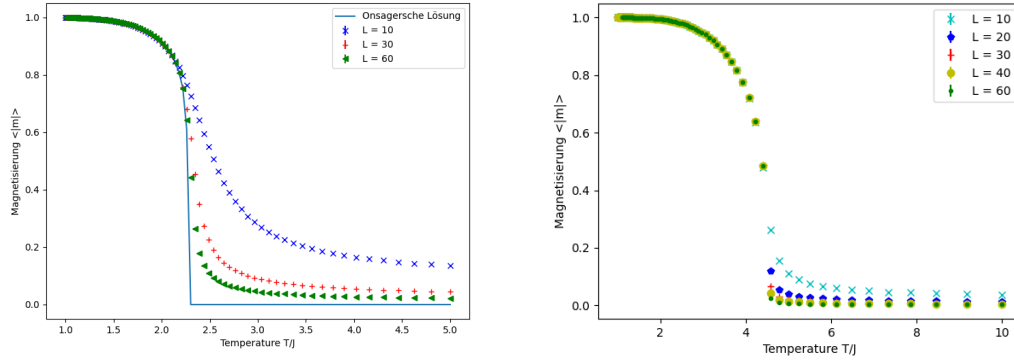
(a) Histogramm des „Bootstrap“-Mittelwerts

(b) QQ Plot

4.4. Verhalten des Ordnungsparameters (Magnetisierung)

In Abb. 4.5 wird die Magnetisierung Gl. 3.9 gegen die Temperaturen T/J aufgetragen. Für das 2D Ising-Modell ist die exakte Lösung nach Lars Onsager Gl. 4.1 [8] bekannt und in Abb. 4.5a zu sehen. Wie erwartet sieht man, dass sich für steigende die Systemlänge L der Ordnungsparameter dem thermodynamischen Limes annähert. Dabei ist im thermodynamischen Limes die spontane Magnetisierung zu erkennen. Obwohl für das 3D Ising-Modell keine exakte Lösung

vorhanden ist, verhält sich der Ordnungsparameter ähnlich zu dem 2D Ising-Modell und zeigt eine spontane Magnetisierung. Es ist such zu erkennen, dass sich die spontane Magnetisierung in dem 3D Ising Modell, für steigende Systemlänge L , noch schneller als in dem 2D Modell dem thermodynamischen Limes annähert.



(a) 2D Ising-Modells mit Blocklänge $l = 1500$ und (b) 3D Ising-Modells mit Blocklänge $l = 300$ und „Bootstrap“-Anzahl $b = 2500$

Abbildung 4.5.: Verhalten des Ordnungsparameters: Magnetisierung $\langle m \rangle$ gegen Temperaturen T/J für verschiedene Systemlänge L

$$\langle m \rangle (T) = (1 - \sinh(2\beta)^{-4})^{1/8} \quad (4.1)$$

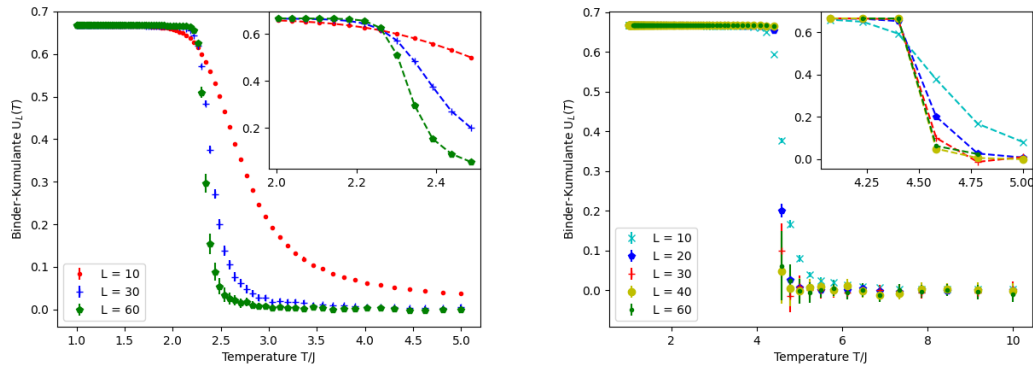
4.5. Bestimmung der kritischen Temperatur

Laut K. Binder die Binder-Kumulante ist eine universelle Funktion [3] um den kritischen Bereich. D.h für eine bestimmte Dimension ist sie für jede Systemlänge Konstant. Aus dem Schnittpunkt der Binder-Kumulante in Abb. 4.6 kann man die kritische Temperatur bestimmen. Dazu wird um den kritischen Bereich durch die Simulation die Daten gesammelt. Diese Kumulanten sind in Abb. A.2 zu sehen. Es wird an diese Kumulante so herangezogen, dass nur zwei Temperaturen zu sehen sind. An diese Kumulanten werden durch lineare Interpolation und „Bootstrap“-Methode [2] kritische Temperatur und deren Fehler von etwa $T_C = (2,268 \pm 0,004)J$ ausgerechnet. Analog wird für das 3D Ising-Modell in Abb. A.3 die kritische Temperatur von etwa $T_C = (4,512 \pm 0,001)J$ bestimmt.

4.6. Berechnung kritischer Exponenten

Wenn man die kritische Temperatur kennt, sind die kritischen Exponenten Abs. 2.3.2 besonders von der Interesse, weil diese Universalität aufweisen. Da die Exponenten im thermodynamischen

²Zuerst wurde versucht, mit lineare Regression die Schnittpunkte zu finden, aber die Elemente der Kovarianzmatrix war unendlich. Deshalb kann man mit Gauß'en Fehlerfortpflanzung den Fehler nicht berechnen.



(a) Binder-Kumulate für 2D Ising-Modell mit Blocklänge $l = 1500$ und „Bootstrap“-Anzahl $b = 2500$ (b) Binder-Kumulate für 3D Ising-Modell mit Blocklänge $l = 400$ und „Bootstrap“-Anzahl $b = 2500$

Abbildung 4.6.: Binder-Kumulate Gl. 2.27 gegen Temperatur T/J für verschiedene Systemlänge L

Limes zu bestimmen sind, wird den Ansatz von „Finite-Size Scaling“ Abs. 2.4 benutzt. Dabei entspricht ζ den Exponenten in Gl. 2.10–2.13.

4.6.1. Berechnung von ν

Wie in Abs. 4.5 diskutiert und gezeigt, ist die Binder-Kumulate für alle Systemlänge im kritischen Punkt gleich, d.h. Systemlänge unabhängig, jedoch abhängig von Dimension. Aus dieser Tatsache kann man in Gl. 2.29 sehen, dass $\zeta = 0$ sein soll. Vergleicht man nun Gl. 2.29 zur Gl. 2.28 hängt die erste Ableitung der Kumulate nach Temperatur von der Systemlänge ab. Da die Binder-Kumulate wie $U_L \sim L^{-d}$ skaliert [3], gibt es einen sehr schmalen Bereich, wo sich die Kumulate etwa Linear mit der Temperatur verhält³. In diesem schmalen Bereich ist der Metropolis-Algorithmus wegen kritischer Verlangsamung ineffektiv. Dadurch entsteht ein systematischer Fehler in höherer Dimension und größerer Systemlänge zur Berechnung der ersten Ableitung.

Trägt man die erste Ableitung der Binder-Kumulate gegen die Systemlänge auf, bekommt man aus der exponentiellen Anpassung der Form $f(x) = a \cdot x^b$ den kritischen Exponent Abb. 4.7a $\nu = (0.996 \pm 0.015)$ für 2D- und Abb. 4.7b $\nu = (0.754 \pm 0.068)$ für 3D-Ising-Modell.

$$\nu = \frac{1}{b} \quad (4.2)$$

$$\Delta\nu = \sqrt{(-b^{-2}\Delta b)^2} \quad (4.3)$$

³Die erste Ableitung wurde aus Gerade-Anpassungen um kritischen Bereich Abb. A.2a und A.3a berechnet

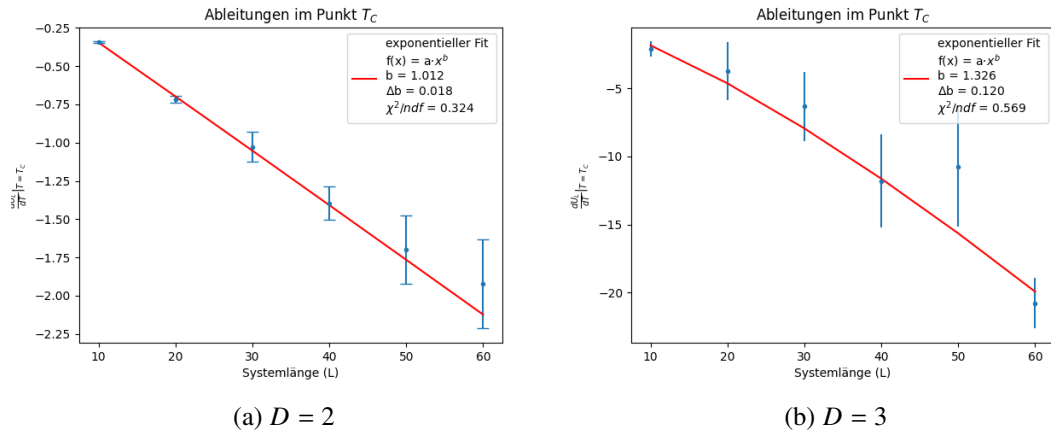


Abbildung 4.7.: Ableitung der Binder-Kumulante an dem Punkt $T = T_C$ gegen Systemlänge zur Bestimmung von ν mit Blocklänge $l = 1500$ und „Bootstrap“-Anzahl $b = 2500$

4.6.2. Berechnung von β

Trägt man die normierte Magnetisierung $\langle |m| \rangle$ im kritischen Punkt gegen die Systemlänge auf, bekommt man aus der exponentiellen Anpassung der Form $f(x) = a \cdot x^b$ den kritischen Exponent Abb. 4.8a $\beta = (0,122 \pm 0,004)$ für 2D- und Abb. 4.8b $\beta = (0,382 \pm 0,038)$ für 3D-Ising-Modell.

$$\beta = b \cdot \nu \quad (4.4)$$

$$\Delta\beta = \sqrt{(\nu\Delta b)^2 + (b\Delta\nu)^2} \quad (4.5)$$

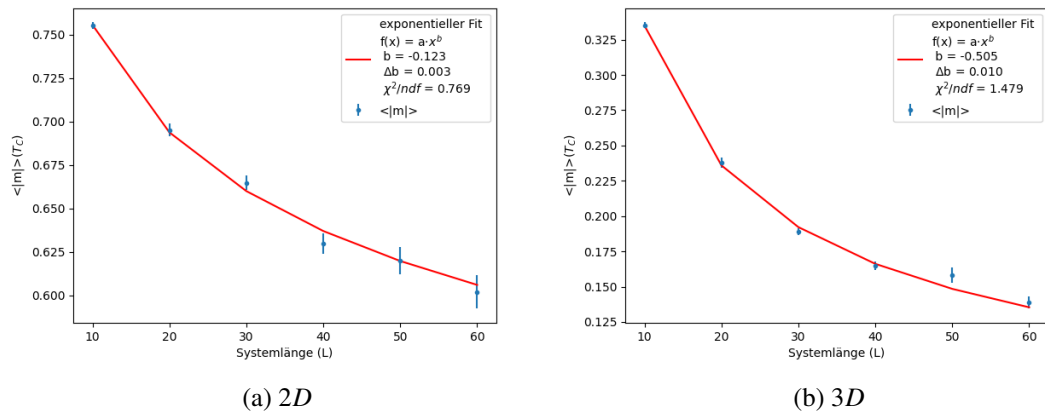


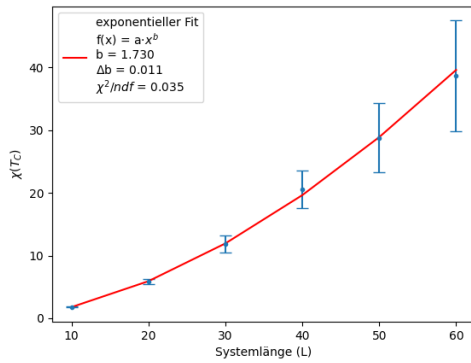
Abbildung 4.8.: Magnetisierung gegen Systemlänge zur Bestimmung von β Binder-Kumulante für 2D Ising-Modell mit Blocklänge $l = 800$ und „Bootstrap“-Anzahl $b = 2500$

4.6.3. Berechnung von γ

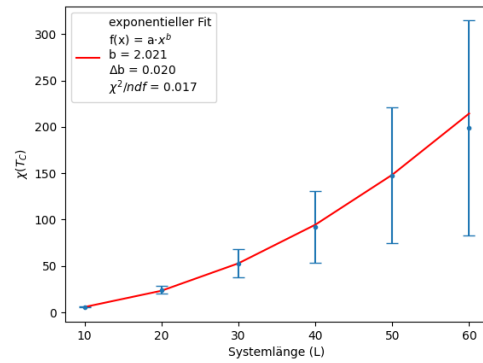
Trägt man die magnetische Suszeptibilität χ im kritischen Punkt gegen die Systemlänge auf, bekommt man aus der exponentiellen Anpassung der Form $f(x) = a \cdot x^b$ den kritische Exponent Abb. 4.9a $\gamma = (1,72 \pm 0,03)$ für 2D- und Abb. 4.9b $\gamma = (1,55 \pm 0,14)$ für 3D-Ising-Modell.

$$\gamma = b \cdot \nu \quad (4.6)$$

$$\Delta\gamma = \sqrt{(\nu\Delta b)^2 + (b\Delta\nu)^2} \quad (4.7)$$



(a) 2D



(b) 3D

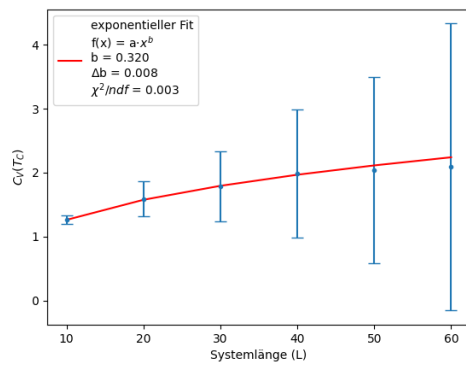
Abbildung 4.9.: Magnetische Suszeptibilität gegen Systemlänge zur Bestimmung von γ

4.6.4. Berechnung von α

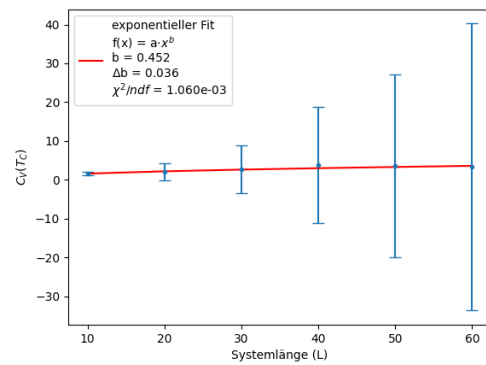
Trägt man die spezifische Wärmekapazität C_V im kritischen Punkt gegen die Systemlänge auf, sollte man aus der exponentiellen Anpassung der Form $f(x) = a \cdot x^b$ den kritische Exponent Abb. 4.9a α für 2D-Ising-Modell bekommen. Es ist aus der Literatur den Wert von $\alpha = 0$ bekannt. Wird ein linearer Fit Abb. 4.11a angepasst, verbessert sich die Güte des Fits im Vergleich zu Abb. 4.9a. Dadurch kann man den Wert von $\alpha = 0$ abschätzen. Wird gleiche Argumentation bei dem 3D-Modell genommen, verschlechtert sich die Güte des Fits in Abb. 4.11b. Dadurch kann man behaupten, dass der kritische Exponent $\alpha \neq 0$ ist. Mit einer exponentiellen Anpassung der Form $f(x) = a \cdot x^b$ Abb. 4.10b wird der kritische Exponent $\alpha = (0,341 \pm 0,041)$ berechnet.

4.7. Ergebnisse und Fehler Diskussion

Die Ergebnisse aus Abs. 4.6 sind in der Tabelle 4.1 zusammengefasst. In der Tab. 4.1 stimmt die numerische Lösung des 2D-Ising-Modells mit Unsicherheit/Fehler zu der analytischen Lösung überein. Die kritische Temperatur des 3D-Ising-Modell stimmt innerhalb der Unsicherheit zu den

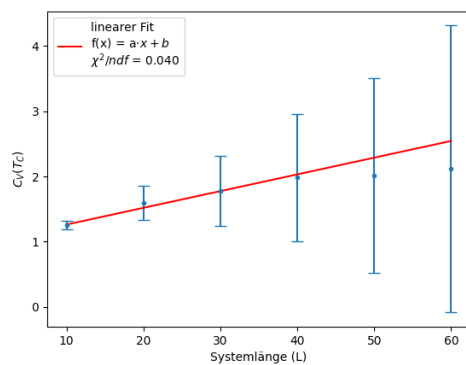


(a) 2D

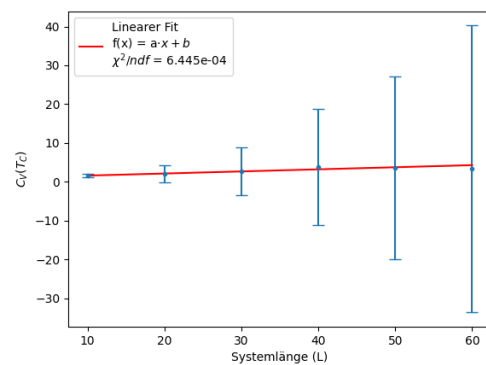


(b) 3D

Abbildung 4.10.: Wärmekapazität gegen Systemlänge zur Bestimmung von α mit exponentieller Anpassung



(a) 2D



(b) 3D

Abbildung 4.11.: Wärmekapazität gegen Systemlänge zur Bestimmung von α mit linearem Fit

Tabelle 4.1.: Gesamte Ergebnisse der Simulation

Größe	2D			3D		
	Simulation	Literatur	Abweichung	Simulation	Literatur [7] [10]	Abweichung
T_C/J	$2,268 \pm 0,004$	2,269	-	$4,512 \pm 0,001$	4,511	-
ν	$0,996 \pm 0,015$	1	-	$0,754 \pm 0,068$	0,63	$\approx 19\%$
β	$0,122 \pm 0,004$	0,125	-	$0,382 \pm 0,038$	0,325	$\approx 17\%$
γ	$1,72 \pm 0,03$	1,75	-	$1,55 \pm 0,14$	1,24	$\approx 25\%$
α	0	0	-	$0,341 \pm 0,041$	0,11	$\approx 210\%$

von Alan M. Ferrenberg and D. P. Landau [7] überein, jedoch haben die kritischen Exponenten außer α eine Abweichung bis zu 25% zu den Literatur-Werten [10].

Wie in Abs. 4.6.1 diskutiert, gibt es ein sehr kleines Fenster, wo die Binder-Kumulante linear mit Temperatur skaliert. Wegen des ineffizienten Verhaltens des Metropolis-Algorithmus um den kritischen Bereich hat die Berechnung von ν einen systematischen Fehler. Da die anderen Exponenten mit ν skalieren, weichen diese Größen aufgrund Fehlerfortpflanzung auch von den Literatur-Werten ab. Eine weitere Fehler-Quelle ist eine kleine Statistik. Wegen den Einzelkern-Befehlen [2] hat das 3D-Modell einen sehr hohen Zeitaufwand, weswegen bei dieser Arbeit nur $7 \cdot 10^4$ MC-Schritte ausgeführt wurden. Dahingegen hat die Arbeit von Alan M. Ferrenberg und D.P. Landau [7] zwischen $3 \cdot 10^6$ und $12 \cdot 10^6$ MC-Schritte. Diese kleine Statistik spielt auch eine große Rolle für die Berechnung von γ und α , da diese aus der Varianz des Gesamt-Spins und der Energie ausgerechnet wurde.

5. Fazit

Das Ising-Modell ist ein einfaches Modell, das einen Phasenübergang aufweist. Mithilfe der Binder-Kumulante und des „Finite-Size-Scaling“ wurde die kritische Temperatur $T_C = (2,268 \pm 0,004)\text{J}$ für 2D- und $T_C = (4,512 \pm 0,001)\text{J}$ für 3D-Ising-Modell gefunden. Diese Werte stimmen innerhalb des Fehlers sehr gut mit den Literatur-Werten [7][10] überein. Das Modell ist auch von Interesse, weil es auf jede beliebige Dimension simulieren lässt. Eine weitere Aussage des Skalengesetzes ist die Skaleninvarianz im kritischen Punkt [8]. Anhand Abb. A.5 kann man dies auch im System, viel kleiner als thermodynamischer Limes, beobachten. Für das 2D-Ising-Modell ist der naive Ansatz mit dem Metropolis-Algorithmus [2] eine sehr gute Methode, um die kritischen Phänomene zu untersuchen. Mit dem Ansatz des „Finite-Size-Scaling“ kann man das Verhalten einer Funktion im thermodynamischen Limes extrapolieren. Diese Arbeit stellt fest, dass der naive Ansatz für das 3D-Ising-Modell zur Berechnung des kritischen Punktes bzw. des Phasenübergangs gut geeignet ist, jedoch Ineffizienz zur Berechnung der kritischen Exponenten. Einerseits soll die Systemlänge genügend groß sein, damit die Effekte der periodischen Randbedingung verschwinden und „Finite-Size-Scaling“ anwendbar ist. Andererseits steigt die Unsicherheiten mit der Systemlänge an.

Da die kritischen Exponenten universal sind, bietet sich die Methode der Block-Spin [3], wo das gesamte System in mehrere Subsystem mit kleinen Block geteilt wird, an. Für eine schnellere Simulation kann man der Methode von Alan M. Ferrenberg und D.P. Landau [7] folgen, wo ein Subsystem mit 64 Spins als ein 64-Bit „Word“ gespeichert wird und alle Spins in einem „Word“ auf einmal umgedreht wird.

Literatur

- [1] W. Selke (RWTH Aachen) und Chernogolovka) L. N. Shchur (Landau Institute. *Critical Binder cumulant revisited*. URL: <https://www.physik.uni-leipzig.de/~janke/CompPhys07/Folien/selke-poster2.pdf> (besucht am 06.03.2024).
- [2] Jenish Adhikari. *Source-Code der Bachelorarbeit*. URL: <https://github.com/jenishadhikari221/Bachelorarbeit.git> (besucht am 12.03.2024).
- [3] Kurt Binder. „Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions“. In: *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 43 (1981), S. 119–140.
- [4] Kurt Binder, Dieter W Heermann und K Binder. *Monte Carlo simulation in statistical physics*. Bd. 8. Springer, 1992.
- [5] Stephen G Brush. „History of the Lenz-Ising model“. In: *Reviews of modern physics* 39.4 (1967), S. 883.
- [6] Marcus Petschlies und Carsten Urbach. *Computational Physics*. (Besucht am 06.03.2024).
- [7] Alan M Ferrenberg und DP Landau. „Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study“. In: *Physical Review B* 44.10 (1991), S. 5081.
- [8] Kerson Huang. *Statistical mechanics*. John Wiley & Sons, 2008.
- [9] BrainyQuote.com. BrainyMedia In. URL: https://www.brainyquote.com/quotes/erwin_schrodinger_304795 (besucht am 02.11.2023).
- [10] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik*. Bd. 6. Springer, 2005.
- [11] pyfssa. *The finite-size scaling ansatz*. URL: <https://pyfssa.readthedocs.io/en/stable/fss-theory.html> (besucht am 24.02.2024).
- [12] A F Sonsin u. a. „Computational Analysis of 3D Ising Model Using Metropolis Algorithms“. In: *Journal of Physics: Conference Series* 630.1 (Juli 2015), S. 012057. doi: [10.1088/1742-6596/630/1/012057](https://doi.org/10.1088/1742-6596/630/1/012057). URL: <https://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/630/1/012057>.

A. Anhang

A.1. Abbildungen

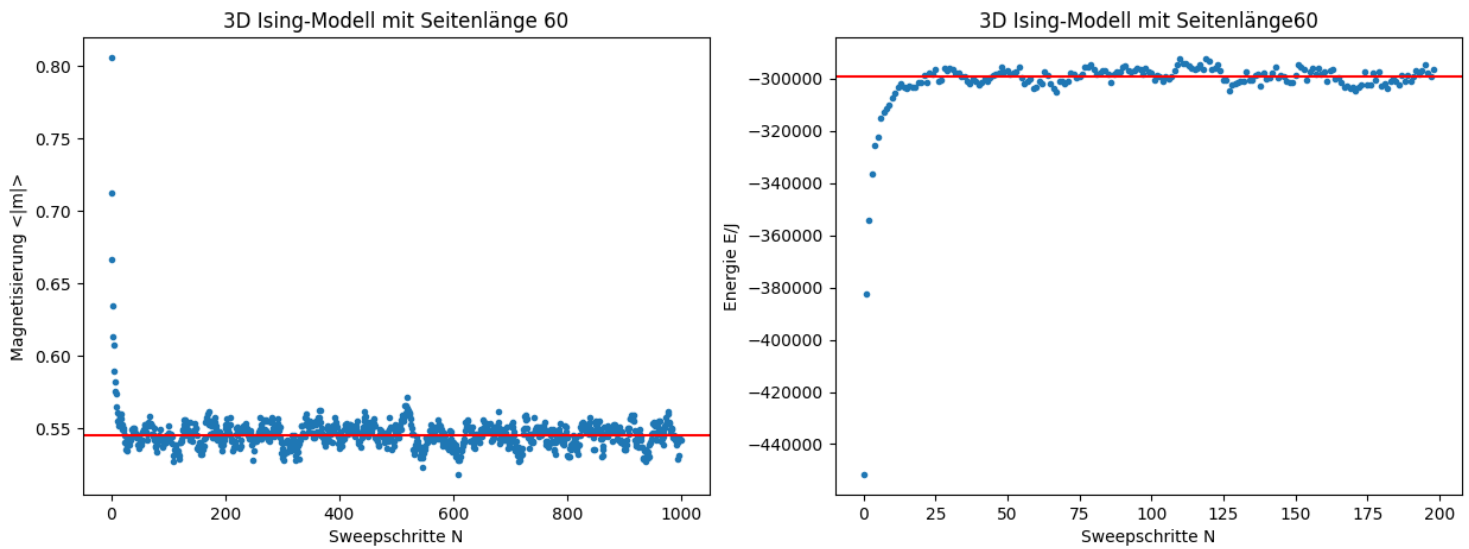
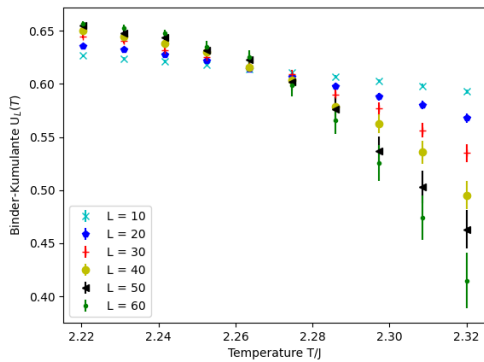


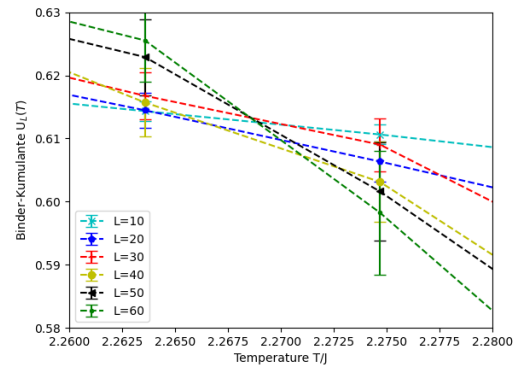
Abbildung A.1.: Stationarität der Markov-Kette: Simulation des 3D Ising-Modells mit 10^3 MC-Sweeps.

Links: Magnetisierung gegen MC-Schritte dargestellt. Rote Linie ist der Mittelwert nach $2 \cdot 10^2$ MC-Sweeps.

Rechts: Energie gegen MC-Schritte dargestellt. Rote Linie ist der Mittelwert nach $2 \cdot 10^2$ MC-Sweeps.

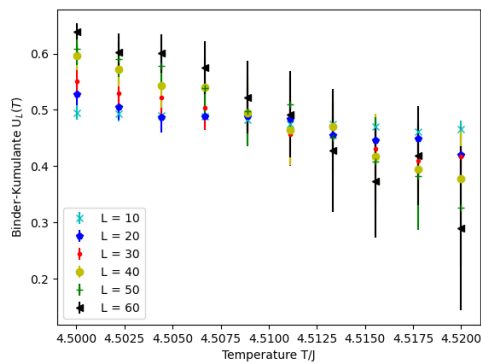


(a) Binder-Kumulant um kritischen Bereich

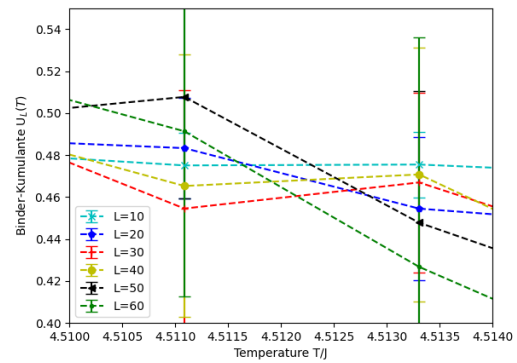


(b) Binder-Kumulant gezoomt zur Bestimmung der kritischen Temperatur

Abbildung A.2.: Binder-Kumulant Gl. 2.27 gegen Temperatur T/J für verschiedene Systemlänge L zur Bestimmung der kritischen Temperatur für 2D Ising-Modell



(a) Binder-Kumulant um kritischen Bereich



(b) Binder-Kumulant gezoomt zur Bestimmung der kritischen Temperatur

Abbildung A.3.: Binder-Kumulant Gl. 2.27 gegen Temperatur T/J für verschiedene Systemlänge L zur Bestimmung der kritischen Temperatur für 3D Ising-Modell

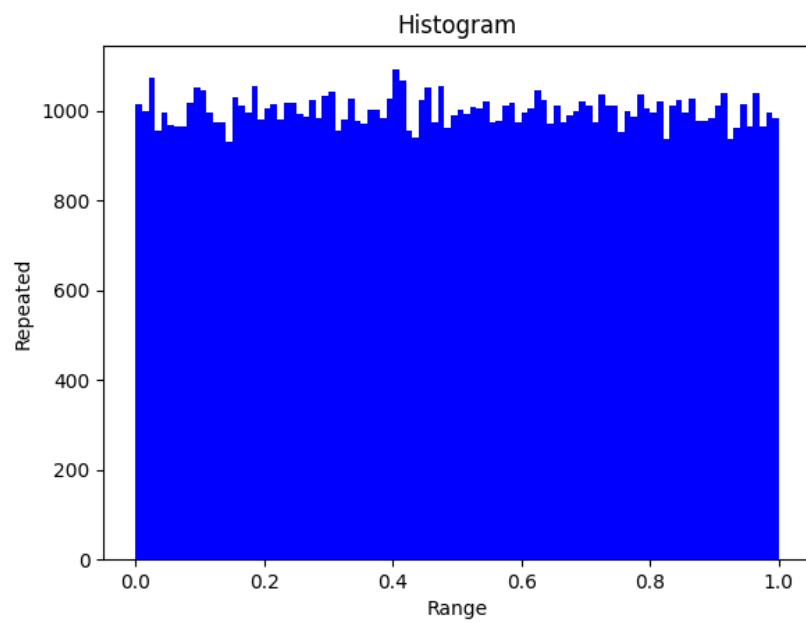
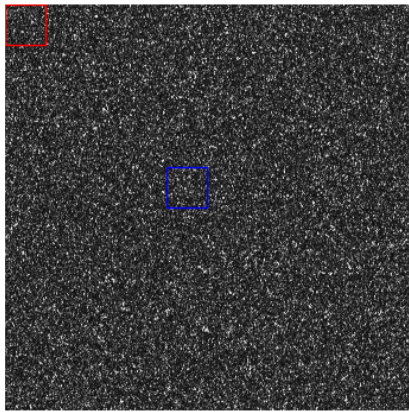
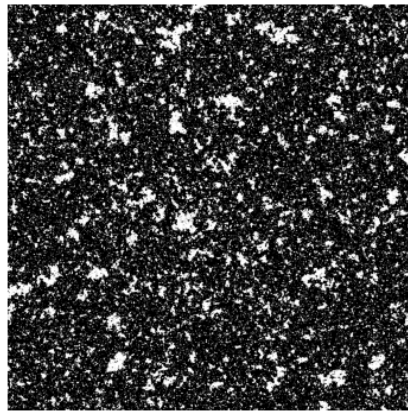


Abbildung A.4.: Verteilung der Zufallszahlen auf das Intervall $\mathcal{U}[0, 1]$

2D-Ising-Modell mit Systemlänge 10000



Gezoomt blaues Viereck



Gezoomt rotes Viereck

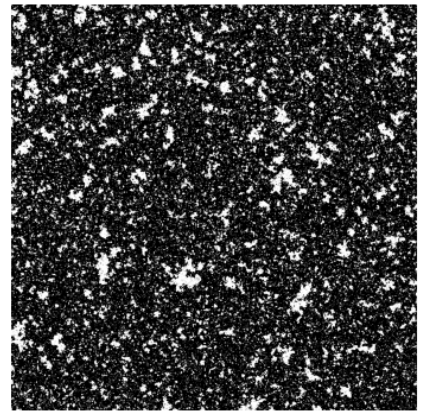


Abbildung A.5.: Skaleninvarianz des 2D-Ising-Modells

Links: Momentaufnahme im 300-ten MC-Sweep für 2D-Ising-Modell mit Systemlänge $L = 10000$ und $\beta J = 0.4407$

Mitte: Vergrößerte blaue Region

Rechts: Vergrößerte rote Region