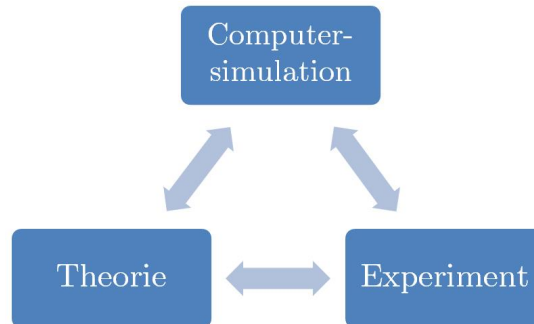


Inhaltsverzeichnis

1	Vorwort	2
1.1	Hardware	2
2	Stochastische Physik	4
2.1	Mikrozustände, Phasenraum und Entropie	4
2.2	Mikrokanonische Gesamtheit	6
2.3	Kanonisches Ensemble	7
2.4	Weitere Resultate der statistischen Mechanik	10
3	Monte Carlo Verfahren	10
3.1	Zufallszahlen	10
3.2	Monte Carlo Integration	16
3.3	Zufallszahlen einer vorgegebenen Verteilung	21
3.4	Ising Modell	24
3.5	Monte Carlo Simulation	27
3.6	Master Gleichung und Monte Carlo Dynamik	30
3.7	Phasenübergänge und Skalentheorie	33
3.8	Finite size scaling	40
3.9	Kontinuierliche Freiheitsgrade: 'x-y' und Heisenbergs-Modell	42
3.10	MC-Algorithmen für kontinuierliche Freiheitsgrade	43
3.10.1	x-y-Modell	43
3.10.2	Heisenberg-Modell	45
3.11	Perkolations	46
3.11.1	numerisches Verfahren zur Clusteranalyse	48
4	Molekulardynamiksimulationen	49
4.1	EULER Verfahren	50
4.2	Stabilitätsanalyse	51
4.3	Runge-Kutta Verfahren	53
4.4	Schrittweitenanpassung	55
4.5	Prädiktor-Korrelator-Verfahren	56
4.6	Chaotische Systeme und fraktale Dimensionen	56
4.7	Molekulardynamik im mikrokanonischen Ensemble	61
4.8	Stochastische Differentialgleichungen	68
4.8.1	Erst die Numerik	71
4.8.2	Jetzt Multiplikatives Rauschen	73
4.9	Zeitquantifizierung von Monte Carlo Methoden	75
	Anhang	78

1 Vorwort

Die Bedeutung der Computersimulation für die physikalische Forschung steigt. Man kann von einem 3. methodischen Standbein der Physik sprechen:



- Vorteile:
 - löst Probleme für die es keine analytische Lösung gibt
 - schafft Raum für Modelle, zu denen es keine analytischen Verfahren gibt
 - kann physikalische Größen berechnen, die nicht messbar sind
 - immer leistungsfähiger
 - immer billiger
- Vorgehensweise:
 - Modellierung: realistisch \longleftrightarrow einfach
 - Programmierung / Test
 - Erzeugen von Daten / Optimierung
 - Analyse / Interpretation

1.1 Hardware

Diese Vorlesung beschäftigt sich nicht mit Hardware an sich, aber wir müssen abschätzen, ob ein Problem numerisch lösbar ist!

Beispiel: Wie weit kann ein Rechner zählen?

$$S(N) = \sum_{i=1}^N x_i \text{ beispielsweise mit: } x_i = 1$$

1. **Rechenleistung:** typisch 10 GFLOP/S ('Giga Floating Point Operations Per Second', Gleitkommazahlen Operationen)

Zum Beispiel Additionen:

Bei $N = 10^{10}$ pro Sekunde

\Rightarrow Für die Zahl der Atome ($N = 10^{23}$) dann $10^{13}s \approx 3 \cdot 10^5 a$

2. **Speicherbedarf:**

'Trivialmodell' eines Rechners:

Hauptspeicher	CPU	Festplatte
<ul style="list-style-type: none"> • klein • schnell • (Daten der laufenden Programme) 	<ul style="list-style-type: none"> • rechnet 	<ul style="list-style-type: none"> • langsam • groß • (permanente Datenhaltung, 'Ergebnisse')

Informationseinheit:

$1\text{Byte} \hat{=} 1 \text{ Zeichen (z.B. einer Tastatur)}$
 $1\text{kByte} \hat{=} 1 \text{ Seite Text (z.B. 50 Zeilen, 20 Seiten)}$

Typisch beim Programmieren ist die Gleitkommazahl ('double' in C):

$$\text{double} \hat{=} 8$$

$$\Rightarrow 10^{10} \text{ Zahlen} \hat{\approx} 10^{11} \text{ Byte} \approx 100 \text{ GB}$$

Typischer **Hauptspeicher** (bei uns 16 GB) wäre im Bruchteil einer Sekunde voll. Die Zahlen, die der Rechner in einer Sekunde verarbeitet *passen nicht* in den Hauptspeicher, falls Zwischenergebnisse gespeichert werden (ist aber auch nicht nötig). Eine typische **Festplatte** fasst 500 GB. Hier passen die Daten drauf.

3. Präzision:

	Integer (ohne Komma)	Double (mit Komma)
Wertebereich (min/max)	$\pm 2147\ 483\ 647 \approx 2 \cdot 10^9$	$\pm 2 \cdot 10^{308}$
Genauigkeit	1	$2 \cdot 10^{-16} \hat{=} 17 \text{ Stellen}$

Vorsicht - der Computer nähert/rendert!

- Der Wertebereich vom Integer wird nach 0,2s verlassen
- Der Wertebereich vom Double wird nach $2 \cdot 10^6 s \hat{=} 23d$ verlassen.

Beispiel: (Addieren) Wo sind die Grenzen?

$$\sum_{i=1}^N 1$$

- Wenn alle Partialsummen in ein Feld aufgeschrieben werden, läuft der Hauptspeicher nach spätestens 16/100s über.
- nach 0,2s reicht Integer Wertebereich nicht mehr

- (c) Nach $2 \cdot 10^6 s \hat{=} 23d$ reicht Double Präzision nicht
(Beispielsweise 17 Stellen: 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 1 2 3 4 5 6 + 1 obwohl $10^{18} < 2 \cdot 10^{308}$)

Beispiel: (Addition von Double)

5 signifikante Stellen - Berechnung von $10^9 + 10^4$:

$$\begin{aligned} \text{Exakt:} &= 1 \cdot 10^9 + 0,00001 \cdot 10^9 = 1,00001 \cdot 10^9 \\ \text{Rechner:} &= 1,0000 \cdot 10^9 + 0,0000... \cdot 10^9 = 1 \cdot 10^9 \end{aligned}$$

Bemerkung: \Rightarrow 1. Kommutativgesetz der Addition gilt nicht numerisch!

Denn:

$$1 \cdot 10^9 + \underbrace{0,000001 \cdot 10^9 + \dots}_{10^5} = 1 \cdot 10^9$$

während

$$\underbrace{0,00001 \cdot 10^9 + \dots}_{10^5} + 1 \cdot 10^9 = 1,0001 \cdot 10^9$$

\Rightarrow Regel für den Programmierer: Bei langen Zahlenreihen erst die kleinen addieren!

2 Stochastische Physik

2.1 Mikrozustände, Phasenraum und Entropie

Die **Gesamtheit (Ensemble)** ist eine Menge von Mikrozuständen, die einen Makrozustand repräsentieren (Zeit/Systemabhängig). Der **Mikrozustand** eines Systems wird durch generalisierte Koordinaten q_i und Impulse p_i mit $i = \{1, \dots, 3N\}$ beschrieben.

\rightarrow $6N$ -dimensionaler Phasenraum. Ein Punkt im Phasenraum ist ein Mikrozustand, Dynamik führt auf eine Bahn (*Phasenraumtrajektorie*) Siehe Abbildung 1a.

Die **Hamiltonfunktion** $H(q, p)$ entspricht der Gesamtenergie des Systems. **Energieerhaltung:** Im abgeschlossenen System ist die Gesamtenergie konstant mit $U = H(q(t), p(t)) = \text{const.}$ (*innere Energie*).

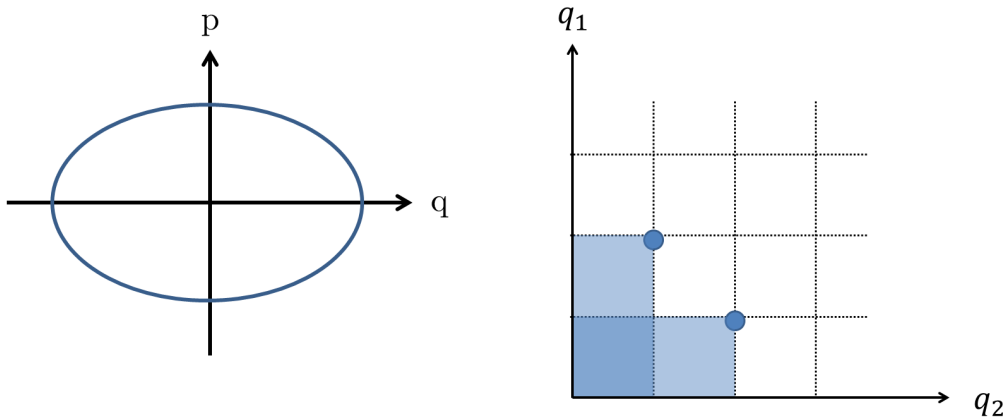
Die stochastische Beschreibung ist zurückzuführen auf die **Wahrscheinlichkeitsverteilung** $\rho(p, q)^1$ mit der Wahrscheinlichkeit $\rho(q, p) dq^{3N} dp^{3N} = \prod_{i=1}^N dq_i dp_i =: d\Gamma$ die Mikrozustände im Phasenraumelement $dq^{3N} dp^{3N}$ des Systems zu finden. Die Normierung verlangt:

$$1 = \int \rho(q, p) d\Gamma \quad (\text{mit Phasenraumvolumen } d\Gamma) \quad (1)$$

Das Phasenraumintegral wird also etwas anders definiert:

1. Faktor $\frac{1}{h^{3N}}$ wird eingeführt, damit ρ dimensionslos ist. Mit dem PLANCKschen Wirkungsquantum h und macht Sinn wegen $\Delta q \Delta p \approx h$ (kleinstmögliches Phasenraumelement)

¹besser: eine Wahrscheinlichkeitsdichte



(a) Phasenraumtrajektorie des 1d harmonischen Oszillators. $q(t) \propto \cos(\omega t)$ und $p(t) \propto \sin(\omega t)$

(b) Ununterscheidbare Zustände

Abbildung 1

2. Bislang gehen wir davon aus, dass die Teilchen ununterscheidbar sind (durchnummerierbar). Siehe Abbildung 1b. Bei unterscheidbaren Teilchen wäre das gleiche Zustände! Deswegen muss zusätzlich durch die Zahl der Vertauschungen ($N!$) dividiert werden! (GIBBS'scher Korrelationsfaktor)

$$1 = \frac{1}{h^{3N} N!} \int \rho(q, p) d\Gamma \quad (2)$$

Ohne diese Korrektur kommt man zum GIBBS'schen Paradoxon. Der **thermische Mittelwert** $A(q, p)$ einer beliebigen Größe ist damit

thermischer Mittelwert

$$\langle A \rangle = \frac{1}{h^{3N} N!} \int \rho(q, p) A(q, p) d\Gamma \quad (3)$$

Dieser ist Numerisch nicht lösbar, da für 10 Teilchen bereits 10^{60} Rechenoperationen nötig wären!

Die **Entropie** definieren wir analog zur Informationstheorie über

$$S = -\langle k_B \ln(\rho) \rangle = -\frac{k_B}{h^{3N} N!} \int \rho \ln(\rho) d\Gamma \quad (4)$$

Bedeutung der Entropie:

- Informationsgehalt und Ungewissheit (*Informationstheorie*);
- thermisches Mittel, 'Unordnung' (*Physik*)

Beispiel: (gezinkter Münzwurf)

Es sei $p(Kopf) = p \neq p(Zahl) = q$ und $1 = p + q$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow S &= -k_B \underbrace{\sum_{Kopf, Zahl} \rho \ln(\rho)}_{\text{Integral wird Summe}} = -k_B(p \ln(p) + q \ln(q)) \\ &= -k_B(p \ln(p) + (1-p) \ln(1-p)) \end{aligned}$$

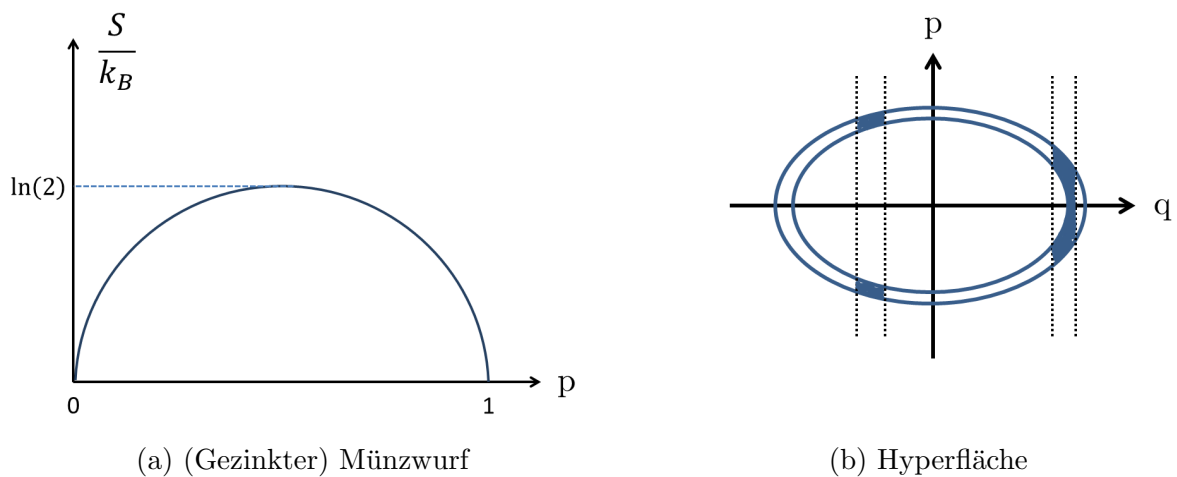


Abbildung 2

Wir werfen N-mal: (siehe Abbildung 2a)

$$\left. \begin{array}{l} p = 0 : Z Z Z Z Z Z Z \dots \\ p = 1 : K K K K K \dots \end{array} \right\} \text{'Unordnung', 'Informationsgehalt' } S = 0$$

$$p = 0.5 : K K Z K Z \dots \} S \text{ maximal}$$

Im Phasenraum: $S = 0$ bestehen überall $\rho = 0$ außer an einem Punkt $\rho(p_0, q_0) = 1 \Rightarrow$ nur *ein* Mikrozustand zu vorgegebenen Makrozustand. Hohe Entropie heißt, viele, gleich wahrscheinliche Mikrozustände.

2.2 Mikrokanonische Gesamtheit

Ziel allgemein: Bestimmung von ρ für definierte physikalische Systeme

Hier (mikrokanonisch): Isoliertes (abgeschlossenes) System mit festem U, V, N (innere Energie, Vauum, Teilchenzahl).²

Wir postulieren, dass dann ρ für alle erlaubten Zustände gleich ist, also

$$\rho(q, p) = \begin{cases} \rho & \text{für } H(p, q) = U \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5)$$

Da ρ Volumenintegral, ist es zweckmäßig, Volumen zwischen zwei Hyperflächen zu betrachten (siehe Abbildung 32):

$$\beta = \{(p, q) : U \leq H(p, q) \leq U + \Delta\} \quad (6)$$

²Zur Erinnerung:

Die *kanonische* Gesamtheit: festes N , Energiefluktuation

Das *großkanonische* Ensemble: Energie- und Teilchenfluktuation

später dann $\Delta \rightarrow 0$.

$$\int_{\beta} \underbrace{d\Gamma}_{inkl. (h^{3N} N!)^{-1}} = 1 \Rightarrow \rho = \frac{1}{Z} \quad (7)$$

mit der **Zustandssumme der mikrokanonischen Gesamtheit**

$$Z_{\Delta} = \int_{\beta} d\Gamma = Z_{\Delta}(U, V, N) \quad (8)$$

3

$$\Rightarrow S = - \langle k_B \rho \ln(\rho) \rangle = -k_B \underbrace{\int_{\beta} d\Gamma \rho}_{=1} \underbrace{\ln(\rho)}_{\text{unabhängig von p,q}} \quad (9)$$

$$= k_B \ln(Z_{\Delta}(U, V, N)) \quad (10)$$

$$= -k_B \ln(\rho) \quad (11)$$

Zusammenhang zur Thermodynamik: $S(U, V, N)$ ist ein thermodynamisches Potential mit natürlichen Variablen U, V, N

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial U} \Big|_{V, N} &= \frac{1}{T} = k \frac{1}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial U} \right)_{V, N} \\ \frac{\partial S}{\partial V} \Big|_{U, N} &= -\frac{p}{T} \\ \frac{\partial S}{\partial N} &= \frac{\mu}{T} \end{aligned} \right\} dS = \frac{\partial S}{\partial U} dU + \frac{\partial S}{\partial V} dV + \frac{\partial S}{\partial N} dN \quad (12)$$

Abschließende Bemerkungen:

- Zustandssumme der mikrokanonischen Gesamtheit kann als 'Zahl der Zustände' zu vorgegebener Energie U interpretiert werden:

$$Z = \frac{1}{h^{3N} N!} \int_{H(p,q)=U} dp dq \quad (13)$$

also Entropie $\propto \ln(\text{Zahl der Zustände})$

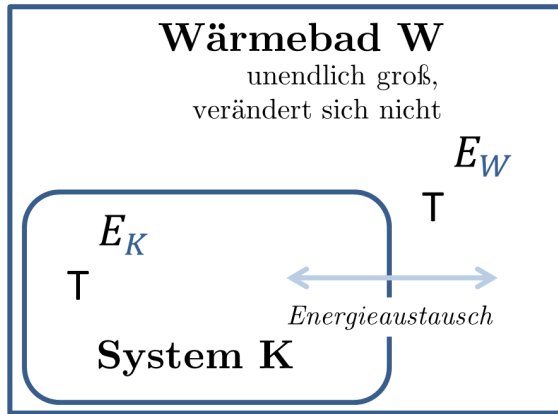
- Rechnungen in der mikrokanonischen Gesamtheit sind recht kompliziert wegen der Randbedingung $H = U$. Besser sind andere Gesamtheiten.
- Statistik erfordert den Limes großer Teilchenzahlen

Wichtig: löst man numerisch Bewegungsgleichungen unter Energieerhaltung, summiert man im mikrokanonischen Ensemble

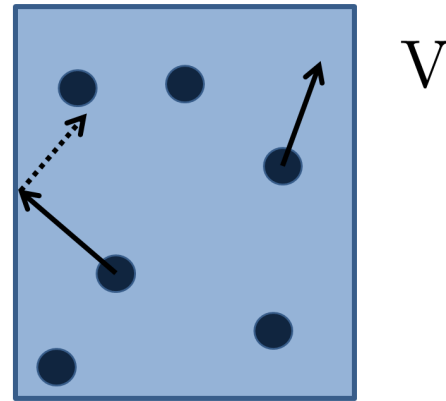
2.3 Kanonisches Ensemble

Wir betrachten jetzt ein System in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T , gemäß Abbildung 3a.

³ U steht in β , V steckt in $d\Gamma$, N steckt in Dimension des Phasenraums. Z ist eine thermodynamische Größe. Im mikrokanonischen Ensemble führt Z auf S .



(a) kanonische Gesamtheit



(b) Volumenbegriff, ideales Gas

Abbildung 3

- Die Gesamtenergie $E = E_w + E_k$.
- Das Wärmebad soll sehr groß sein, sodass $\frac{E_K}{E} \ll 1$
- Die Energie in K ist nicht mehr Konstanz, nur im Gesamtsystem. Das Gesamtsystem ist mikrokanonisch, alle Gesamtzustände sind gleich wahrscheinlich. Gesucht ist die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(p, q) = \rho_i$ der Mikrozustände in K.
- ρ_i gehört zum Mikrozustand mit Energie E_i (siehe links) Zahl der Makrozustände des Gesamtsystems ist gleich der Zahl der Mikrozustände des Wärmebads mit $E_w = E - E_i$ (bzw. gleich der mikrokanonischen Zustandssumme)

$$Z_w(E - E_i) : \rho_i \propto Z_w(E - E_i) \quad (14)$$

Betrachte Entropie

$$S_w = k_B \ln(Z_w(E - E_i)) \quad (15)$$

$$= k_B \ln(Z_w(E)) - \underbrace{k_B \frac{\partial \ln(Z_w(E - E_i))}{\partial E_i}}_{\frac{1}{T}} E_i \quad (E \gg E_i) \quad (16)$$

$$\Rightarrow Z_w(E - E_i) = Z_w(E) e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \quad (17)$$

$$\Rightarrow \rho_i \propto e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \quad (\text{'BOLTZMANN-Faktor'}) \quad (18)$$

$$\Rightarrow \rho(p, q) \propto e^{-\beta H(p, q)} \quad \text{mit: } \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (19)$$

Die Normierung von ρ verlangt:

$$\rho(p, q) = \frac{e^{-\beta H(p, q)}}{Z} \quad (20)$$

mit

$$Z = \int d\Gamma e^{-\beta H(p, q)} \quad (21)$$

der **Zustandssumme der kanonischen Gesamtheit**. Integral erstreckt sich über den gesamten Phasenraum. **Thermodynamik:**

$$S = -k_B \int d\Gamma \rho \ln(\rho) = -k_B \int d\Gamma \frac{e^{-\beta H}}{Z} (-\beta H - \ln(Z)) \quad (22)$$

$$= \frac{1}{T} \underbrace{\int d\Gamma H \rho}_{U} + k_B \ln(Z) \int d\Gamma \rho \quad (23)$$

$$= \frac{U}{T} + k_B \ln(Z) \quad (24)$$

$$\Rightarrow TS = U + k_B T \ln(Z) \quad (F = U - TS) \quad (25)$$

$$\Rightarrow \text{Freie Energie: } F = -k_B T \ln(Z) = F(T, V, N) \quad (26)$$

Beispiel: (Ideales Gas, gemäß Abbildung 3b)

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}, \quad \mathbf{p}_i = (p_x, p_y, p_z)$$

Kanonische Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z(T, V, N) &= \frac{1}{h^{3N} N!} \int d\Gamma e^{-\beta \sum \frac{p_i^2}{2m}} = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \int dp_1^3 \dots dp_N^3 e^{-\beta \frac{p_1^2}{2m}} \dots e^{-\beta \frac{p_N^2}{2m}} \\ &= \frac{V^N}{h^{3N} N!} \prod_{i=1}^N \underbrace{\int dp_i^3 e^{-\beta \frac{p_i^2}{2m}}}_{\sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}}} \quad (i = 1 \dots N \text{ Teilchen}) \\ &= \frac{V^N}{h^{3N} N!} \prod_{i=1}^{3N} \int dp_i e^{-\beta \frac{p_i^2}{2m}} \quad (i = 1 \dots 3N, N \text{ Teilchen mit } (x, y, z)) \\ &= \frac{V^N}{h^{3N} N!} \left(\sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \right)^{3N} \end{aligned}$$

Für die freie Energie verwenden wir die STIRLING-Formel für große N:

$$\ln(N!) \approx N \ln(N) - N \quad (27)$$

$$\Rightarrow F = -k_B T \ln(Z) = -k_B T N \left[\ln\left(\frac{V}{N}\right) + \frac{3}{2} \ln\left(\frac{2m\pi}{h^3} k_B T\right) + 1 \right] \quad (28)$$

$$\Rightarrow p = - \left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_{T, N} = \frac{N k_B T}{V} \quad (29)$$

ideale Gasgleichung

$$pV = N k_B T \quad (30)$$

Es folgt also eine der Gasgleichungen. Die andere folgt aus

$$U = F + TS = F + T \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{V,N} = \frac{3}{2} N k_B T \quad (31)$$

Diskussion:

- gilt auch für großkanonische Gesamtheiten
- Berechnung zu verschiedenen Gesamtheiten führen zu gleichen thermodynamischen Potentialen (also 'gleichen Ergebnissen'). → Nach LEGENDRE-Transformation, Zustandssummen verschieden.
Rechnungen jedoch verschieden, Numerik auch! (z.B. Resultate)
- Phasenraumintegrale werden meist nicht numerisch berechnet (*Ausblick*: MD, MC)

2.4 Weitere Resultate der statistischen Mechanik

- **Extremalprinzip:** im Gleichgewicht werden thermodynamische Potentiale extremal⁴, z. B.

$$S(U, V, N) \quad \text{maximal} \quad (32)$$

$$F(T, V, N), U(S, V, N) \quad \text{minimal} \quad (33)$$

- **Schwankungen:** Die Wärmekapazität

$$c_v = T \left. \frac{\partial^2 U}{\partial S^2} \right|_{V,N} = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{V,N} = \frac{1}{k_B T^2} \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle \quad (34)$$

$$= \frac{1}{k_B T^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) \quad (\text{numerisch geschickt}) \quad (35)$$

- **Gleichverteilungssatz:** jede quadratische Form in H gibt einen Beitrag $\frac{k_B T}{2}$ in U.
Beispiel: (ideales Gas)

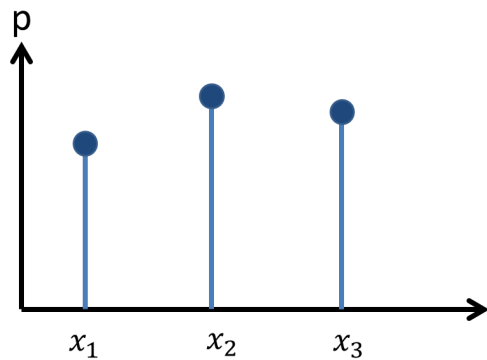
$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$$

mit $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \Rightarrow U = \frac{3}{2} N k_B T$ (gut für Tests der Numerik)

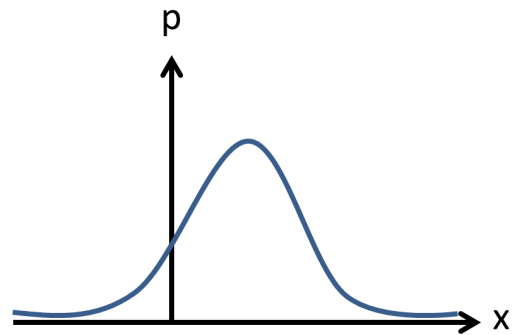
3 Monte Carlo Verfahren

3.1 Zufallszahlen

Statistik wichtig für Physik und andere Disziplinen. Physikalische Probleme sind oft ähnlich. Statt beispielsweise 10^{23} Atomen werden nur wenige betrachtet, dann 'hochgerechnet'.
⇒ Zahl der Freiheitsgrade sinnvoll beschränken. Häufig wichtig für 'Stichprobe': zufällige Auswahl → also Zufallszahl.



(a) Würfelwurf



(b) kontinuierliche Verteilung von $p(x)$: Die Wahrscheinlichkeitsdichte

Abbildung 4

Im einfachsten Fall: *diskrete Zufallszahlen* $x_1 \dots x_N$

Beispiel: (Würfel, Abbildung 4a)

$$x_1 = 1, \dots, x_6 = 1, (N = 6)$$

Die **Wahrscheinlichkeitsdichte** ist definiert über die

$$p_i = \frac{\text{Häufigkeit für Auftreten von } x_i}{\text{Gesamtzahl der Messungen}} = \frac{m_i}{M} \Big|_{M \rightarrow \infty} \quad (36)$$

$$\sum_{i=1}^N p_i = 1$$

Beispiel: (zurück zum Würfel)

$$p_i = \frac{1}{6}, i = \{1, \dots, 6\}$$

Der **Mittelwert** ist definiert über

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^N p_i x_i = \sum_{i=1}^N \frac{M_i x_i}{M} \Big|_{M \rightarrow \infty} \quad (37)$$

und entsprechend bei kontinuierlicher Verteilung $p(x)$ die 'Wahrscheinlichkeitsdichte' (siehe Abbildung 4b)

$$p(x) dx = \frac{dM_x}{M} \quad (38)$$

⁴genau genommen wir ρ so gewählt

Normierung:

$$\int dx p(x) = 1 \quad (39)$$

$$\bar{x} = \int dx p(x) x \quad (40)$$

Schwankung

$$\overline{(\Delta x)^2} = \sum_{i=1}^N p_i (x_i - \bar{x})^2 \hat{=} \int dx p(x) (x - \bar{x})^2 \quad (41)$$

häufig wichtig ist auch

$$\overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2 - \underbrace{2\bar{x}x}_{=0, \text{ s.u.}} - \bar{x}^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \quad (42)$$

5

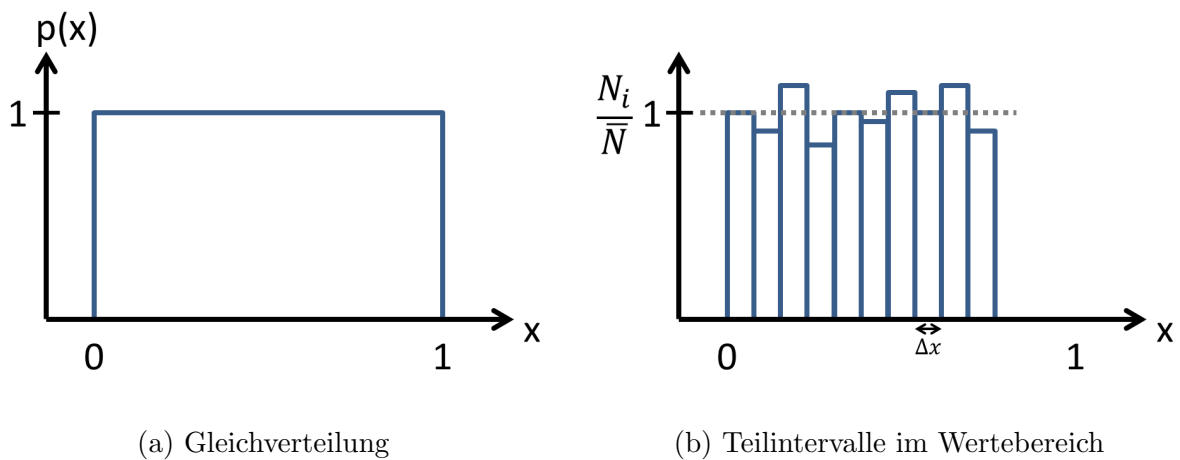


Abbildung 5

Beispiel:(Gleichverteilung, Abbildung 5a)

$$p(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \Rightarrow \bar{x} = \int_0^1 dx x = \frac{1}{2}$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = \int_0^1 dx (x - \frac{1}{2})^2 \approx \int_0^1 dx (x^2 - \frac{1}{4}) = \frac{1}{3} - \frac{1}{4} = \frac{1}{12}$$

6

⁵mittelt sich zu Null, da nach oben gleiche Abweichung wie nach unten

⁶Die Wurzel aus (43) wäre der Wert für die Breite

Erzeugung von Zufallszahlen im Rechner ...geht nicht, da es beim Rechner, einer deterministischen Maschine, keinen Zufall gibt. \Rightarrow 'Pseudo-Zufallszahlen', deterministische Kette von Zahlen x_i , die bestimmten Anforderungen genügen:

- definierter Wertebereich, **z.B.** $[0, 1]$ (*double*), $[0 : RAND_MAX]$ (*Integer*)
- wohldefinierte Wahrscheinlichkeitsverteilung, gleichverteilt (Abb. 5a) **z.B.**
- lange Periode: x_i ist immer periodisch denn
 - Rechner speichert Information
 - Speicher begrenzt \Rightarrow endliche Zahl von Zuständen
- x_i deterministisch \Rightarrow aus *einem* (gleichen) Zustand folgt immer die gleiche Kette $\Rightarrow x_i$ sind periodisch
- großer Wertevorrat (nicht immer nötig) jedoch unmöglich, deshalb Periode lang, **z.B.** 1 von N aussuchen
- keine Korrelation, d.h. kein 'einfacher' Zusammenhang zwischen den x_i , **z.B.**

$$x_{i+k} = x_i$$

geht nicht wegen der Periode (hier wäre die Periode k).

Methode 1 linear konvergente Zufallsgeneratoren ⁷

$$x_{i+1} = (ax_i + b) \bmod m \quad (43)$$

$$(44)$$

x_i : Integer, m : Wertebereich und a, b : 'magischen Zahlen'.

Man kann zeigen: Der Algorithmus hat keine Zyklen $< m$ wenn:

1. b und m teilerfremd
2. $a - 1$ ein Vielfaches von jedem Primfaktor von m
3. $a - 1$ ein Vielfaches von 4, falls 4 Teiler von m

Beispiele:

- $a = 137, \quad b = 187, \quad m = 256$
- $a = 1366, \quad b = 150887, \quad m = 714025$

Mögliche Testverfahren dafür sind:

1. Histogramm bezüglich Gleichmäßigkeit der Verteilung: Man teilt den Wertebereich in I Teilintervalle der Länge Δx . Es gilt $I \cdot \Delta x = 1$. Ziehe N Zufallszahlen, N_i im Teilintervall i , siehe Abbildung 5b.

$$N = \sum_{i=1}^I N_i, \quad \overline{N_i} = \frac{N_i}{I} = N \Delta x \quad (45)$$

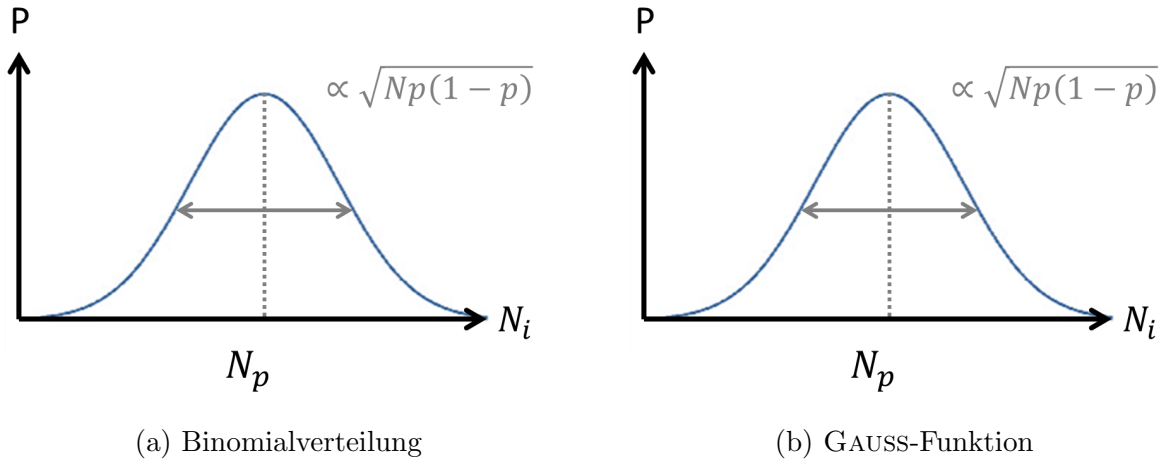


Abbildung 6

- $\frac{N_i}{N}$ sollte für $N \rightarrow \infty$ gegen $\frac{N}{I}$ gehen
- Konvergenz (Fehler) Betrachte 1. Teilintervall (als Beispiel) Wahrscheinlichkeit, dass von N Zufallszahlen N_1 im 1. Teilintervall sind:
Anschauliche Darstellung, siehe Abbildung 6a.

$$p_N(N_1) = p^{N_1}(1-p)^{N-N_1} \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} \quad \text{'Binomialverteilung'} \quad (46)$$

$$\text{mit } p = \Delta x \quad (47)$$

Die Binomialverteilung geht in Grenzfällen in einfachere, d.h. analytische Verteilungen über: In diesem Beispiel geht sie für $N \rightarrow \infty$ und konstantes p in die **Gaussverteilung** über.

$$p_N(N_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Np(1-p)}} e^{-\frac{(N_1 - Np)^2}{2Np(1-p)}} \quad (48)$$

Der Beweis hierfür ist etwas komplizierter, unter Anderem mit STIRLING-Formel $\ln(N!) = N \ln(N) - N + \frac{1}{2} \ln(2\pi N)$.

Die Eigenschaften der GAUSS-Funktion, siehe auch Abbildung 6b, auf einen Blick:

- Mittelwert: $\overline{N_1} = Np$
- Schwankung: $\chi^2 = \overline{(N_1 - \overline{N_1})^2} \propto Np(1-p)$
- \Rightarrow relativer Fehler: $\frac{\sqrt{\chi^2}}{\overline{N_1}} \propto \frac{\sqrt{N}}{N} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$

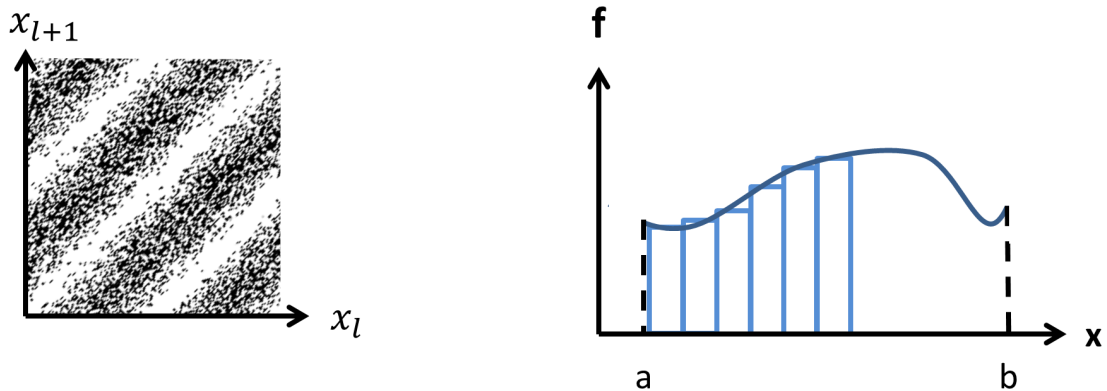
2. Weiteres Testverfahren:

Auf Korrelation prüfen. Aufeinanderfolgende Zufallszahlen werden als Punkte in einem d -dimensionalen Einheitskubus dargestellt:

$$(x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+(d-1)}) \in \mathbb{R}^d \quad (49)$$

Falls Korrelation vorhanden: Punkte füllen nicht den Raum sondern liegen auf $(d-1)$ -dimensionalen Ebenen.

⁷Anmerkung: Der Rest bei Ganzzahldivision $\text{mod} \hat{=} \%$ in C!



(a) Musterbildung als Beispiel für schlechten Zufallszahlengenerator

(b) Integral

Abbildung 7

Beispiel: $d = 2 \rightarrow$ Abbildung 7a

Muster $\hat{=}$ schlechter Zufallszahlengenerator.

3. Momente testen:

Bilde

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^n \quad (50)$$

Falls zufällig verteilte x_i (also gleichverteilt) gilt analytisch:

$$\overline{x_i^n} = \int_0^1 dx x_i^n = \frac{1}{n+1} \quad (51)$$

Dies muss auch stimmen für eine große Zahl N von Zufallszahlen:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^n = \frac{1}{n+1} \quad (52)$$

- Es existieren zahlreiche Weiterentwicklungen des linear-konvergenten Zufallszahlen-Generators. (siehe z.B. `rand()`), immer in C implementiert aber mit verschiedenen Methoden realisiert.
- bessere Zufallszahlen-Generatoren sind:
 - Schieberegister (shift, Tanswert...TODO) Generator: Speichert Array von Zufallszahlen und berechnet die nächste Zufallszahl auf Basis mehrerer Vorgänger, **z.B** Kirpatrick-Stall `z[250]`
 - * $Z = Z[0] \underbrace{\quad \quad \quad}_{\text{XOR linewise}} Z[147]$
 - * dann wird Feld umsortiert
 - * 250 Startwerte mit anderem Zufallszahlen-Generator
- seed reproduzierbar halten (wegen Reproduzierbarkeit wirtschaftlicher Ereignisse)
- Programmbibliotheken!
- Häufig sind anderen Verteilungsfunktionen gewünscht \Rightarrow Transformationen

3.2 Monte Carlo Integration

Betrachten Integral (Abb. 7b)

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (53)$$

Konventionelle numerische Methode:

Zerlegung in kleine Intervalle Δx :

$$I_n = \sum_{\nu=1}^n \Delta x f(x_\nu) \quad \text{'Rechteckregel'} \quad (54)$$

für $n \rightarrow \infty \Rightarrow I_N \rightarrow I$ (falls integrierbar).

Besser ist die Trapezregel oder die von Simpson. Sie sind im Prinzip 'gleich', unterscheiden sich allerdings bezüglich ihrer Konvergenz.

Verallgemeinerung auf höhere Dimensionen:

d-dimensionales Integral, n Unterteilungen (Stützstellen) pro Achse

$\Rightarrow n^d$ Hypercubi der Größe $(\Delta x)^d$ und damit

$\Rightarrow n^d$ Terme müssen summiert werden

Für kleine d kein Problem, für große jedoch absolut unmöglich.

Beispiel: (Phasenraumintegral)

3TL, Freiheitsgrade $\mathbf{r}, \mathbf{p} \Rightarrow$ Integral im Phasenraum:

$$\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}_2 d^3\mathbf{p}_3 \dots$$

ist immerhin 18-dimensional mit

$$n = 100, d = 18 \Rightarrow n^d = 100^{18} = 10^{36} \text{ Summanden (Rechenoperationen)}$$

Unsere Cluster schaffen 10^{10} FLOPS \Rightarrow Summation dauert $10^{36}/10^{10} = 10^{26}s$

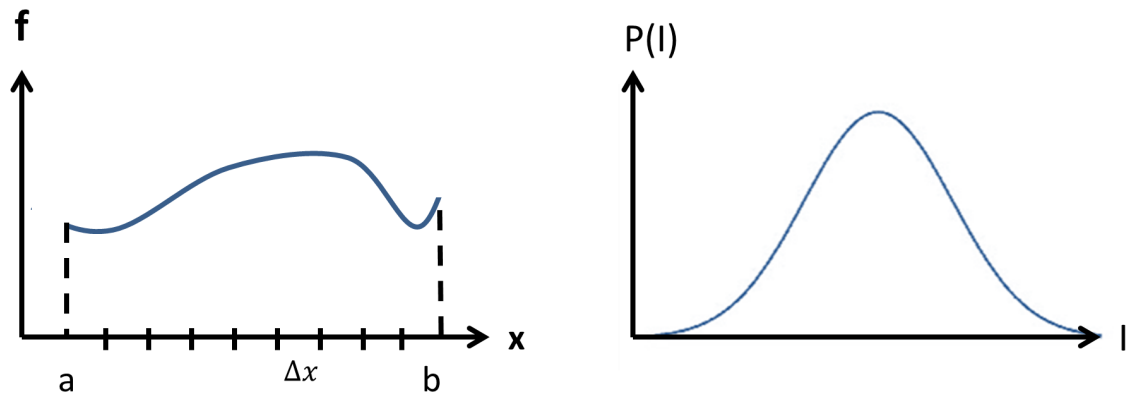
(Vergleich: alter des Universums ist $10^{19}s$!)

Wir brauchen also ganz andere Methoden für hochdimensionale Integrale - die Statistik!

Dafür betrachten wir wieder (der Einfachheit halber) folgendes Integral:

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (55)$$

mit x_1, \dots, x_N als N gleichverteilte Zufallszahlen über $[a, b]$. Wir zerlegen das Intervall in n Kästchen der Länge Δx , gemäß Abbildung 8a. N_μ sei weiterhin die Anzahl der x_i im



(a) Integral in Intervallzerlegung

(b) Integral

Abbildung 8

ν ten Teilintervall. Dann gilt

$$n \cdot \Delta x = b - a \quad \Rightarrow \quad \frac{\bar{N}_\nu}{N} = \frac{1}{n} = \frac{\Delta x}{b - a} \quad (56)$$

$$\Rightarrow I = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{\nu=1}^N \Delta x f(x_\nu) \quad (\text{Rechteckregel}) \quad (57)$$

$$= \sum_{\nu=1}^n (b - a) \frac{\bar{N}_\nu}{N} f(x_\nu) = \frac{b - a}{N} \sum_{\nu=1}^n \underbrace{\bar{N}_\nu f(x_\nu)}_{\approx \sum_{x_j \in [\cdot]_\nu} f(x_j)} \quad (58)$$

$$= \frac{b - a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (59)$$

Diese Formel ist nicht auf $d = 1$ beschränkt, sondern gilt auch in höheren Dimensionen:

$$I \approx \frac{V_d}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{x}_i) \quad (60)$$

d.h. das Integral ist der Mittelwert der Funktionswerte an zufälligen Stützstellen \mathbf{x}_i .

Fehler: (für $I = \int_0^1 f(x) dx$)

$\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ sei spezielle Folge von Zufallszahlen mit I_1 als Integralwert (also Resultat).

Eine andere Folge erzeugt anderes Ergebnis I_2, \dots

\Rightarrow Es existiert eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(I)$ um dafür einen bestimmten Integralwert I zu erhalten. (Abb. 8b) Betrachte deswegen unendliche viele Ketten⁸ von Zufallszahlen der Länge N :

⁸ \rightarrow exaktes Resultat, aber wie groß ist dann die Schwankung?

$\Rightarrow P(I)dI$ wäre dann die Wahrscheinlichkeit, dass I im I -ten Intervall dI um I liegt.

$$\langle I \rangle = \int dI P(I) I \quad \left(\text{mit } I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = I(x_1, x_2, \dots, x_N) \right) \quad (61)$$

$$= \int dx_1, \dots, dx_N \rho(x_1) \dots \rho(x_N) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (62)$$

$$= \int_0^1 dx f(x) \quad (63)$$

unendlich viele Folgen von Zufallszahlen der Länge N liefern gemittelt das exakte Ergebnis! Die Berechnung des Fehlers folgt dann:

$$\langle (I - \langle I \rangle)^2 \rangle = \langle I^2 \rangle - \langle I \rangle^2 \quad (64)$$

$$= \left\langle \frac{1}{N^2} \left(\sum_{i=1}^N f(x_i) \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right\rangle^2 \quad (65)$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \langle f(x_i) f(x_j) \rangle - \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \langle f(x_i) \rangle \langle f(x_j) \rangle \quad (66)$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \langle f(x_i)^2 \rangle - \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \langle f(x_i) \rangle^2 + \mathcal{O} \quad \text{für } i = j \quad (67)$$

weil

$$\langle f(x_i) f(x_j) \rangle = \langle f(x_i) \rangle \langle f(x_j) \rangle \quad \text{für } i \neq j$$

brauche

$$\int dx_1 dx_2 \rho(x_1) \rho(x_2) f(x_1) f(x_2) \quad (68)$$

$$= \int dx_1 \rho(x_1) f(x_1) \underbrace{\int dx_2 \rho(x_2)}_{=1} \times \int dx_2 \rho(x_2) f(x_2) \cdot \underbrace{\int dx_1 \rho(x_1)}_{=1} \quad (69)$$

aber

$$\int dx_1 \rho(x_1) f(x_1)^2 \neq \left(\int dx_1 \rho(x_1) f(x_1) \right)^2$$

$$\Rightarrow \langle \Delta I \rangle^2 = \frac{1}{N} (\langle f(x)^2 \rangle - \langle f(x) \rangle^2)$$

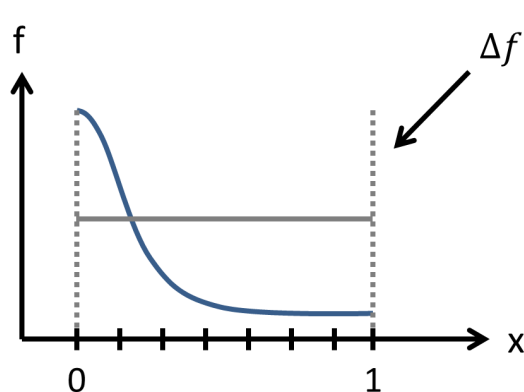
Diskussion:

1) Konvergenz:

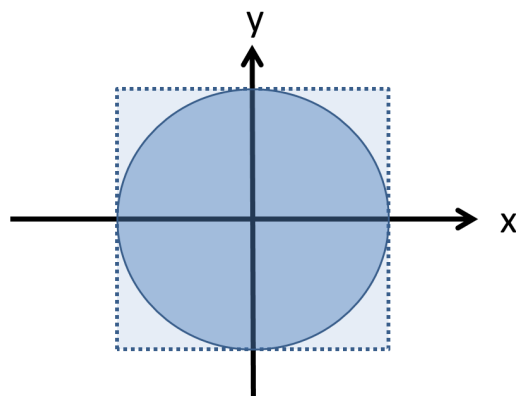
$$\Delta I \propto \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (70)$$

Zum Vergleich der Konvergenz mit herkömmlichen Methoden, **z.B.** der Trapezregel. Ihr Fehler in einer Dimension ist $\propto h^2$. N Rechenschritte: $h \propto N^{-\frac{1}{d}}$ in d Dimensionen. $\Rightarrow \Delta I \propto N^{-\frac{2}{d}}$

\Rightarrow für $d < 4$ ist Monte Carlo 'besser' als Trapezregel



(a) Dichtefluktuation



(b) Volumen einer 2-dimensionalen Kugel

Abbildung 9

- 2) $I \rightarrow \langle I \rangle$ für $N \rightarrow \infty$. Eine ∞ -lange Kette (o. Folge) führt (auch) zum exakten Resultat, d.h. das Verfahren ist selbstmittelnd.
- 3) Verfahren gut, wenn f möglichst konstant. Anschaulich in Abbildung . Man sieht (Abb. 9a), dass das Verfahren exakt ist, falls $f = \text{const.}$
- 4) Der Fehler lässt sich während der Integration berechnen und sollte endlich bleiben.

Beispiel: (Volumen einer D-Dimensionalen Einheitskugel)

Wir starten in 2D, gemäß Abbildung 9b.

$$f(x, y) = \begin{cases} 1 & x^2 + y^2 < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Flächenberechnung:

$$I = \int_0^1 dx \int_0^1 dy f(x, y) = \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy f(x, y) \approx \frac{4}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i, y_i)$$

mit $[x_i, y_i]$ gleichverteilt aus $[-1, 1]$.

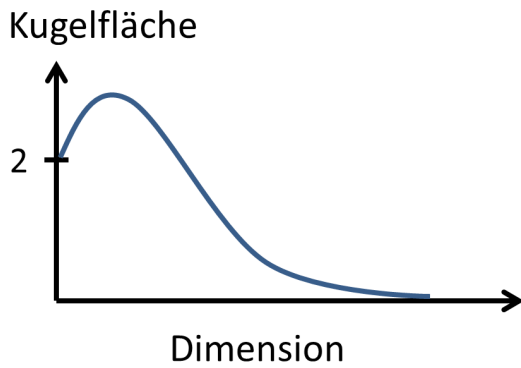
Zeige Programm: Das Volumen verschwindet für hohe Dimensionen: Eindimensionale Betrachtung: Intervall geht exakt von $[-1, 1]$, bei einem Kreis in $[-1, 1] \times [-1, 1]$ fallen schon die Ecken weg. Das Volumen auf den Einheitsradius ist nicht mehr ganz so groß. Bei drei Dimensionen fallen schon die 8 Ecken weg, daher nimmt das relative Volumen für große Dimensionen ab. (Abbildung 10a)

→ Wie kann man das Verfahren verbessern?

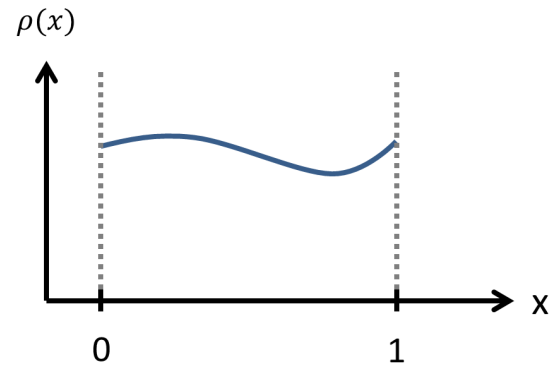
Verbesserung:

$$(\Delta I)^2 = \frac{1}{N} \underbrace{(\langle f^2(x) \rangle - \langle f(x) \rangle^2)}_{\text{Schwankungsbreite der Fkt}} \quad (71)$$

Idee: Transformation, so dass der Integrand $\approx \text{const.}$, dafür aber Zufallszahl *nicht* gleichverteilt.

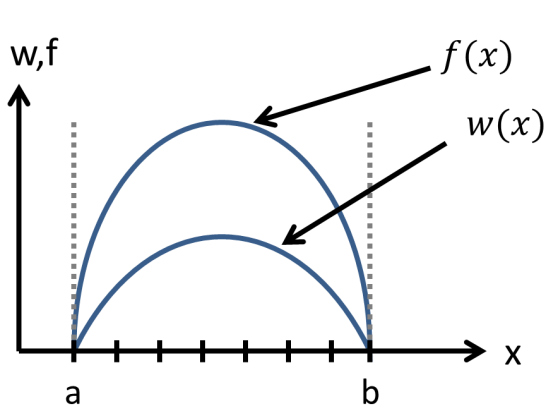


(a) Relatives Volumen für wachsende Dimension

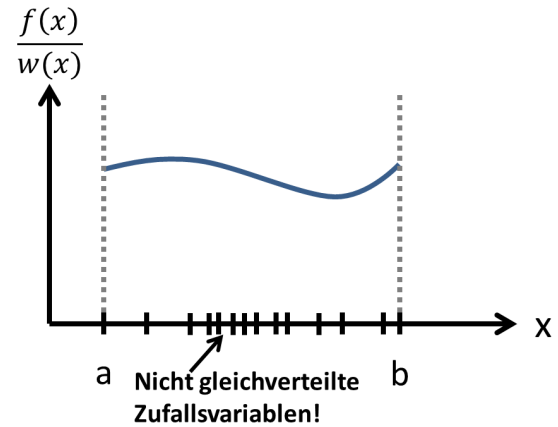


(b) Problemstellung

Abbildung 10



(a)



(b)

Abbildung 11: Importance sampling

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(y_i)}{w(y_i)} \quad (72)$$

wobei y_i eine Folge von Zufallszahlen gemäß Verteilung $w(y)$ mit $w(y) > 0$, $\int w(y) dy = 1$. Beweis:

$$\langle I \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(y_i)}{w(y_i)} \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\langle \frac{f(y_i)}{w(y_i)} \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int dy_i w(y_i) \frac{f(y_i)}{w(y_i)} = \int dx f(x) \quad (73)$$

Fehler:

$$\Delta I = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\left\langle \left(\frac{f}{w} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{f}{w} \right\rangle^2} \quad (74)$$

\Rightarrow für kleine Fehler: w so wählen, dass $\frac{f}{w} \approx \text{const.}$ Man muss allerdings w integrieren können und w muss f ähnlich sein und man braucht Zufallszahlen mit einer vorgegebenen Verteilung! (Abbildung 11)

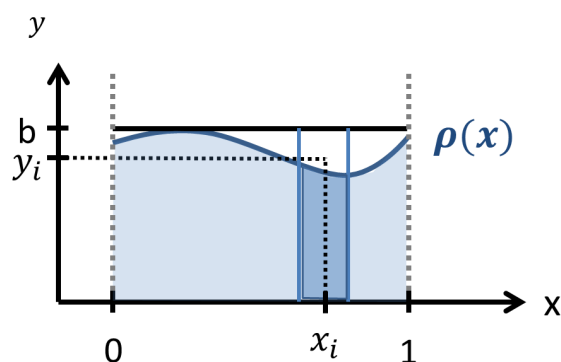
⇒ Mann nennt dieses Verfahren: **Importance sampling**, (weil 'wichtige' $\hat{=}$ 'hohe' Werte des Integranden $f(x)$ in der ursprünglichen Funktion häufiger genommen werden, im Gegensatz zum herkömmlichen **simple sampling**)

⇒ die Wurzel N im Fehler ist geblieben. Leider konnten wir die Konvergenz dadurch nicht verstärken. Neues Problem hierbei ist jetzt:

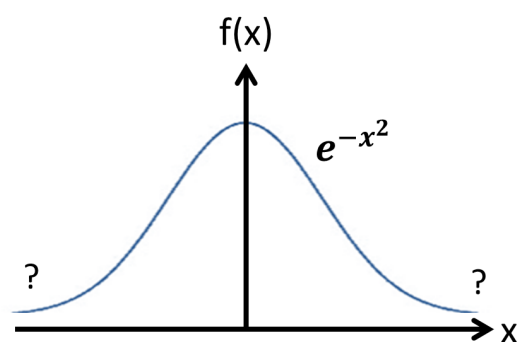
3.3 Zufallszahlen einer vorgegebenen Verteilung

Problem: (Problemstellung siehe Abbildung 10b). Zufallszahlen x_i aus einem Intervall berechnen mit einer Verteilung $\rho(x)$ mit

- $\rho(x) > 0$
- $\int_0^1 dy \rho(x) = 1$.



(a) Rejection Method



(b) GAUSS-Funktion

Abbildung 12

a) **Rejection-Method** nach VON NEUMANN (1947)
(Abbildung 12a). betrachte Paar von Zufallszahlen, $x_i \in [0, 1]$, $y_i \in [0, b]$ mit $b = \text{Max}(\rho(x))$.

→ wenn $y_i < \rho(x_i) \Rightarrow x_i$ wird akzeptiert mit $\xi_i = x_i$

→ wenn $y_i > \rho(x_i) \Rightarrow x_i$ wird nicht akzeptiert.

⇒ Folge von Zufallszahlen ξ_i . Zahl der $\xi_i \in \Delta x$ ist proportional zur Fläche $\rho(x) \cdot \Delta x$ und damit proportional zu $\rho(x)$.

Problem: viele Züge notwendig, wenn selten akzeptiert wird.

Schlecht wäre zum Beispiel: die Betrags-Exponentialfunktion (GAUSSfunktion) benötigt ein großes x -Intervall: Abbildung 12b.

Gut wäre dafür aber: Kugeln - Vektoren innerhalb (oder auf) Einheitskreis

b) **Transformationsmethode**

betrachte monotone Funktion (Abbildung 10b) . Dabei seien wieder x_i gleichverteilte Zufallsvariablen aus $x_i \in [0, 1]$ und $y_i = f(x_i)$. Frage: Wie sind die verteilt? ⁹

N Zufallszahlen

$\Rightarrow N \cdot \Delta x$ fallen in das Intervall Δx . Die entsprechenden abgebildeten Zufallszahlen $y_i = f(x_i)$ fallen in Δy um $f(x)$.

\Rightarrow Änderung der Punktdichte $\rho(y)\Delta y = \Delta x$.

Der limes $\Delta x \rightarrow 0$ mit

$$\rho(y) = \frac{dx}{dy}$$

soll vorgegeben werden. Wie lautet dann $f(x)$?

$$\Rightarrow \int_0^x dx' = \int \rho(y) dy \Rightarrow x(y) = \int \rho(y) dy = x(y) = f^{-1}(y) \quad (75)$$

$$f(x) = \left(\int \rho(y) dy \right)^{-1} \quad (76)$$

$$\Rightarrow f(x_i) = y_i \text{ sind gesuchte ZZ}$$

also: $\rho(y)$ gegebene Verteilung muss man

- 1) Integrieren
- 2) Invertieren

Beispiel:

$$\rho(y) = \begin{cases} e^{-y} & \text{für } y \geq 0 \\ 0 & \text{für } y < 0. \end{cases}$$

und wie gewünscht

- Normierung $\int_0^\infty \rho(y) dy = 1$
- Positiv $\rho(y) \geq 0$

1. Es gilt:

$$\int_0^y dy' \rho(y') = 1 - e^{-y} \equiv x(y)$$

2. Umkehrfunktion:

$$y = -\ln(1 - x) = f(x)$$

\Rightarrow ziehe gleichverteilte Zufallszahl $x_i \in [0, 1]$ (nicht die 1 selber!)

$\Rightarrow y_i = -\ln(1 - x_i)$ sind exponentiell verteilte Zufallszahlen $\in [0, \infty]$.

⁹Dafür muss man die Wahrscheinlichkeiten umrechnen. In ein Δx fallen irgendwelche Zufallsvariablen rein und werden auf Δy abgebildet, das ja kleiner sein kann. Die dichte in Δy sowie Δx kann also verschieden sein.

Nachteil: ¹⁰ Man muss die gewünschte Verteilung $\rho(y)$ erst integrieren und dann zusätzlich auch invertieren können. Dies geht nicht bei **z.B.** der GAUSS-Verteilung

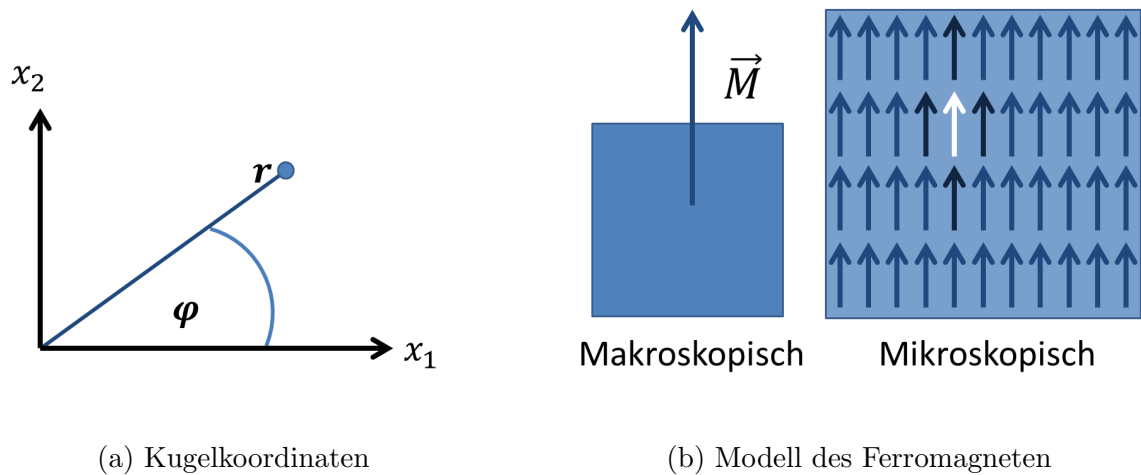
c) **Gauß-Verteilung** (Normalverteilung)

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

Wieder gilt:

- Normierung $\int_0^\infty \rho(y) dy = 1$
- Positiv $\rho(y) > 0$

Sie ist nicht analytisch (bestimmt) integrierbar, sodass die Transformationsmethode nicht anwendbar ist. Dafür gibt es aber einen Trick:



(a) Kugelkoordinaten

(b) Modell des Ferromagneten

Abbildung 13

betrachte eine zweidimensionale Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2\sigma^2}} = \rho(x_1) \cdot \rho(x_2) \quad (77)$$

die Zahl der Punkte im Intervall dx_1, dx_2 ist:

$$\frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2\sigma^2}} dx_1 dx_2 = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} r dr d\phi \quad \left(\text{subst: } u = \frac{r^2}{2\sigma^2} \right) \quad (78)$$

$$= \frac{1}{2\pi} e^{-u} du d\phi \quad (79)$$

mit Koordinaten (Abb. 13a)

$$x_1 = r \cos(\phi) = \sigma \sqrt{2u} \cos(\phi)$$

$$x_2 = r \sin(\phi) = \sigma \sqrt{2u} \sin(\phi)$$

also...

¹⁰Der Computer ist nicht so schnell beim logarithmieren...deswegen ist die rejection Methode diesbezüglich interessanter.

... ziehe:

- Zufallszahl ϕ_i aus $[0, 2\pi]$
- Zufallszahl y_i ist exp-verteilt aus $[0, \infty]$

... rechne:

- $x_i = \sigma \sqrt{2u_i} \cos(\phi)$
- $x'_i = \sigma \sqrt{2u_i} \sin(\phi)$

praktisch:

$$\begin{aligned} x_{2i} &= \sigma \sqrt{-2 \ln(1 - y_{2i})} \cos(2\pi y_{2i-1}) \\ \text{mit } y_i &\text{ ZZ} \in [0, 1) \text{ gleichverteilt} \end{aligned} \quad (80)$$

Beispiel: Wir nehmen das Integral

$$\int_0^{2\pi} x e^x dx \underbrace{=}_{\text{analytisch}} e^{2\pi}(2\pi - 1) + 1$$

Importance:

$$\rho(y) = \frac{e^y}{e^{2\pi} - 1} \quad \left(\text{normiert } \int_0^{2\pi} e^y dy = 1 \right)$$

$$\int_0^y \rho(y') dy' = \frac{e^y - 1}{e^{2\pi} - 1} = x(y)$$

$$\Rightarrow y = \ln(\underbrace{(e^{2\pi} - 1)}_{\text{Norm.-Konst}} x + 1)$$

$$\Rightarrow I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(y_i)}{\rho(y_i)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i (e^{2\pi} - 1)$$

wobei $x_i \in [0, 1)$.

3.4 Ising Modell

Das ISINGModell¹¹ findet zahlreiche Anwendungen (**z.B.** in den Sozialwissenschaften, in der Physik für Fest-Flüssig-Übergänge oder mehr noch für *magnetische Eigenschaften*, wie etwa dem Ferromagneten). Es ist *sehr einfach* und zudem auch *exakt lösbar* für Lösungen im 1d (ISING), 2d (ONSAGER) Fall. (\rightarrow Nobelpreis)

Wir benutzen das Modell eines Ferromagneten, gemäß Abbildung 13b.

Makroskopisch ist eine Gesamtmagnetisierung zu beobachten. Auf mikroskopischer Ebene findet man Atome mit 'Spin', atomare Momente, die in eine Richtung ausgerichtet

¹¹Zweizustandsmodell: minimales Modell für ein reales system, jeder einzelne Freiheitsgrad hat nur zwei Zustände, ist aber das erste Modell das einen Phasenübergang zeigt. Es ist im 2d Fall aber exakt lösbar und daher gut für uns.

sind. Sie wechselwirken mit ihren umliegenden Nachbarn¹². Es gibt Vorzugsrichtungen, abhängig von den Kristallstrukturen (Wegen Spin-Bahn Wechselwirkungen)

⇒ Vorzugsachse (**Anisotropie**). Der Kristall hat eine leichte Achse, d.h. Spins wollen in diese Richtung stehen.

⇒ nur noch zwei Zustände! ('rauf' ↑ oder 'runter' ↓)

- Gitter aus Spins, im einfachsten Fall $S = \pm 1$, sodass beispielsweise S_i nur Index $i = \{+, -\}$ hat.

- Hamilton-Funktion¹³

$$H = - \sum_{i=1}^N B S_i \quad (81)$$

- $B > 0$: $S_i = 1$ günstig
- $B < 0$: $S_i = -1$ günstig
- $B = 0$; $S_i = \pm 1$ unmöglich
- Hinzüglich einer **Wechselwirkung**: Überlapp der Wellenfunktion führt zu Austauschenergie J zwischen denjenigen Spins, die nächste Nachbarn sind. (Dies ist nicht die makroskopische (Dipol-)Wechselwirkung)

$$H(S_1, S_2, \dots, S_N) = -J \underbrace{\sum_{i,j=1; i,j \text{ NN}}^N S_i S_j}_{\text{Nachbarn auf dem Gitter jedes Paar einmal}} - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (82)$$

(B gibt vor, welche Ausrichtung energetisch günstiger ist. Beispiel: $\uparrow\uparrow, B : \uparrow\uparrow$)

- $J > 0$: $\uparrow\uparrow$ $E = -J$ günstig → Ferromagnet
- $J < 0$: $\uparrow\downarrow$ $E = -J$ günstig → eventuell Antiferromagnet ($\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$)

Im Folgen $J > 0$.

1. Grundzustand (Kette): $E_0 = -J(N-1) - BN$. $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$
2. Endliche Temperatur T : angeregte Zustände kommen vor, z.B. $\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow$ (*erster angeregter Zustand*)

Beispiel: System mit abzählbar vielen (quantisierten) Zuständen.

$$N(4) \text{ Spins, } S = \frac{1}{2} \quad \boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow}$$

¹²Die Wechselwirkung ist im einfachsten Fall nur mit den nächsten Nachbarn, Idee: Überlapp der Wellenfunktion ist begrenzt exponentiell

¹³Spin ist hier kein Drehimpuls sondern wirklich ein Spin, das Minuszeichen kommt vom Drehimpuls des *Elektrons*. Es ist ein phänomenologisches klassisches Modell, also nicht wirklich ein quantenmechanisches Spin-1/2-Modell sonder im klassischen Limes (Limes Heisenbergmodell und gleichzeitig Anisotropie gegen unendlich)

Wie berechnet man nun das **thermische Mittel** einer Observablen?

$$\langle \Omega \rangle = \sum_{\{S\}} p(\{S\}) \Omega(\{S\}) \quad (83)$$

Dabei ist $\{S\}$ ein Zustand des Systems und $\Omega(\{S\})$ die zu diesem Zustand gehörende Größe. Die Wahrscheinlichkeit $p(\{S\})$ meint die Wahrscheinlichkeit, dass das System in diesem Zustand ist. Eine vereinfachte Schreibweise ist

$$\{S\} \hat{=} \underline{S}$$

Wir nummerieren die Zustände durch

$$\langle \Omega \rangle = \sum_{\underline{S}} p_{\underline{S}} \Omega_{\underline{S}} \quad (84)$$

wobei man zeigen kann dass:

$$p_{\underline{S}} = p(H_{\underline{S}}) = \frac{e^{-\beta H_{\underline{S}}}}{\underbrace{\sum_{\underline{S}} e^{-\beta H_{\underline{S}}}}_{\text{Normierung: } \sum_{\underline{S}} p_{\underline{S}} = 1}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (85)$$

mit *Zustandssumme*

kanonisches Ensemble	
$Z = \sum_{\underline{S}} e^{-\beta H_{\underline{S}}}$	$\text{und} \quad \langle \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\underline{S}} \Omega(\underline{S}) e^{-\beta H_{\underline{S}}} \quad (86)$

(fürs kanonische Ensemble bestimmbar in obiger Form)

Das ISING-Modell ist lösbar in $1d$ und $2d$. Wir beobachten im Folgenden aber Numerik und deswegen analytisch lösbare 'Vorüberlegung' mit nur 2 Spins:

Beispiel: ($N = 2$): Die beobachtbare Magnetisierung

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i = \frac{1}{2}(S_1 + S_2) \quad (87)$$

Wieder betrachten wir den thermischen Mittelwert bei Ankopplung der Spins an ein Wärmebad:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_1, S_2\}} M e^{-\beta H(S_1, S_2)} \quad \left(\text{mit: } Z = \sum_{\{S_1, S_2\}} e^{-\beta H(S_1, S_2)} \right) \quad (88)$$

im Allgemeinen haben wir

$$2^N \text{ Zustände } \uparrow\uparrow \downarrow\uparrow \uparrow\downarrow \downarrow\downarrow$$

aus 2 Spins folgen also 4 Zustände.

$$Z = e^{-\beta(-J-2B)} + 2e^{-\beta J} + e^{-\beta(-J+2B)}$$

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2} \frac{2e^{-\beta(-J-2B)} - 2e^{-\beta(-J+2B)}}{Z} = \frac{e^{\beta J} (e^{2\beta B} - e^{-2\beta B})}{e^{\beta J} (e^{-2\beta B} + e^{-2\beta B} + 2e^{-2\beta J})} \\ &= \frac{\sinh(2\beta B)}{\cosh(2\beta B) + e^{-2\beta J}} \end{aligned}$$

Siehe auch Abbildung 14a.

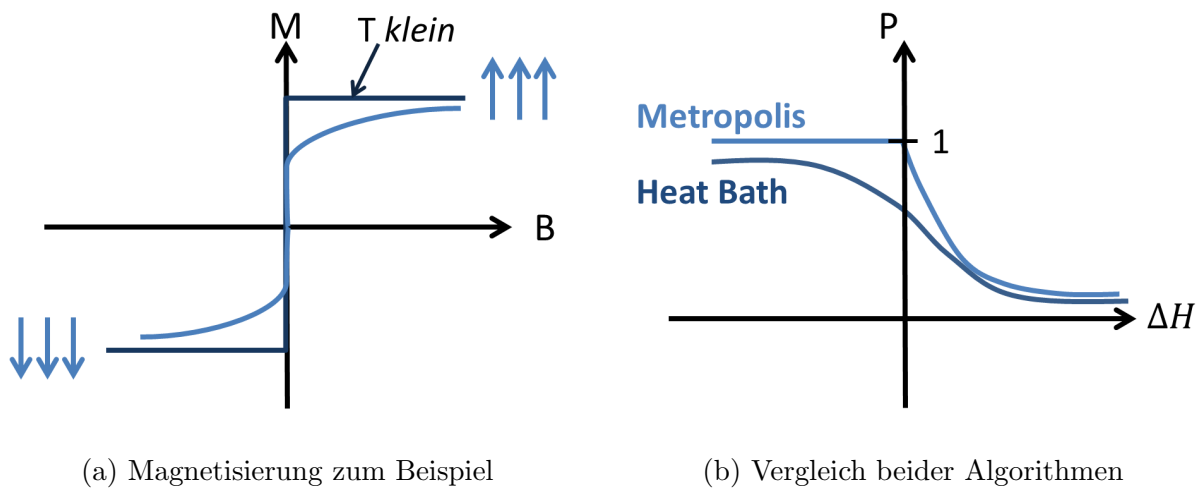


Abbildung 14

Allgemein: N Spins

⇒ 2^N -Zustände ($2^{100} = 10^{30}$)

⇒ d.h. durch direktes Summieren numerisch nicht lösbar

⇒ Näherungsverfahren!

3.5 Monte Carlo Simulation

(Wir rechnen im kanonischen Ensemble die Zustandssumme aus.)

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_{\underline{S}}^{2^N} M(\underline{S}) e^{-\beta H(\underline{S})}}{\sum_{\underline{S}}^{2^N} e^{-\beta H(\underline{S})}} \left\{ \begin{array}{l} \approx \text{simple sampling} \\ \approx \text{importance sampling} \end{array} \right. \begin{array}{l} \frac{\sum_{\underline{S}}^k M(\underline{S}) e^{-\beta H(\underline{S})}}{\sum_{\underline{S}}^k e^{-\beta H(\underline{S})}} \text{ nicht alle } 2^N \text{ Zust. sondern } k \\ \frac{\sum_{\underline{S}}^k M(\underline{S}) e^{-\beta H(\underline{S})} \frac{1}{w(\underline{S})}}{\sum_{\underline{S}}^k e^{-\beta H(\underline{S})} \frac{1}{w(\underline{S})}} \end{array} \quad (89)$$

Dabei sind $[\underline{S}]$ Konfigurationen von Spins mit Wahrscheinlichkeit $w(\underline{S})$. Wähle

$$w(\bar{\underline{S}}) = e^{-\beta H(\underline{S})} \quad (90)$$

und dann folgt

$$\langle M \rangle = \frac{1}{K} \sum_{[\underline{S}]}^{(k)} M(\bar{S}) \quad (91)$$

\Rightarrow Problem: wir brauchen Zustände \bar{S} mit Wahrscheinlichkeit $w(\bar{S}) \propto e^{-\beta H(\bar{S})}$ (\Rightarrow Problematisch). Wir brauchen also ein Verfahren das Zustände des Systems (Spinkonfiguration \underline{S}) erzeugt die eben dieser eben genannten Wahrscheinlichkeitsverteilung genügt. Wie bekommt man jetzt Konfigurationen mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung? Lösung: **Metropolis-Algorithmus**.

Beginne einen Markov-Prozess (Kette)¹⁴

$$\underline{S}_0 \rightarrow \underline{S}_1 \rightarrow \underline{S}_2$$

(also beispielsweise $\uparrow\uparrow\uparrow \rightarrow \uparrow\downarrow\uparrow \rightarrow \uparrow\downarrow\downarrow$)

1. \underline{S}_n sei ein Zustand
2. erzeuge Versuchszustand (*trial state*) \underline{S}_r durch *geeignete* Veränderung.
3. berechne:

$$r = \frac{w(\underline{S}_r)}{w(\underline{S}_n)} = \frac{e^{-\beta H(\underline{S}_r)}}{e^{-\beta H(\underline{S}_n)}} = e^{-\beta(H(\underline{S}_r) - H(\underline{S}_n))} \quad (92)$$

4. Fallunterscheidung:
 - $r > 1$: akzeptieren, $\underline{S}_{n+1} = \underline{S}_r$
 - $r \leq 1$: akzeptieren mit Wahrscheinlichkeit r
5. \rightarrow 2.

Implementierung: am Beispiel einer Spinkette $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ (der letzte wechselwirkt wieder mit dem ersten wieder, periodische Randbedingungen also)

1. Array von Spins `int Spins[N]`: $+1 | +1 | +1 | +1 | +1 | +1$ (mit Anfangsbedingung $S_i = 1$)
2. Versuchsschritt: misst **'single spin flip'**, d.h. ein Spin wird gedreht:
 $S_i \rightarrow -S_i$: $+1 | -1 | +1 | +1 | +1 | +1$
3. $\Delta H = H(\underline{S}_r) - H(\underline{S}_n) = 2J(S_i S_{i-1} + S_i S_{i+1}) + 2B S_i \Rightarrow r = e^{-\Delta H / k_B T}$
4. `if (rand()/Randmax < r) $S_r \rightarrow -S_i$`
5. \rightarrow 2.

- Wenn alle Spins einmal abgefragt wurden: **1MCS** (**M**onte **C**arlo **S**chritt) pro Spin
- Mittelung über viele MCS

¹⁴meint dass der nächste Zustand nur von seinem Vorgänger abhängt, d.h. ein Zustand wird vom Vorgängerezustand erzeugt

- Zu Beginn der Simulationen ist der Markov Prozess nicht im Gleichgewicht (hängen vom Anfangszustand ab)
 \Rightarrow die ersten k MCS sollten nicht zur Mittlung herangezogen werden und damit bei der Berechnung von $\langle M \rangle$ weggelassen werden.

$$\langle M \rangle = \frac{1}{(K - k)} \sum_{i=k}^K M_i \quad (93)$$

mit der Magnetisierung M_i des i -ten Spinlaufs

$$M_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j$$

Beweis: Metropolis-Algorithmus erzeugt Konfigurationen \underline{S} mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung von $w(\underline{S}) \propto e^{-\beta H(\underline{S})}$ (Wie betrachtet man denn nun statistische nicht Gleichgewichtsprozesse so wie diesen Markov Prozess?)

- $w(\underline{S})$: Wahrscheinlichkeit im Zustand \underline{S} zu sein.
- Markov $\underline{S} \rightarrow \underline{S}'$ mit $p(\underline{S}, \underline{S}')$: Wahrscheinlichkeit, im Prozess von \underline{S} nach \underline{S}' zu wechseln

Aufgabe: p bestimmen, sodass $w(\underline{S})$ herauskommt

$$\begin{aligned} \Delta w(\underline{S}) &= - \sum_{\underline{S}'} w(\underline{S}) p(\underline{S} \rightarrow \underline{S}') \quad (\text{raus}) \\ &\quad + \sum_{\underline{S}'} w(\underline{S}') p(\underline{S}' \rightarrow \underline{S}) \quad (\text{rein}) \\ &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

Betrachte eine mögliche Lösung: jeder einzelne Summand wird = 0. (**'detailed balance'**).

$$\Rightarrow w(\underline{S}) p(\underline{S} \rightarrow \underline{S}') - w(\underline{S}') p(\underline{S}' \rightarrow \underline{S}) = 0 \quad (94)$$

$$\Rightarrow \frac{p(\underline{S} \rightarrow \underline{S}')}{p(\underline{S}' \rightarrow \underline{S})} = \frac{w(\underline{S}')}{w(\underline{S})} = e^{-\beta(E(\underline{S}') - E(\underline{S}))} \quad (95)$$

1. Lösung: (eigentlich. Metropolis Algorithmus)

$$p(\underline{S} \rightarrow \underline{S}') \begin{cases} e^{-\beta(E(\underline{S}') - E(\underline{S}))} & \text{für } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (96)$$

2. Lösung: (**Heat-bath algorithm**)

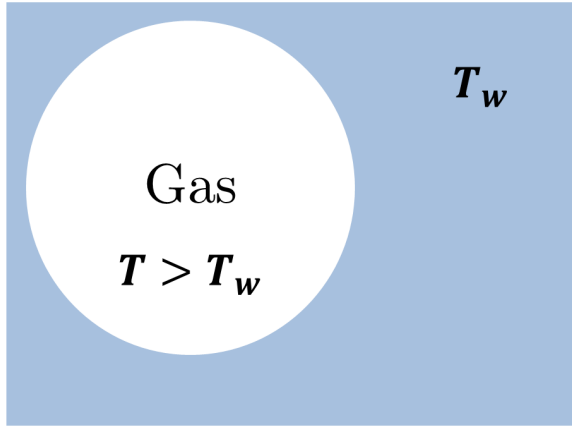
$$p(\underline{S} \rightarrow \underline{S}') = \frac{1}{1 + e^{\beta \Delta E}}, \text{ weil}$$

$$\frac{p(\underline{S} \rightarrow \underline{S}')}{p(\underline{S}' \rightarrow \underline{S})} = \frac{1 + e^{-\beta \Delta E}}{1 + e^{\beta \Delta E}} = \frac{e^{-\beta \Delta E} (e^{\beta \Delta E} + 1)}{1 + e^{\beta \Delta E}} = e^{-\beta \Delta E}$$

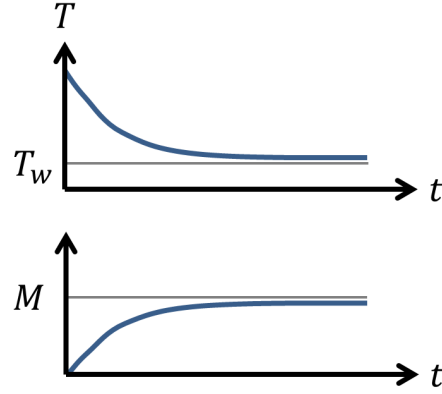
Siehe zum Vergleich auch nochmal Abbildung 14b.

3.6 Master Gleichung und Monte Carlo Dynamik

(Zusammenhang mit irreversibler Dynamik)



(a) Betrachtetes System aus Beispiel



(b) (oben) Gas, das mit der Zeit sinkt.
(unten) Equibrilierung eines Spinsystems

Abbildung 15

Betrachte ein System im nicht-Gleichgewicht, das equilibriert (irreversibel): **Beispielsweise**

- ein Gas, das mit der Zeit sinkt (Abb. 15a, 15b).
- oder ein Spinsystem. (equilibriert durch 'Ankopplung an Phononen', siehe Abbildung 15b)

Wie beschreibt man solche **irreversiblen Dynamiken**?

- Stellen uns vor, wir haben ∞ viele Kopien des Systems und machen nun 'Momentaufnahmen' der Zustände über der Zeit.
- Berechne nun die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeit $p_r(t)$ (Wahrscheinlichkeit, das System zur Zeit t im Zustand r zu finden)
- betrachte quantenmechanisches System im Kontakt mit einem Wärmebad

$$\bar{H}_{gesamt} = \underbrace{\bar{H}}_{\text{System}} + \underbrace{\bar{H}'}_{\text{Wärmebad}} + \underbrace{\bar{H}_i}_{\text{Wechselwirkung}} \quad (97)$$

- System sei im Zustand r , $\bar{H}\Psi_r = E_r\Psi_r$ mit Wahrscheinlichkeit $p_r(t)$.

Master Gleichung

$$\frac{dp_r}{dt} = \sum_s (p_s w_{sr} - p_r w_{rs}) \quad (98)$$

mit w_{sr} , w_{rs} als Übergangsraten. Eine Anwendung im Wärmebad ergibt

$$w_{rs} = \sum_{r',s'} p'_{r'} w_g(rr' \rightarrow ss') = \frac{1}{Z'} \sum_{r',s'} e^{-\beta E'_{r'}} w_g(rr' \rightarrow ss') \quad \text{Wärmebad ist kanonisch!} \quad (99)$$

$$w_{sr} = \frac{1}{Z'} \sum_{r',s'} e^{-\beta E'_{s'}} w_g(ss' \rightarrow rr') \quad (100)$$

- Energieerhaltung: $E'_{r'} + E_r = E'_{s'} + E_s$ (*)
- Symmetrie im Gesamtsystem $w_g(rr' \rightarrow ss') = w_g(ss' \rightarrow rr')$ (*)

aus (*) einsetzen folgt

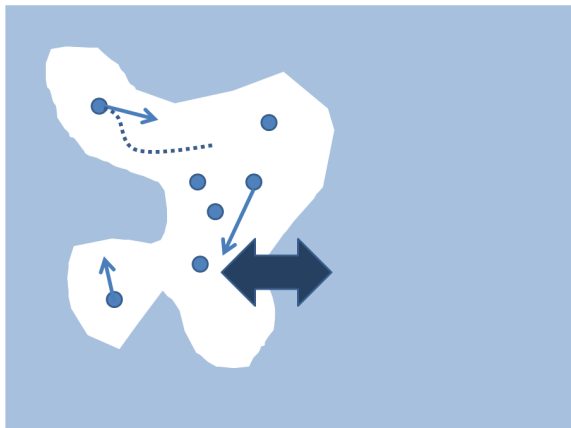
$$w_{sr} = \frac{1}{Z'} \sum_{r',s'} e^{\beta(E'_{r'} - E'_{s'})} e^{-\beta E'_{r'}} w_g(rr' \rightarrow ss') = w_{rs} e^{-\beta(E_r - E_s)} \quad (101)$$

$$\Rightarrow \frac{w_{sr}}{w_{rs}} = e^{-\beta(E_r - E_s)} \quad (102)$$

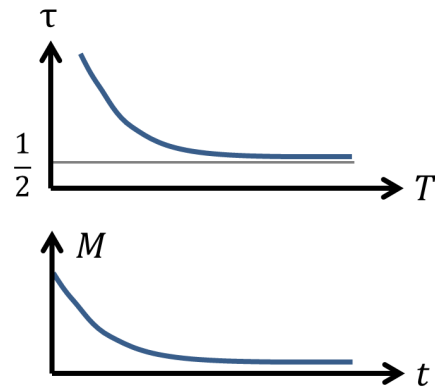
also: Irreversible Dynamik eines Systems in Kontakt mit einem Wärmebad wird beschrieben durch Master-Gleichung (unter Verwendung von Formel 102)

$$\frac{dp_r}{dt} = \sum_s (p_s(t) w_{sr} - p_r(t) w_{rs}) \quad (103)$$

Diese Dynamik wird durch Metropolis Algorithmus (oder Heat Bath Algorithmus) simuliert.



(a) betrachtetes System



(b) Relaxationszeit und Magnetisierung

Abbildung 16

Beachte:

- w_{sr} liegen nicht absolut fest. Mit w_{sr}, w_{rs} ist auch $\gamma(t)w_{sr}, \gamma(t)w_{rs}$ Lösung
 \Rightarrow Zeitskala ist nicht absolut festgelegt!
- w_{sr} ist nicht mikroskopisch bekannt (im Raum nicht festgelegt)
- Die Master Gleichung beschreibt *ausschließlich* irreversible Dynamiken, nicht aber die Bewegungsgleichung innerhalb des Systems \tilde{H} , (Abb. 16a)!
- speziell für das ISING-Modell heißt diese Dynamik, die durch die Mastergleichung beschrieben wird **Glauber-Dynamik**. (Besonders wichtig, das ISING-Modell keine Bewegungsgleichung hat)

Beispiel: (Glauber Dynamik für 2 Spins)

$H = -JS_1S_2$ mit $S_{1,2} = \pm 1 \Rightarrow 2^2 = 4$ Zustände:

$$\begin{array}{cccc} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \\ ++ & +- & -+ & -- \end{array}$$

$$\frac{dp_{++}}{dt} = \sum_s p_s w_{sr} - p_r w_{rs}$$

(Energie ++ und -- sind genau gleich, da ja kein externes Feld angelegt ist. Nur interessant ist also der Übergang von ++, -- zu +-, -+) \Rightarrow Annahme: Single spin flip und 'Metropolis' mit

$$w = \begin{cases} 1 & \Delta E < 0 \\ e^{-\frac{\Delta E}{kT}} & \Delta E > 0 \end{cases}$$

Es gibt

- $w_{++ \rightarrow --} = w_{-- \rightarrow ++}$ etc...
- $w_{+- \rightarrow ++} = w_{-+ \rightarrow ++} = 1$ etc...
- $w_{-- \rightarrow -+} = w_{-- \rightarrow +-} = w = e^{-\frac{2J}{k_B T}}$ etc...

$$\begin{aligned} \frac{dp_{++}}{dt} &= \sum_s p_s w_{sr} - p_r w_{rs} \\ &= p_{+-} w_{+- \rightarrow ++} - p_{++} w_{++ \rightarrow +-} + p_{-+} w_{-+ \rightarrow ++} - p_{++} w_{++ \rightarrow -+} = p_{+-} + p_{-+} - 2p_{++} w \\ \frac{dp_{--}}{dt} &= p_{+-} + p_{-+} - 2p_{--} w \\ \frac{dp_{+-}}{dt} &= p_{++} w + p_{--} w - 2p_{+-} \\ \frac{dp_{-+}}{dt} &= p_{++} w + p_{--} w - 2p_{-+} \end{aligned}$$

\Rightarrow homogenes, lineares Gleichungssystem

\Rightarrow Lösung für λ mit

$$\begin{vmatrix} -2w + \lambda & 0 & 1 & 1 \\ 0 & -2w + \lambda & 1 & 1 \\ w & w & -2w + \lambda & 0 \\ w & w & 0 & -2w + \lambda \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow \lambda_1 = 0, \lambda_2 = 2, \lambda_3 = 2w + 2, \lambda_4 = 2w$$

Wichtig: Kleinstes $\lambda > 0$ definiert die Relaxationszeit!

\Rightarrow für lange Zeiten:

$$p_s(t) \approx a_s + b_s e^{-\lambda_4 t} \approx a_s + b_s e^{-\frac{t}{\tau}} \quad \left(\text{mit } \tau = \frac{1}{2w} = \frac{e^{2J/k_B T}}{2} \right)$$

Magnetisierung:

$$M(t) = \sum_s p_s(t) M_s = p_{++}(t) + p_{--}(t) \underbrace{\approx}_{t \rightarrow \infty} M_0 e^{-\frac{t}{\tau}} + \underbrace{const}_{=0} \quad (104)$$

Diskussion: (siehe auch Abb. 16b)

- τ hängt vom 'Algorithmus' ab (siehe auch Grenze für $T \rightarrow \infty$)
- $p(t)$ hängt von Annahmen bezüglich Übergangswahrscheinlichkeitsraten also der Dynamik ab (single spin flip oder nicht)

3.7 Phasenübergänge und Skalentheorie

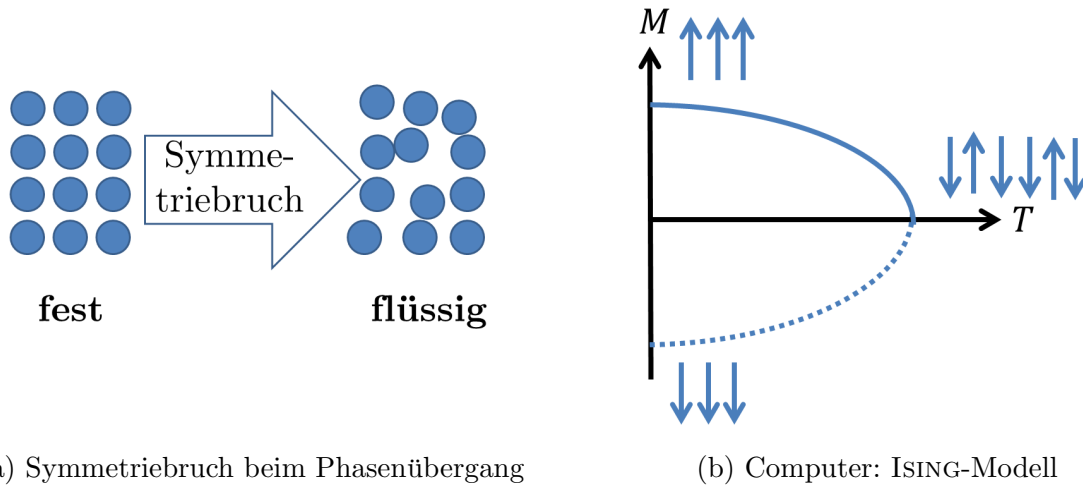


Abbildung 17

Ideale Gase haben keine Wechselwirkung erst die Wechselwirkung zwischen Teilchen erklärt aber das Entstehen von Ordnung. Ordnung entsteht häufig spontan durch Phasenübergänge, bei dem eine Symmetrie gebrochen (Abb. 17a) wird. Ein Analytisch lösbares Modell für das Studium von Phasenübergängen ist das in Abb. 17b dargestellte **(2d) Ising-Modell:**

Ordnungsparameter:

$$\lim_{\substack{B \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} M(B)$$

Analytisch: (2D, Quadratgitter mit $B = 0$ und $N \rightarrow \infty$)

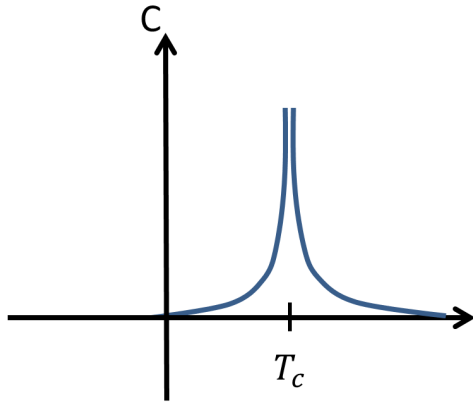
$$H = - \sum_{\substack{i,j \\ \underbrace{\hspace{1cm}} \\ \text{4 nächste} \\ \text{Nachbarn}}} \frac{J}{2} \sigma_i \sigma_j, \quad \sigma_i = \pm 1 \quad (105)$$

Die exakte Lösung von Onsager (1944) erhielt einen Nobelpreis. Heutzutage löst man es jedoch auf andere Weise, beispielsweise

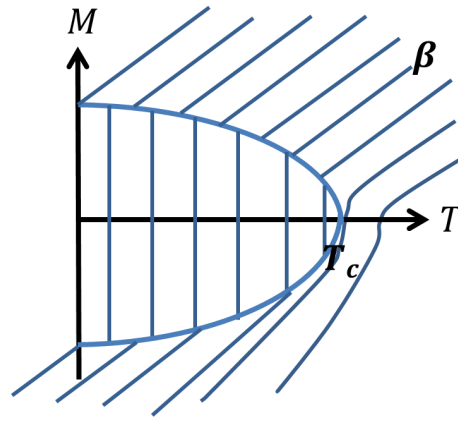
- graph theory
- transfermatrix methods

innere Energie:

$$\frac{U}{N} = -J \coth \left(\frac{2J}{k_B T} \right) \left[1 + \frac{2}{\pi} \left(2 \tanh^2 \left(\frac{2J}{k_B T} \right) - 1 \right) K_1(\kappa) \right] \quad (106)$$



(a) Singularität bei der kritischen Temperatur



(b) ISING-Modell im Feld.

Abbildung 18

mit

$$\kappa = \frac{2 \sinh\left(\frac{2J}{k_B T}\right)}{\cosh^2\left(\frac{2J}{k_B T}\right)}, \quad K_1(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sinh^2(\Phi)}} d\Phi \quad (107)$$

U ist nicht analytisch bei einer Temperatur T_c mit

$$\sinh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1 \quad \Rightarrow \quad \cosh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = \sqrt{2} \quad \Rightarrow \quad 2 \tanh^2\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1$$

mit $k_B T_c = 2.269J$. Beachte, dass $K_1(\kappa)$ hat eine Singularität (Abb. 18a) für $\kappa \rightarrow 1$:

$$K_1(\kappa) \propto \ln\left(\frac{U}{\sqrt{1 - \kappa^2}}\right)$$

U bleibt endlich, aber seine Ableitung divergiert. Typisch für einen Phasenübergang sind unter anderem kritische Punkte mit nicht-analytischen Singularitäten sowie auch Werte hüpfen oder divergieren können. (kritisches Verhalten) Beispielsweise:

- Dies spezifische Wärme $c(\underbrace{T \rightarrow T_c}_{\kappa \rightarrow 1}) \propto -\ln\left(\left|1 - \frac{T}{T_c}\right|\right)$

Der Ordnungsparameter jedoch bleibt endlich. (Magnetisierung:)

- Magnetisierung

$$m = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \frac{\sqrt[4]{1+x^2} \sqrt[3]{1-6x^2+x^4}}{\sqrt{1-x^2}} & T < T_c \end{cases} \quad \text{wobei} \quad \begin{cases} x = e^{-\frac{2J}{k_B T}}, \\ x_c = e^{-\frac{2J}{k_B T_c}} = \sqrt{2} - 1 \end{cases} \quad (108)$$

Kritische Exponenten

ISING-Modell mit Feld. (s. Abb. 18b)

- Phasenübergang 1.Ordnung bei des Feldes \Rightarrow *Hysteresis*, Ordnungsparameter stetig, kritische Exponenten

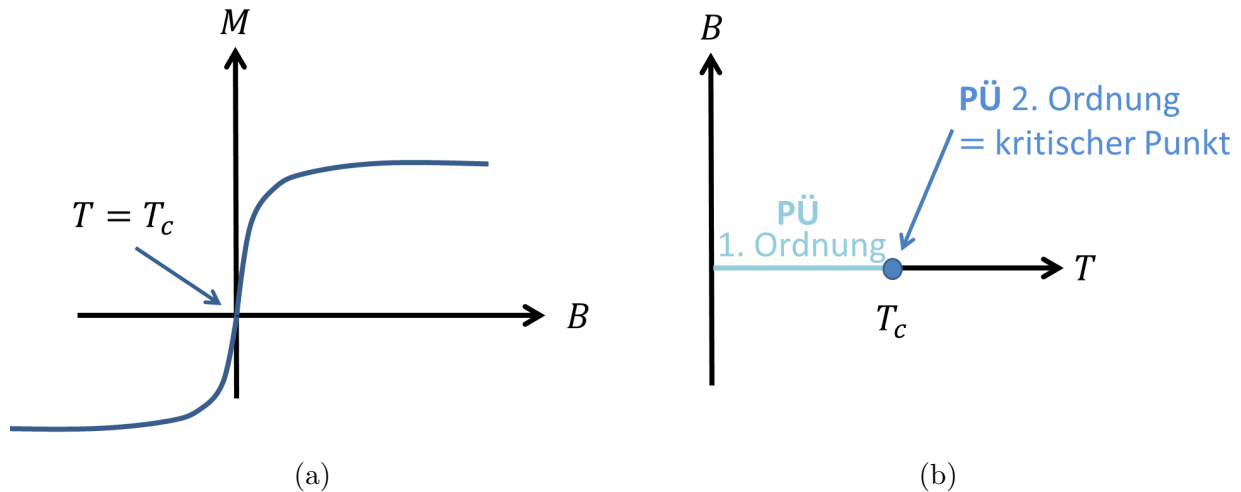


Abbildung 19: Phasendiagramm und kritische Punkte

- kritischer Punkt: $B = 0$, $(T = T_c) \hat{=}$ Phasenübergang 2. Ordnung $\hat{=}$ 2. Ableitung der freien Energie unstetig (z.B. spezifische Wärme) sind viele Größen nicht-analytisch.

Definition: Kritische Exponenten beschreiben das Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes ($\epsilon = \frac{T-T_c}{T_c}$, $B = 0$) ($\hat{=}$ Abstand vom kritischen Punkt.) Siehe auch Abb. 19.

- $T > T_c$, $B = 0$:
 - $c \propto \epsilon^{-\alpha}$ (spezifische Wärme)
 - $\chi \propto \epsilon^{-\gamma}$ (Suszeptibilität)
 - $\xi \propto \epsilon^{-\nu}$ (Korrelationslänge)
- $T < T_c$, $B = 0$:
 - $c \propto |\epsilon|^{-\alpha}$
 - $\chi \propto |\epsilon|^{-\gamma}$
 - $\xi \propto |\epsilon|^{-\nu}$
- $T = T_c$, $B \rightarrow 0$: siehe (Magnetisierung)
- + eventuelle weitere...

Magnetisierung (OP)

$$m = \begin{cases} M \propto |E|^{-\beta} & T < T_c \\ M \propto |B|^{\frac{1}{\delta}} & T = T_c \end{cases} \quad (109)$$

Kritische Exponenten beschreiben das führende nicht-analytische Verhalten einer Funktion. Genauer:

$$A(\epsilon) = \underbrace{A_0 + A_1 \epsilon + A_2 \epsilon + \dots}_{\text{analytisch}} + \underbrace{A_3 \epsilon^{0.8}}_{\substack{\text{führend} \\ \text{nichtanalytisch} \\ \text{(kritisch)}}} + \underbrace{A_4 \epsilon^{1.7}}_{\text{Korrekturen}}$$

$$\rightarrow A(\epsilon) \propto A > \epsilon^{0.8}$$

Kritische Exponenten haben Eigenschaften, die sie interessant machen:

- 1) Sie sind nicht unabhängig, d.h. es gibt sogenannte Skalengesetze
- 2) Universalität, Werte hängen nur von räumlicher Dimension und Symmetrie des Hamiltonoperators ab und nicht von Stärke der Wechselwirkungen, ...

Moderne Theorie der Phasenübergänge 2.Ordnung:

Verschiedene physikalische Systeme können dieselben kritischen Exponenten aufweisen!
Bestimmung der kritischen Exponenten aus:

- a) exakte Lösung (2d-ISING-Modell)
- b) Reihenentwicklung
- c) Computersimulation
- d) Experimente

⇒ Bestätigung des Konzepts der Universalität. Beweis später, zunächst werden Beziehungen zwischen den Exponenten hergeleitet. Die Folgen aus:

Skalenhypothese: (WIDOM, GRIFFITH 1965) als Postulat

Freie Energie ist eine verallgemeinerte, homogene Funktion der Variablen ϵ, B :

$$G(a^{x_1} B, a^{x_2} \epsilon) = a G(B, \epsilon) \quad \forall a > 0 \quad (110)$$

für führenden nicht-analytischen Anteil. Gültig in unmittelbarer Nähe des kritischen Punktes $(\epsilon, B) = 0$ für den singulären Anteil der freien Energie. Beachte, dass G eine gerade Funktion von B ist, $\epsilon = \frac{T-T_c}{T_c}$ kann beide Vorzeichen haben!

Beispiel:

$$f(x) = x^{0.5} \quad \Leftrightarrow \quad f(bx) = (bx)^{0.5} = b^{0.5} x^{0.5}$$

$$b = y^2$$

$$f(a^2 x) = a x^{0.5} = a f(x) \quad (111)$$

'Normal' wäre: f analytisch

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \dots$$

$$\Delta f(x) = f(x) - f(0) = f'(0)x + \dots$$

$$\Delta f(ax) = f'(0)ax + \dots$$

$$\Delta f(ax) = a \Delta f(x) \quad (112)$$

Erinnerung an 'Thermodynamik'

Wir verdoppeln ein System, gem. Abbildung 20a, sodass

$$\left. \begin{array}{l} U_{ges} = 2U \\ V_{ges} = 2V \\ N_{ges} = 2N \\ S_{ges} = 2S \end{array} \right\} \quad \text{also } U(2S, 2V, 2N) = 2U(S, V, N)$$

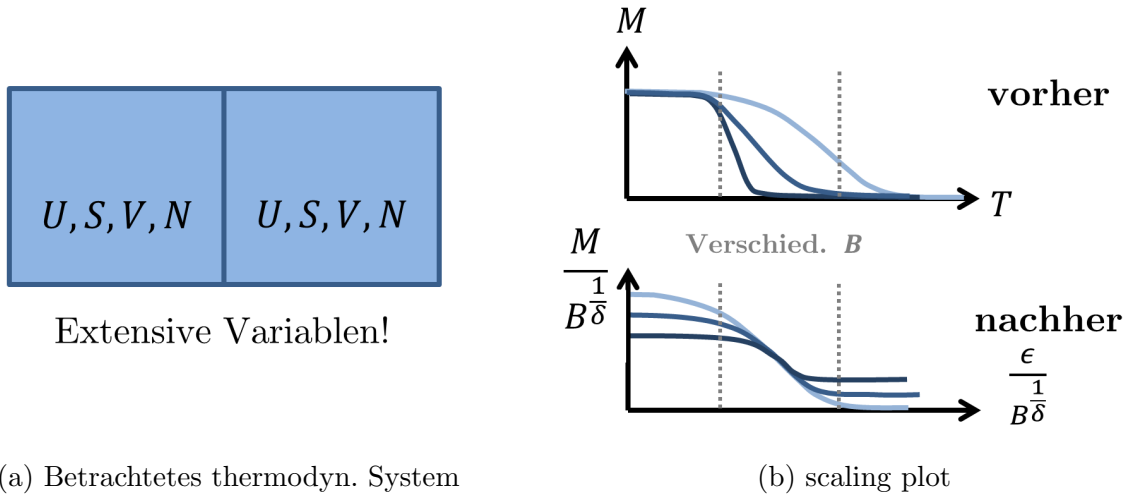


Abbildung 20

allgemein

$$U(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda U(S, V, N)$$

die innere Energie U ist eine homogene Funktion 1. Grades!

Folgerungen aus der Skalenhypothese (110):

setze $a = |\epsilon|^{-1/x^2}$

$$\Rightarrow G\left(|\epsilon|^{-\frac{x_1}{x_2}} B, \underbrace{\frac{\epsilon}{|\epsilon|}}_{\substack{+1 \ (T > T_c) \\ -1 \ (T < T_c)}}\right) = |\epsilon|^{\frac{-1}{x^2}} G(B, \epsilon) \quad (113)$$

Definition: Skalenfunktion:

$$f^\pm\left(\frac{B}{|\epsilon|^{\frac{x_1}{x_2}}}\right) = G\left(\epsilon^{-\frac{x_1}{x_2}} B, \pm 1\right) \quad (114)$$

Skalenhypothese:

$$G(B, \epsilon) = |\epsilon|^{\frac{1}{x^2}} f^\pm\left(\frac{B}{|\epsilon|^{\frac{x_1}{x_2}}}\right) \quad (115)$$

$$G(B, \epsilon) = |B|^{\frac{1}{x_1}} g^\pm\left(\frac{\epsilon}{|B|^{\frac{x_2}{x_1}}}\right) \quad (116)$$

Letztere Gleichung erhält man durch tauschen von (ϵ, x_2) mit (B, x_1) . Außerdem ist

$$g^\pm\left(\frac{\epsilon}{|B|^{\frac{x_2}{x_1}}}\right) = G\left(\frac{B}{|B|}, \frac{\epsilon}{|B|^{\frac{x_2}{x_1}}}\right)$$

da G eine gerade Funktion von B ist, ist \pm überflüssig.

Eigenschaften der Skalenfunktionen g, f :

G soll am kritischen Punkt ($B \rightarrow 0, \epsilon \rightarrow 0$) endlich bleiben

$\Rightarrow f^\pm(0)$ und $g(0)$ bleiben endlich (und ihre Ableitungen)

$\Rightarrow \alpha, \beta, \gamma, \delta$ lassen sich durch x_1, x_2 ausdrücken:

• **spezifische Wärme:**

$$G(0, \epsilon) = |\epsilon|^{\frac{1}{x_2}} f^\pm(0) \quad (B = 0) \quad (117)$$

$$\Rightarrow c \propto \frac{\partial^2 G}{\partial \epsilon^2} \propto |\epsilon|^{\frac{1}{x_2}-2} = |\epsilon|^{-\alpha} \quad (118)$$

$$\Rightarrow \alpha = 2 - \frac{1}{x_2} \quad (119)$$

(Die Exponenten sind allgemein auf beiden Seiten gleich.)

• **spontane Magnetisierung:**

$$M(0, \epsilon) \propto \left. \frac{\partial G(B, \epsilon)}{\partial B} \right|_{B \rightarrow 0} \propto \left. \frac{\partial}{\partial B} \right|_{B \rightarrow 0} |\epsilon|^{\frac{1}{x_2}} f^\pm \left(\frac{B}{|\epsilon|^{\frac{x_1}{x_2}}} \right) \propto |\epsilon|^{\frac{1}{x_2}} \frac{1}{|\epsilon|^{\frac{x_1}{x_2}}} \propto |\epsilon|^\beta \quad (120)$$

$$\Rightarrow \beta = \frac{1 - x_1}{x_2} \quad (121)$$

• **Suszeptibilität:**

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial B} \right|_{B \rightarrow 0} \propto |\epsilon|^{\frac{1}{x_2}} \frac{1}{|\epsilon|^{\frac{2x_1}{x_2}}} = |\epsilon|^\gamma \quad \Rightarrow \gamma = \frac{2x_1 - 1}{x_2} \quad (122)$$

• **Magnetisierung:** (für $\epsilon = 0$)

$$G(B, 0) = |B|^{\frac{1}{x_1}} g \left(\frac{E}{|B|^{\frac{x_1}{x_2}}} \right)$$

$$M \propto \frac{\partial G(B, 0)}{\partial B} \propto |B|^{\frac{1}{x_1}-1} \quad (123)$$

Da sich $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ (die sogenannten *thermischen Exponenten*) durch x_1, x_2 ausdrücken lassen, gibt es offensichtlich Zusammenhänge. Mann nennt sie die

• **Skalengesetze:**

$$\underbrace{\alpha = 2 - \frac{1}{x_2} \quad \beta = \frac{1 - x_1}{x_2} \quad \gamma = \frac{2x_1 - 1}{x_2}}_{\text{Skalengesetze}}$$

Rushbrooke-Gleichung

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (124)$$

und

$$\delta = \frac{x_1}{1 - x_1} \quad \Rightarrow \quad \delta - 1 = \frac{x_1 - 1 + x_1}{1 - x_1} = \frac{2x_1 - 1}{1 - x_1}$$

Widom-Gleichung

$$\gamma = \beta (\delta - 1) \quad (125)$$

Weitere Folgerungen sind

- **magnetische Zustandsgleichung:**

$$M(B, \epsilon) = -\frac{\partial G}{\partial B} = -\frac{\partial}{\partial B} \left[|B|^{\frac{1}{x_1}} g \left(\frac{\epsilon}{|B|^{\frac{x_2}{x_1}}} \right) \right] \quad (126)$$

$$= -B^{\frac{1}{x_1}-1} g \left(\frac{\epsilon}{B^{\frac{x_2}{x_1}}} \right) - |B|^{\frac{1}{x_1}} \frac{x_2}{x_1} \frac{\epsilon}{|B|^{\frac{x_2}{x_1}+1}} g' \left(\frac{\epsilon}{|B|^{\frac{x_2}{x_1}}} \right) \quad (127)$$

$$= -B^{\frac{1}{x_1}-1} \left[g \left(\frac{\epsilon}{B^{\frac{x_2}{x_1}}} \right) - \frac{x_2}{x_1} \frac{\epsilon}{|B|^{\frac{x_2}{x_1}}} g' \left(\frac{\epsilon}{|B|^{\frac{x_2}{x_1}}} \right) \right] \quad (128)$$

$$M(B, \epsilon) = B^{\frac{1}{\delta}} \tilde{g} \left(\frac{\epsilon}{B^{\frac{1}{\beta\delta}}} \right) \quad (129)$$

$$M(B, \epsilon) = \underbrace{B^{\frac{1}{\delta}}}_{\substack{\text{Grösse hängt} \\ \text{von einem Feld} \\ \text{ab}}} \cdot \tilde{g} \left(\underbrace{\frac{\epsilon}{B^{\frac{1}{\beta\delta}}}}_{\substack{\text{hängt von} \\ \text{zwei Feldern} \\ \text{ab}}} \right) \quad (130)$$

vorher: $M = M(B, \epsilon)$ **eine** Grösse hängt ab von **zwei** Parametern

jetzt: $M = M(B, \epsilon)$ **eine** Grösse hängt ab von **einem** Parameter

Dies führt zum sogenannten **scaling plot**, der in Abbildung 20b zu finden ist.

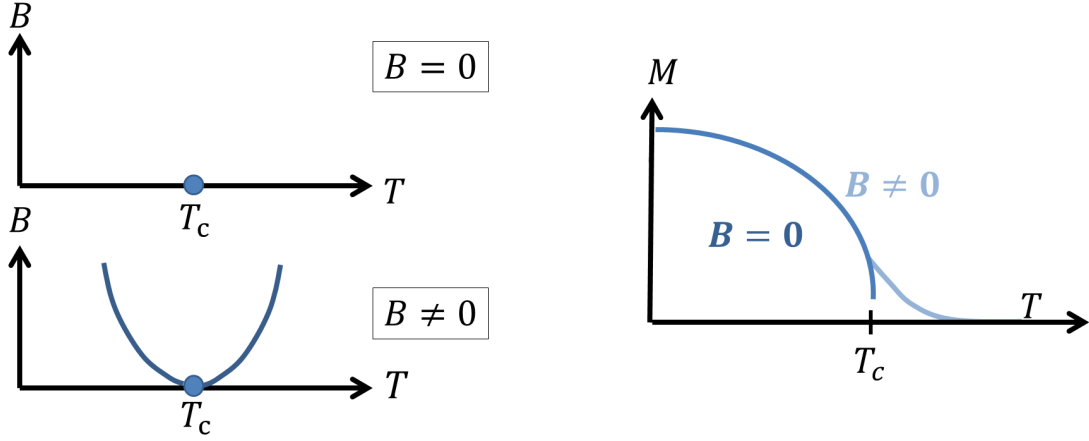
- **Crossover-Verhalten**

Skalenverhalten der freien Energie (siehe auch Abbildung 21a) :

$$G(B, \epsilon) = |\epsilon|^{\frac{1}{x_2}} f^{\pm} \left(\frac{B}{|\epsilon|^{\frac{x_1}{x_2}}} \right) \quad (131)$$

$$G(B, \epsilon) = |B|^{\frac{1}{x_1}} g \left(\frac{\epsilon}{B^{\frac{x_2}{x_1}}} \right) \quad (B > 0) \quad (132)$$

$$(133)$$



(a) Skalenverhalten der freien Energie

(b) Anschaulich zum Beispiel

Abbildung 21

$$\Rightarrow B = 0 : \quad G(0, \epsilon) \propto |\epsilon|^{\frac{1}{x_2}} \propto |\epsilon|^{2-\alpha} \quad (134)$$

$$\Rightarrow B \neq 0 : \quad \text{solange } \frac{B}{|\epsilon|^{\frac{x_2}{x_1}}} \ll 1 \quad \Leftrightarrow \quad B < |\epsilon|^{\frac{x_1}{x_2}} \quad (135)$$

Für $B \neq 0$ sieht man also ein gleiches kritisches Verhalten wie bei $B = 0$. Erst wenn $B/|\epsilon|^{\frac{x_1}{x_2}} \approx 1$ ändert sich das Verhalten. \rightarrow 'Crossover' zu anderem (oder keinem) kritischen Verhalten. Crossover setzt ein für $B \approx |\epsilon|^{\frac{x_1}{x_2}} = |\epsilon|^{\Phi_B}$
Für einen Ferromagnet im Feld beobachtet man jenseits des Crossover-Bereichs kein kritisches Verhalten. Es gibt aber erheblich interessantere Fälle, wo in Abhängigkeit von einem unsichtbaren Systemparameter das kritische Verhalten wechselt (von einem zu einem anderen).

3.8 Finite size scaling

Phasenübergänge werden in einem endlichen System unterdrückt, weil $\xi < L$. (Liniendimension des Systems).

Wir betrachten $\frac{1}{L}$ als Skalenfeld. (parameter, scaling field)

S-Ansatz:

$$G(\xi, \frac{1}{L}) = |\epsilon|^{2-\alpha} f\left(\frac{\frac{1}{L}}{|\epsilon|^{\Phi}}\right), \quad \Phi = \text{Crossover} \quad (136)$$

Wir erwarten, dass G nur von dimensionslosen Größen abhängt:

$$\frac{L}{\xi(T)} \Rightarrow \frac{\frac{1}{L}}{\frac{1}{\xi}} \propto \frac{\frac{1}{L}}{|\epsilon|^{\nu}} \Rightarrow \Phi = \nu \quad (137)$$

Daraus folgt der allgemeine Ansatz:

$$G(B, \epsilon, \frac{1}{L}) = |\epsilon|^{2-\alpha} f^{\pm}\left(\frac{B}{|\epsilon|^{\beta\delta}}, \frac{1}{L|\epsilon|^{\nu}}\right) \quad (138)$$

Betrachte: ϵ ist bezogen auf das unterschiedliche System $\epsilon = \frac{T-T_c}{T_c}$

- $L \gg \xi(T) \Rightarrow L|\epsilon|^\nu \gg 1$, also verhält es sich wie ein unendliches System
- $L \approx \xi(T) \Rightarrow |\epsilon| \propto L^{-\frac{1}{\nu}}$ crossover
- $L \ll \xi(T) \Rightarrow$ Singularitäten verschwinden, kein Phasenübergang

Beispiel: ($B = 0$, spezifische Wärme:)

$$c \propto \frac{\partial^2 G}{\partial \epsilon^2} \propto |\epsilon|^{-\alpha} f^\pm \left(\frac{1}{L|\epsilon|^\nu} \right) \propto L^{\frac{\alpha}{\nu}} (L^{\frac{1}{\nu}} |\epsilon|)^{-\alpha} f^\pm \left(\frac{1}{L|\epsilon|^\nu} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{c}{L^{\frac{\alpha}{\nu}}} = \tilde{f}^\pm \left(L^{\frac{1}{\nu}} |\epsilon| \right) = \tilde{f} \left(L^{\frac{1}{\nu}} \epsilon \right), \quad \text{und} \quad c \propto L^{\frac{\alpha}{\nu}} \quad (\text{bei } T_c)$$

Andere Beispiele folgen in der Übung. Ohne Beweis gilt weiterhin:

$$L^{\frac{\beta}{\nu}} M(\epsilon, L) = \underbrace{f}_{\text{ander-es } f} \left(L^{\frac{1}{\nu}} \epsilon \right) \Rightarrow M(0, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} f(0)$$

Siehe auch Abbildung 21b.

Wie berechnet man $M(T)$ im System endlicher Größe?

zu jedem Zustand \mathbf{S} mit $M(\mathbf{S})$ gibt es einen (bei $B = 0$) gleichwahrscheinlichen Zustand $\mathbf{S}' = -\mathbf{S}$ mit $M(\mathbf{S}') = -M(\mathbf{S})$. (Siehe auch nochmal Abbildung 17b.)

\Rightarrow es ist

$$M(T, B = 0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \underbrace{\langle S_i \rangle}_{\substack{\text{thermisches} \\ \text{Mittel} \\ \cong \text{MC-Mittel}}} = 0 \quad \forall N$$

Der **Symmetriebruch** findet nur statt für:

$$\langle M(T, B = 0) \rangle = \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle M(T, B) \rangle \quad (139)$$

Dies ist auch experimentell beobachtbar: endliche Systeme fluktuieren thermisch ($\pm M$), sodass sie im Zeitmittel 'nicht-magnetisch' erscheinen $M \rightarrow 0$

\rightarrow **Superparamagnetismus**

(\Rightarrow Bedeutung für Festplatten diskutieren!)

Zeitskala: $\tau = \tau_0 e^{\frac{\Delta E}{k_B T}}$

Energieverbrauch: $\Delta E(L^n)$ (n meint Dimension: Oberfläche, Volumen...)

\Rightarrow zeitabhängiger (Algorithmus-abhängige) Ordnungsparameterkurven.

Die Reihenfolge der Limites oben kann man nicht numerisch durchführen. Daher rechnet man:

$$M(T, B = 0) = \sqrt{\left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \right\rangle} = \sqrt{\langle S^2 \rangle} \quad (140)$$

Mit (140) wird dann die Finite-Size-Scaling Analyse durchgeführt.

- innere Energie:

$$U = \langle H \rangle$$

- spezifische Wärme:

$$c_v = \frac{\partial U}{\partial T} \Big|_{V,N} = \frac{1}{k_B T^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)$$

- Binder-Kummulante (4th order cumulant) zur Bestimmung von T_c :

$$U_L = 1 - \frac{\langle S^4 \rangle}{3 \langle S^2 \rangle^2}$$

mit folgenden Eigenschaften:

1. $T > T_c, L \gg \xi$: $U_L \rightarrow 0 \approx L^{-\alpha}$
2. $T < T_c, L \gg \xi$: $U_L \rightarrow \frac{2}{3}$
3. $L \ll \xi$: $U_L \rightarrow U^*$ (L, T unabhängiger Zahlenwert)

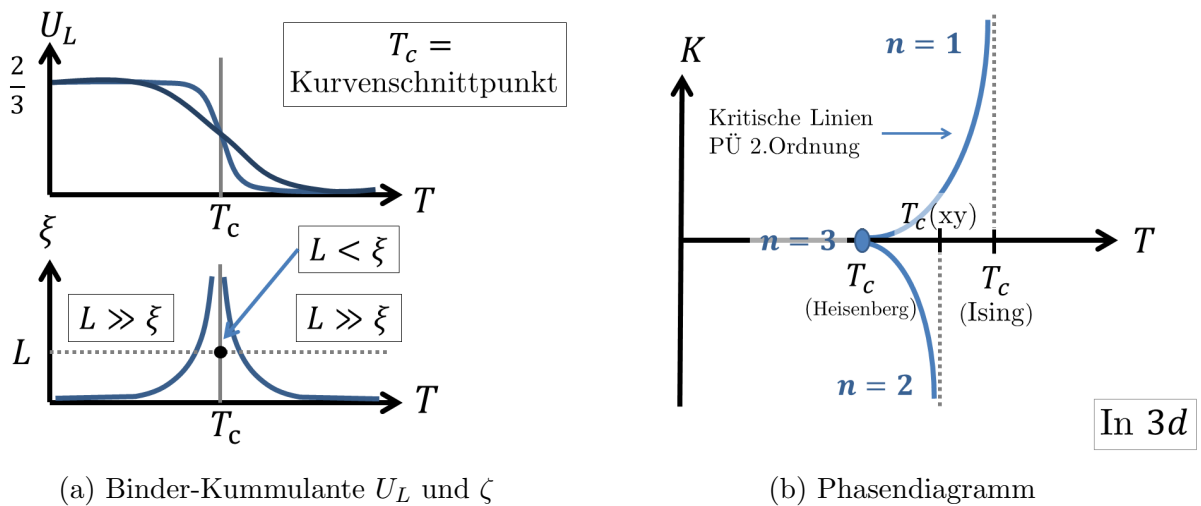


Abbildung 22

Siehe auch Abbildung 22a.

3.9 Kontinuierliche Freiheitsgrade: 'x-y' und Heisenbergs-Modell

Bislang betrachten wir ISING-Spins mit $\uparrow \Rightarrow \downarrow$. Versuchs... des Monte-Carlo-Algorithmus 'offensichtlich'. Wir betrachten jetzt (als Beispiel) Spinmodelle mit kontinuierlichen Freiheitsgraden.

3d Heisenberg-Ferromagnet mit axialer Anisotropie:

$$H = -J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - K \sum_i S_{iz}^2, \quad |\mathbf{S}| = 1 \quad (141)$$

Universalität: Das kritische Verhalten hängt nicht von J ab, sondern von Dimensionen des Ordnungsparameters!

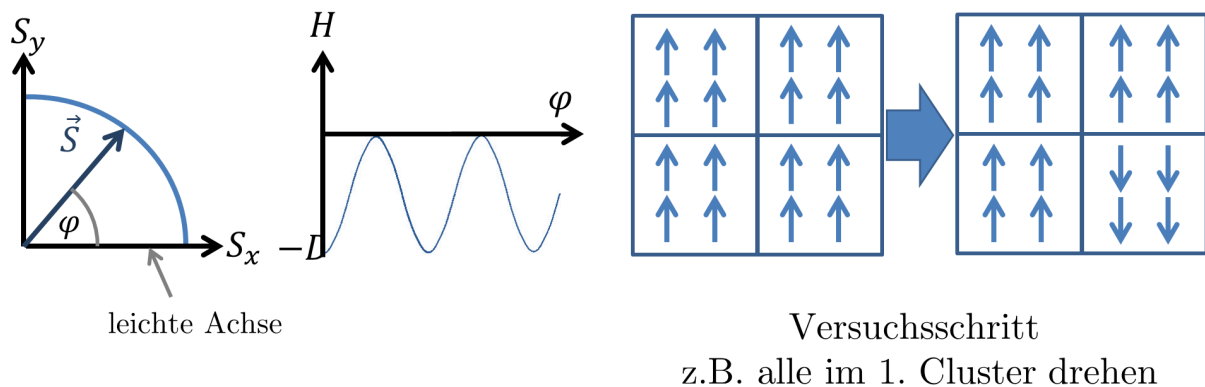
1. $K = 0$: $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ isotrop \Rightarrow OP hat $n = 3$ Komponenten (m_x, m_y, m_z)
2. $K < 0$: Spins legen sich in xy -Ebene \Rightarrow OP hat 2 Komponenten (m_x, m_y)
3. $K > 0$: Spins entlang z -Achse \Rightarrow OP hat 1 Komponente (m_z)

Das Phasendiagramm hierfür ist noch einmal in Abbildung 22b ersichtlich.

- entlang der $(K = 0)$ -Linie anderes kritisches Verhalten (andere Exponenten) als für $K \neq 0$.
- für jedes endliche K ist man im Universalitätsklasse von ISING- oder 'x-y'-Modell.
- $K = 0$: Heisenberg
- besonders interessant: $2d$ -xy-Modell zeigt keine langreichweitige, ferromagnetische Ordnung aber einen KOSTERLITZ-THOULESS-Übergang. (\rightarrow Nobelpreis 2016)

3.10 MC-Algorithmen für kontinuierliche Freiheitsgrade

3.10.1 x-y-Modell



(a) (**oben**) kontinuierlicher Spin (magn. Moment) im 1-dimensionalen Potential (**unten**)

(b) Cluster-Algorithmus im ISING-Modell

Abbildung 23

Wir beachten kontinuierlichen 'Spin' (eigentlich ein magnetisches Moment) in der Ebene: $|\mathbf{S}| = 1$. Ein Spin davon mit Anisotropie

$$H = -D S_x^2 = -D \cos(\phi)^2$$

mit dem Potential

$$V(x) = -D \cos(x)^2$$

wie gezeigt in Abbildung 23a.

Frage: Wie wählt man den Versuchsschritt des Monte-Carlo-Algorithmus?

1. **Idee:** (Falsch!)

$$\varphi_{trial} = \varphi_{initial} \pm \Delta\varphi \quad \Delta\varphi = const.$$

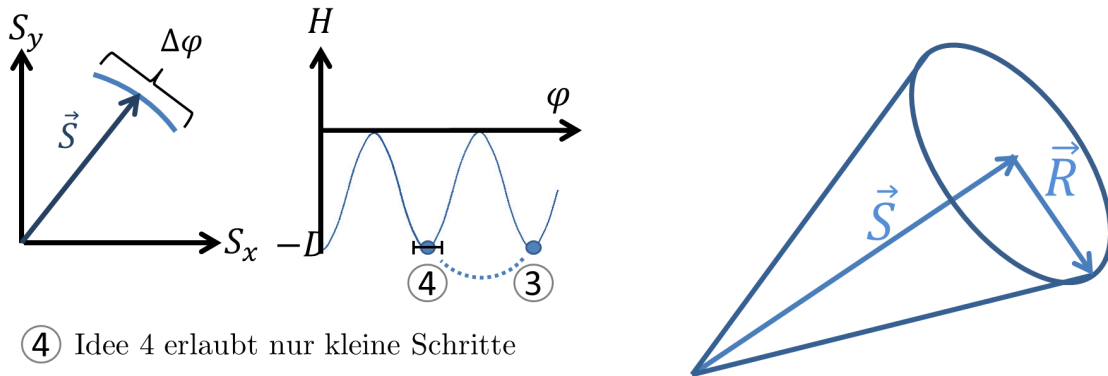
Falsch! Setze $\Delta\varphi = \pi$

\Rightarrow anderes Modell (ISING $S_x = \pm 1$). Allgemein gilt, dass der MC-Algorithmus **ergodisch** sein muss, d.h. er muss genau den Phasenraum erreichen können!¹⁵

Ein anderes Beispiel für 'nicht-ergodisch' ist:

Beispiel ('naiver Clusteralgorithmus', Abb. 23b)

Im ISING-Modell: bestimmte Konfigurationen können nicht vermischt werden. Trotzdem gibt es richtige (=also ergodische) und zudem sehr effektive Cluster-Algorithmen, wie beispielsweise *Swendsten-Wang*. Da werden (immer andere) Cluster nach Regeln getrennt.



④ Idee 4 erlaubt nur kleine Schritte

(a) Zufälliger Punkt auf Einheitskreis wird normiert. Nebendran werden Idee 3 und Idee 4 verglichen.

(b) Kleine Schritte um alten Vektor \mathbf{S} , hier: innerhalb eines Kegels

Abbildung 24

2. **Idee:** (falsch!) Wähle zufälligen Punkt im Einheitsquadrat und normiere. (Abb. 24a) Dieser ist auch falsch: Punkte auf dem Einheitskreis sind *nicht* gleichverteilt, entlang Diagonale wahrscheinlicher

$$\frac{w(1 \rightarrow 2)}{w(2 \rightarrow 1)} \stackrel{!}{=} e^{-\beta(E_2 - E_1)} = \frac{w_t(1 \rightarrow 2) w_a(1 \rightarrow 2)}{w_t(2 \rightarrow 1) w_a(2 \rightarrow 1)} = \frac{w_t(2 \rightarrow 1)}{w_t(1 \rightarrow 2)} e^{-\beta(E_2 - E_1)}$$

$$\text{wobei } \begin{cases} w_t : & \text{Wahrscheinlichkeit, Wert vorzuschlagen} \\ w_a : & \text{Wahrscheinlichkeit zu akzeptieren} \end{cases}$$

sodass

$$\Rightarrow w_t(2 \rightarrow 1) = w_t(1 \rightarrow 2)$$

Allgemeine Symmetriebedingung: Wahrscheinlichkeit für Versuchsschritte von Zustand $1 \rightarrow 2$ und zurück müssen gleich sein!

¹⁵genauer: Ergodisch bedeutet 'Zeit-Mittelwert $\hat{=}$ Ensemble-Mittelwert'

3. **Idee:** (stimmt!) Gleichverteilt auf Einheitskreis,
z.B. $\varphi_i \in [0, 2\pi)$ gleichverteilt, $\Delta H = -D \cos(\varphi_{trial})^2 + D \cos(\varphi_{initial})^2$.
 Und damit ergodisch und symmetrisch.

4. **Idee:** kleine Schritte um $\varphi_{initial}$:

$$\varphi_{trial} = \varphi_{initial} + \delta_{trial} \quad \delta_{trial} \in [-\Delta\varphi, \Delta\varphi] \text{ (gleichverteilt)}$$

Auch ergodisch und symmetrisch, wenn δ_{trial} symmetrisch gewählt wird.

Idee 3 ist identisch mit Idee 4 für $\Delta\varphi = \pi$. Für kleines $\Delta\varphi \ll \pi$: Unterschiedliche Dynamik, wie gezeigt in Abbildung 24a. Allgemein muss Idee 4 über den Energieberg, um Spin umzudrehen, Idee 3 nicht. Daher sind die Relaxationszeiten verschieden, aber Gleichgewichtseigenschaften sind gleich.

3.10.2 Heisenberg-Modell

$$H = - \underbrace{\frac{J}{2} \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j}_{\substack{\text{Austausch} \\ \text{Nächste Nachbarn}}} - D \underbrace{\sum_i S_{iz}^2}_{\text{Anisotropie}} - \mathbf{B} \underbrace{\sum_i \mathbf{S}_i}_{\text{Magnetfeld}}, \quad |\mathbf{S}_i| = 1 \quad (142)$$

single spin flip Algorithmus: Phasenraum des einzelnen Spins ist Einheitskugeloberfläche. Der Versuchsschritt muss

- ergodisch
- symmetrisch

sein.

1. gleichverteilt auf Einheitskugel

Wie erzeugt man Zufallsvariablen auf Einheitskugel?

• rejection Methode:

- ziehe 3 Zufallszahlen $\in [-1 : 1]$. (z_x, z_y, z_z) .
- verwirf die Wahl, wenn außerhalb der Einheitskugel. $\sqrt{z_x^2 + z_y^2 + z_z^2} > 1$.
- sonst normieren:

$$\begin{pmatrix} S_x^+ \\ S_y^+ \\ S_z^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z_x \\ Z_y \\ Z_z \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{Z_x^2 + Z_y^2 + Z_z^2}} \quad (143)$$

- Schnelle Methode, beruht auf 3 Zufallszahlen und Algebra. Relative Zahl der berücksichtigten Tripel

$$\frac{\frac{4}{3}\pi(1)^3}{(2+1)^3} = \frac{\pi}{6}$$

- **Kugelkoordinaten** Flächenelement: Einheitsvektoren beschreiben Punkte auf der Einheitskugeloberfläche. Flächenelement in Kugelkoordinaten ist:

$$dF = \underbrace{r^2}_{=1} \sin(\Theta) d\Theta d\varphi \quad (144)$$

Würde man gleichverteilte Zufallszahlen in Θ und φ nehmen, wären die Vektoren auf der Einheitskugeloberfläche nicht gleichverteilt, da $dF \propto \sin(\Theta)$

Aber:

$$\sin(\Theta) d\Theta = -d\cos(\Theta) = -dz \quad S_z = \cos(\Theta)$$

das heißt

$$\Rightarrow dF = -dS_z d\phi$$

\Rightarrow man kann S_z und ϕ gleichverteilt aus $[-1 : 1]$ und $[0 : 2\pi)$ wählen.

\Rightarrow Dies erzeugt gleichverteilte Vektoren auf der Einheitskugeloberfläche mit

$$\begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - S_z^2} \cos(\phi) \\ \sqrt{1 - S_z^2} \sin(\phi) \\ S_z \end{pmatrix}$$

Nachteil: $\cos()$, $\sin()$ müssen gerechnet werden \rightarrow langsam!

2. **kleine Schritte um den alten Vektor \mathbf{S} innerhalb eines Kegels**, wie in Abbildung 24b gezeigt:

- erzeuge Zufallsvektor \mathbf{S}_r innerhalb einer Kugel, also mit maximalen Radius R .
- rechne

$$\mathbf{S}_r = \frac{\mathbf{S} + \mathbf{S}_r}{\sqrt{\mathbf{S}^2 + \mathbf{S}_r^2}} \quad (145)$$

d.h. addiere \mathbf{S}_r und normiere.

- \mathbf{S}_r aus rejection Methode ohne Normierung

Diese Methode erzeugt kleine Schritte (je nach Wahl von R), sodass Anisotropie-Energiebarrieren überwunden werden müssen \rightarrow Konsequenzen für die Dynamik. Man kann maximale Schrittweite R berechnen um einen Monte Carlo Schritt zu eichen, also auf ein 'echtes' Zeitintervall im der dissipativen Dynamik des Systems abzubilden \rightarrow Zeitquantifizierung (*'time quantified Monte Carlo'*)

3.11 Perkolatation

- betrachte Gitter in d Dimensionen¹⁶
- besetze Plätze (Verbindungen) mit Wahrscheinlichkeit p
- definiere Nachbarschaft, z.B via nächste Nachbarn¹⁷

¹⁶(1d, 2d, 3d)

¹⁷je nach Fall vielleicht auch übernächste Nachbarn... bei Dottiierung einer Monolage beispielsweise

- Perkolation beschäftigt sich mit Clustern, d.h. besetzter, benachbarter Gitterplätze
- speziell oberhalb der sogenannten **Perkolationswahrscheinlichkeit** (oder Perkolationsgrenze) p_c gibt es einen ∞ großen, perkolierenden Cluster.¹⁸ \Rightarrow wichtig für z.B. Leitfähigkeit, (ferro)magnetische Ordnung

		p_c	bond
2d	Quadrat	0.592	0.5
	sc	0.312	0.249
3d	fcc	0.198	0.119
	bcc	0.245	0.179

Definition Korrelationsfunktion:

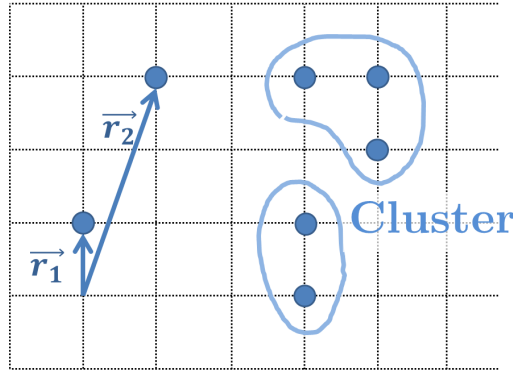


Abbildung 25

$g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$: Wahrscheinlichkeit, dass \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 zum gleichen Cluster (Abb. 25) gehören.

Korrelationslänge:

$$\xi^2 = \frac{\sum_r r^2 g(r)}{\sum_r g(r)} \quad (146)$$

diese Definition ist vereinbar mit $g(r) \propto e^{-\frac{r}{\xi}}$, da

$$\frac{\int d^3r r^2 e^{-\frac{r}{\xi}}}{\int d^3r e^{-\frac{r}{\xi}}} = \frac{\int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{r}{\xi}}}{\int_0^\infty dr r^2 e^{-\frac{r}{\xi}}} = \frac{\xi^5}{\xi^3} \frac{\int d^3r r^2 e^{-\frac{r}{\xi}}}{\int d^3r e^{-\frac{r}{\xi}}} \propto \xi^2 \quad (147)$$

- $p > p_c$: Beitrag des ∞ -großen Clusters wird subtrahiert
 $\Rightarrow g(r)$ geht immer gegen Null
- $p \rightarrow p_c$: $\xi(p) \propto |p - p_c|^{-\nu}$ mit kritischem Exponenten ν . Wieder gilt die Universalität $\nu_{2d} = \frac{4}{3}$, $\nu_{3d} = 0,88$ unabhängig vom Gitter!

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeitsverteilung $D(s, p)$ für Cluster der Größe s :

$$D(s, p) = (1 - p)^2 p^s = (1 - p)^2 e^{\ln(p)s} = (1 - p)^2 \underbrace{e^{-|\ln(p)|s}}_{\text{Korrelationslänge}} = (1 - p)^2 e^{-\frac{s}{\xi}} \quad (148)$$

¹⁸2d: ∞ große Cluster nicht möglich, in 2d schon.

mit Korrelationslänge

$$\xi = \frac{1}{|\ln(p)|} = -\frac{1}{\ln(p)}, \quad \ln(p) = p - 1 = p - p_c \quad \text{wobei } p_c = 1$$

Wir entwickeln um $p - p_c$:

$$\ln(p) \approx p - 1 \quad \Rightarrow \quad \xi(p \rightarrow p_c) = \frac{1}{p_c - p} = (p_c - p)^{-\nu}$$

mit dem kritischen Exponenten $\nu = 1$ der Korrelationslänge.

In höheren Dimensionen $D > 1$ sind nur numerische Verfahren möglich. Zentrale Größe für die Analyse ist die Verteilungsfunktion der Clustergrößen $D(s, p)$.

3.11.1 numerisches Verfahren zur Clusteranalyse

1. Rekursiv (Abb. 26)

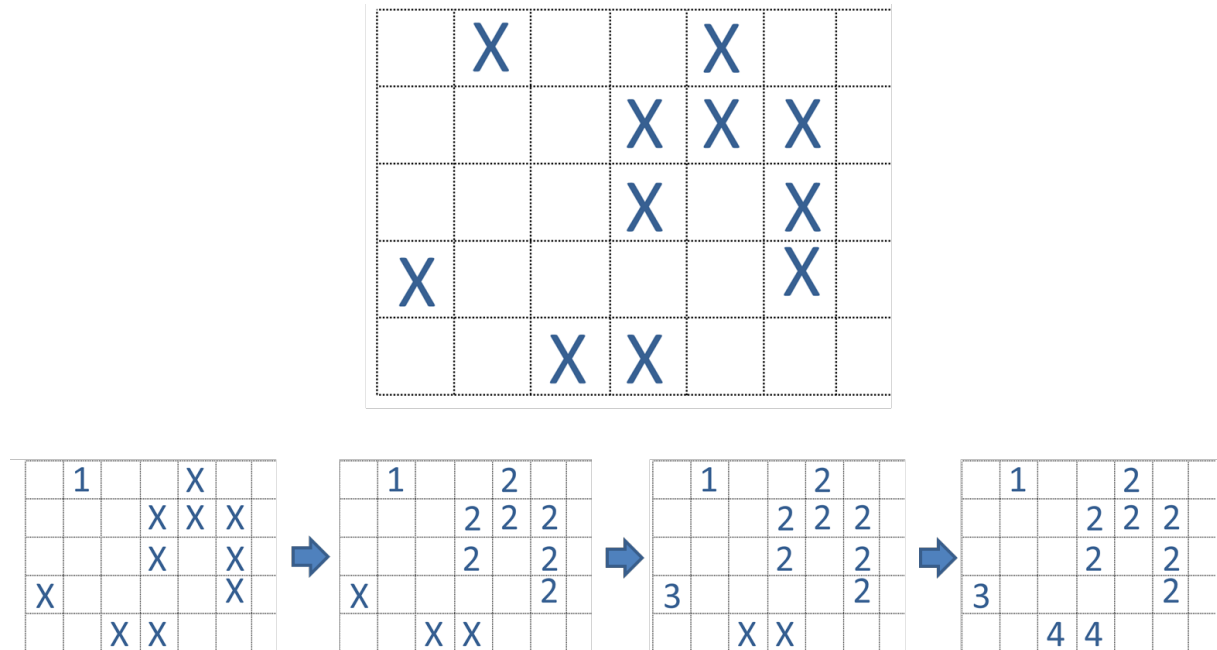


Abbildung 26

- Schleife durch das Gitter
- 1. Besetzter Platz erhält Index 1
- Nachbarn werden besucht, falls besetzt nicht indiziert
- weiter zum nächsten Platz falls besetzt und falls nicht indiziert, dann Index 2...

2. schneller: **Hoshen-Kopelman-Algorithmus**

Die **Cluster-Analyse** erlaubt weitere Auswertung der Verteilungsfunktionen $D(s, p)$.

- in der Nähe des kritischen Punktes p_c gilt $D(s, p_c) \propto s^{-\epsilon}$ mit einem kritischen Exponenten ϵ .

- weiter weg gilt $D(s, p) \propto e^{-\frac{s}{\xi}}$ mit $\xi(p) \propto |p_c - p|^{-\nu}$
- das perkolierende Cluster am kritischen Punkt ist ein Fraktal

Fraktal:

- gebrochene Dimension

$$s \propto \underbrace{r^{D_f}}_{\text{Gyrationsradius}} \quad \text{fraktale Dimension } D_f \quad (149)$$

- 'normal' wäre Fläche $F \propto r^2$ und Volumen $V \propto r^3$. D_f ist dabei kleiner als die einbettende Dimension (2, 3)
- Fraktale sind selbstähnlich¹⁹

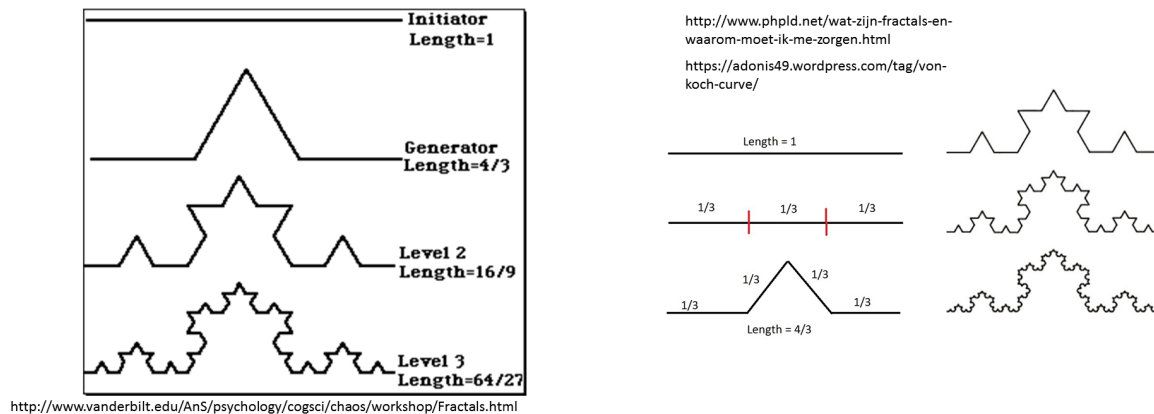


Abbildung 27: Fraktale

Beispiel: aus der Mathematik (Abb. 27):
allgemein:

$$\ln(as) = a^x \ln(s) \quad 4 = 3^x \Rightarrow x = \frac{\ln(4)}{\ln(3)}$$

setze:

$$a = \frac{1}{s} \Rightarrow \ln(1) = \left(\frac{1}{s}\right)^x \ln(s) \Rightarrow \ln(s) = \ln(1)s^x$$

x bezeichnet man dabei als die fraktale dimension.

4 Molekulardynamiksimulationen

Es gibt 2 Klassen von Verfahren in der statistischen Physik:

1. Monte Carlo (kanonische Gesamtheit)

¹⁹hier im statistischen Sinne

2. Molekulardynamik (zunächst) mikrokanonisch, d.h. die Energie bleibt erhalten. Durch Lösen der Bewegungsgleichungen für viele Teilchen

⇒ Wir brauchen ein Verfahren zur numerischen Lösung von DGL

Dynamische Systeme ist beispielsweise die Newtonsche Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \text{ (pro Teilchen)} \quad (150)$$

mit der Bahn $\mathbf{r}(t)$. Hier haben wir 3 DGLn 2.Ordnung mit den zwei Anfangsbedingungen

$$\mathbf{r}(t=0) \quad \dot{\mathbf{r}}(t=0)$$

Wir führen neue Variablen ein

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} \\ \dot{\mathbf{v}} = \frac{1}{m}\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \end{cases} \quad \text{mit } \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^6$$

Es handelt sich um 6 DGLn 1.Ordnung (siehe auch 'Hamilton Formalismus') . Es genügt aber eine DGL folgenden Typs zu studieren:

$$\dot{x} = f(x, t) \quad \text{mit } x \in \mathbb{R}^n \quad (\text{Dynamisches System})$$

4.1 Euler Verfahren

Eindimensional $\dot{x} = f(x, t)$, Abb. 28.

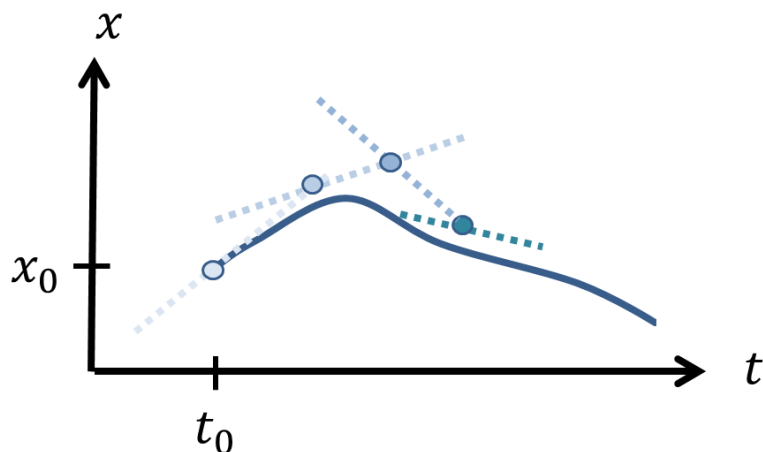


Abbildung 28

Taylor:

$$x(t_0 + h) = x(t_0) + \dot{x}(t_0)h + \mathcal{O}(h^2) \quad (151)$$

$$= x(t_0) + f(x, t_0)h + \mathcal{O}(h^2) \quad (152)$$

Diskretisierung der Zeit:

$$\left. \begin{array}{l} t_n = t_0 + nh \\ x_n = x(t_n) \end{array} \right\} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Euler:

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n, t_n)h + \mathcal{O}(h^2) \quad (153)$$

Fehler des Einzelschritts $\propto h^2$. Für ein Intervall der Länge T benötigt man $N = \frac{T}{h}$ Schritte.

$$\text{Gesamtfehler} \propto h^2 N \propto h \quad (154)$$

Fehler oben heißt **systematischer Fehler**. Er entsteht durch die Approximation. Verkleinern durch $h \rightarrow 0$ - Geht das? Nein! Wegen *Rundungsfehlern* und eventueller *Instabilitäten*.

4.2 Stabilitätsanalyse

x_n : berechne Werte $x(t)$ mit Fehler ϵ_n :

$$\mathbf{x}_{n+1} + \boldsymbol{\epsilon}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \boldsymbol{\epsilon}_n + \mathbf{f}(x_n + \boldsymbol{\epsilon}_n, t_n)\Delta t := \mathbf{T}(\mathbf{x}_n + \boldsymbol{\epsilon}_n) \quad (155)$$

entwickle T für kleines $\boldsymbol{\epsilon}_n$:

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}_n + \boldsymbol{\epsilon}_n) \approx \mathbf{T}(\mathbf{x}_n) + \underbrace{\frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{x}}}_{\substack{\text{Funktional-} \\ \text{matrix} \\ \text{(Jacobi)}}} \bigg|_{x_n} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_n \Rightarrow \boldsymbol{\epsilon}_{n+1} = \frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{x}} \bigg|_{x_n} \boldsymbol{\epsilon}_n \equiv \underline{\underline{\mathbf{G}}} \boldsymbol{\epsilon}_n \quad (156)$$

weil

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{T}_{x_n}$$

Der Fehler divergiert nur dann nicht, wenn für alle Eigenwerte von $\underline{\underline{\mathbf{G}}}$, $|g_i| \leq 1$ gilt²⁰.

Beispiel 1:

$$\frac{dx}{dt} = -\lambda x \quad (\text{zum Beispiel radioaktiver Zerfall für } \lambda > 0)$$

Euler:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n(1 - \lambda\Delta t) = T(x_n) \Rightarrow \epsilon_{n+1} = \frac{dT}{dx} \bigg|_{x_n} \epsilon_n = (1 - \lambda\Delta t) \epsilon_n \\ &\Rightarrow |1 - \lambda\Delta t| < 1, \quad \forall \lambda > 0, \Delta T \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (157)$$

\Rightarrow stabil! (instabil für $\lambda < 0$)

²⁰Achtung, g_i kann komplex sein!

Beispiel 2: (harmonischer Oszillator)

$$\ddot{z} = -\omega^2 z \quad (158)$$

$$\left. \begin{array}{l} x_1 = z \\ x_2 = \dot{z} \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -\omega^2 x_1 \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} x_1(n+1) = x_1(n) + x_2(n)\Delta t \\ x_2(n+1) = x_2(n) - \omega^2 x_1(n)\Delta t \end{array} \right\} \Rightarrow \underline{\underline{\mathbf{G}}} = \begin{pmatrix} 1 & \Delta t \\ -\omega^2 \Delta t & 1 \end{pmatrix} \quad (159)$$

für Eigenwerte aus

$$\left| \begin{array}{cc} 1-g & \Delta t \\ -\omega^2 \Delta t & 1-g \end{array} \right| \stackrel{!}{=} 0 \quad \Leftrightarrow \quad 0 = (1-g)^2 + \omega^2 \Delta t^2 \quad (160)$$

$$\Leftrightarrow g_{1,2} = 1 \pm i\omega t \quad \Leftrightarrow \quad |g_{1,2}| = \sqrt{1 + \omega^2 \Delta t^2} < 1, \quad \forall \omega, \Delta t \Rightarrow \text{immer instabil}$$

Anschauliche Erklärung: Was passiert?

Wir betrachten noch einmal:

$$\dot{x} = f(x) = -\lambda x \quad \Rightarrow \quad x(t) = x_0 e^{-\lambda t} \quad \Rightarrow \quad \text{stabil} \quad (161)$$

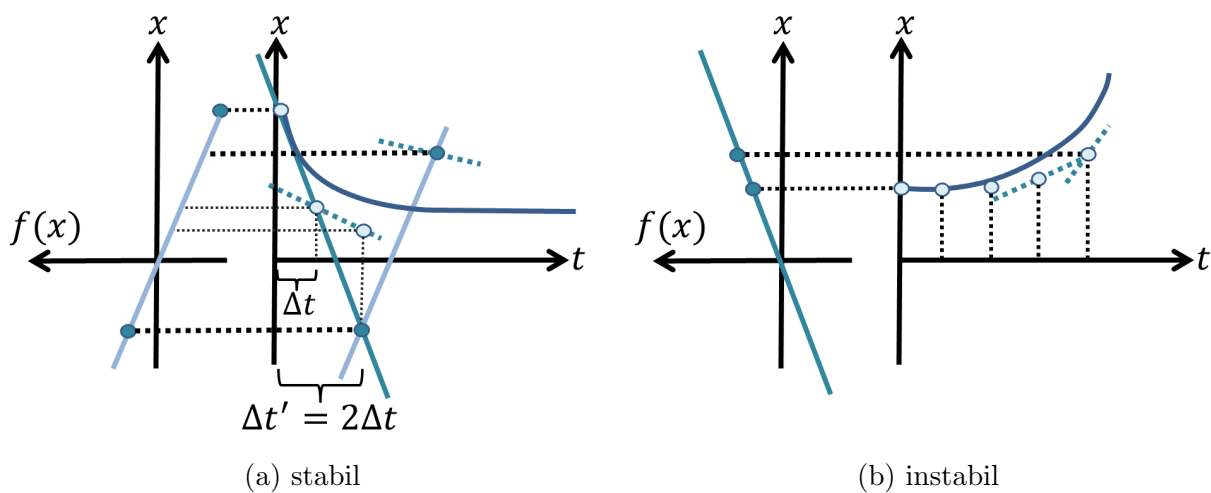


Abbildung 29: Anschauliche Erklärung

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_n, t_n) = x_n - \lambda x_n \Delta t$$

$$\dot{x} = f(x) = +\lambda x \quad \Rightarrow \quad \lambda > 0 \quad \Rightarrow \quad \text{instabil}$$

Siehe Abbildung 29.

Weitere Tests (numerisch):

- Erhaltungssätze überprüfen: Energie-, Impuls-, Drehimpulserhaltung
- Rückwärtsintegration

4.3 Runge-Kutta Verfahren

Es gibt viele bessere Verfahren

- stabiler
- schnellere Konvergenz

Warum schneller? Schneller muss dabei im einzelnen abgewogen werden:
→ 'CPU-Zeit \Leftrightarrow bessere Konvergenz'.

Euler:

$$\begin{aligned}x(t_n + h) &= x(t_n) + \dot{x}(t_n) \cdot h + \mathcal{O}(h^2) \\x(t_n - h) &= x(t_n) - \dot{x}(t_n) \cdot h + \mathcal{O}(h^2)\end{aligned}$$

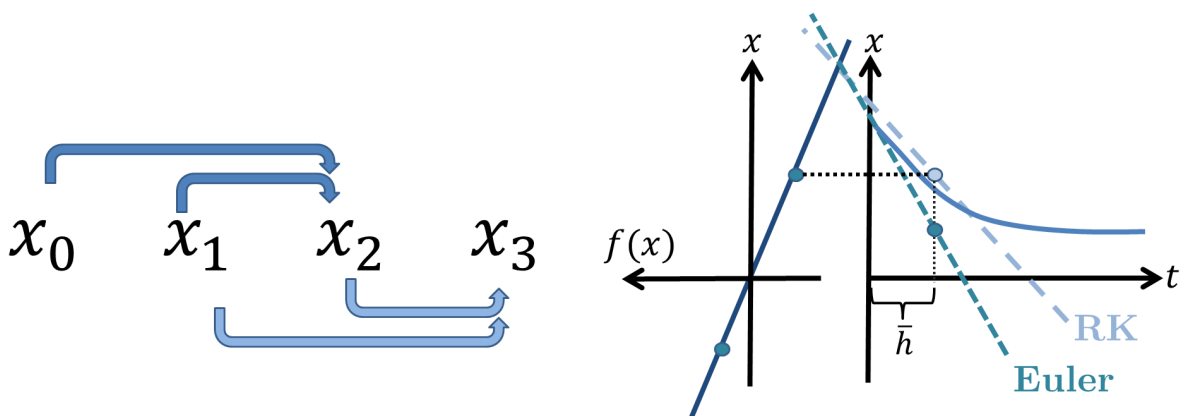
$$\Rightarrow x(t_n + h) - x(t_n - h) = 2h \dot{x}(t_n) + \mathcal{O}(h^3)$$

Lösung von $\dot{x} = f(x, t)$:

Runge-Kutta 1. Stufe

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= x_{n-1} + 2hf(x_n, t) + \mathcal{O}(h^3) \\x_{n+2} &= x_n + 2hf(x_{n+1}, t) + \mathcal{O}(h^3)\end{aligned} \quad (162)$$

Man nennt dies auch '**Bocksprung**', '**Leap-Frog**' oder '**Merhschrittverfahren**'.



(a) RK 1.Stufe, Prinzip

(b) RK 2. Stufe im Vergleich mit Euler

Abbildung 30

noch besser: Runge-Kutta 2.Stufe.

$$x_{n+1} = x_{n-1} + 2hf(x_n, t_n) + \mathcal{O}(h^3)$$

man braucht wegen x_{n-1} und x_n zwei Anfangswerte. Berechne x_n aus Euler:

$$x_n = x_{n-1} + hf(x_{n-1}, t_{n-1}) + \mathcal{O}(h^2)$$

umschreiben mit

$$2h = \bar{h}$$

liefert

Runge-Kutta 2. Stufe

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2} \bar{h} f(x_n, t_n) \\ x_{n+1} &= x_n + \bar{h} f(x_n + K, t_n + \frac{1}{2}\bar{h}) + \mathcal{O}(h^3) \\ t_{n+1} &= t_n + \bar{h} \end{aligned} \quad (163)$$

Auch bekannt als '**Zwischenschritt-Verfahren**'.

Beispiel: (DGL 2. Ordnung)

$$\ddot{x} = f(x, t) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = f(x, v, t) \end{cases} \quad (164)$$

RKZ:

$$\begin{aligned} K_x &= \frac{1}{2} h v_n \\ K_v &= \frac{1}{2} h f(x_n, t) \\ x_{n+1} &= x_n + h (v_n + K_v) \\ v_{n+1} &= v_n + h f(x_n + K_x, v_n + K_v, t_n + \frac{1}{2}h) \\ t_{n+1} &= t_n + h \end{aligned}$$

(ohne Beweis:) Runge Kutta 4.Stufe:

$$\begin{aligned} K_1 &= h f(x_n, t_n) \\ K_2 &= h f(x_n + \frac{1}{2}K_1, t_n + \frac{h}{2}) \\ K_3 &= h f(x_n + \frac{1}{2}K_2, t_n + \frac{h}{2}) \\ K_4 &= h f(x_n + K_3, t_n + h) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) + \mathcal{O}(h^5) \\ t_{n+1} &= t_n + h \end{aligned}$$

Prinzip: 4 Punkte werden zur Integration herangezogen.

$$\dot{x} = f(x, t) \quad \Rightarrow \quad x_{n+1} - x_n = \int_{t_n}^{t_n+h} dt f(x(t), t) \quad x(t) \text{ aber unbekannt!}$$

4.4 Schrittweitenanpassung

- einfachste Vorgehensweise: feste Schrittweite h + Tests, ob die Lösung wirklich stabil, richtig... ist.
- unter Umständen ist aber eine dynamische Anpassung der Schrittweite besser. Anpassung durch Vergleich (z.B. von RK2 und RK4)

RK2:

$$x_{n+1} = x_n + K_2 + \mathcal{O}(h^3) \quad (165)$$

RK4:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad (166)$$

$$= x_n + K_2 + \underbrace{\frac{1}{6}(K_1 - 4K_2 + 2K_3 + K_4)}_{\delta} + \mathcal{O}(h^5) \quad (167)$$

δ ist ein Maß für den Fehler von RKZ und

$$\delta = \mathcal{O}(h^3)$$

Wir definieren weiterhin den **relativen Fehler**:

$$\left| \frac{\delta}{K_2} \right| = \mathcal{O}(h^2) \quad (168)$$

und versuchen diesen Fehler konstant zu halten

$$\left| \frac{\delta}{K_2} \right| = a h^2 \stackrel{!}{=} \epsilon. \quad (169)$$

Dieser wird vorgegeben durch Wahl von h . Verlange

$$a h_{neu} = \epsilon \quad \Rightarrow \quad h^2 = \frac{\epsilon}{a} = h^2 \frac{\epsilon}{\left| \frac{\delta}{K_2} \right|} \quad (170)$$

$$h_{neu} = h \sqrt{\frac{\epsilon}{\left| \frac{\delta}{K_2} \right|}} \quad (171)$$

also:

- h vorgegeben $\rightarrow \epsilon = \left| \frac{\delta}{K_2} \right|$
- ϵ konstant halten
- immer wieder neues h berechnen aus $\left| \frac{\delta}{K_2} \right|$

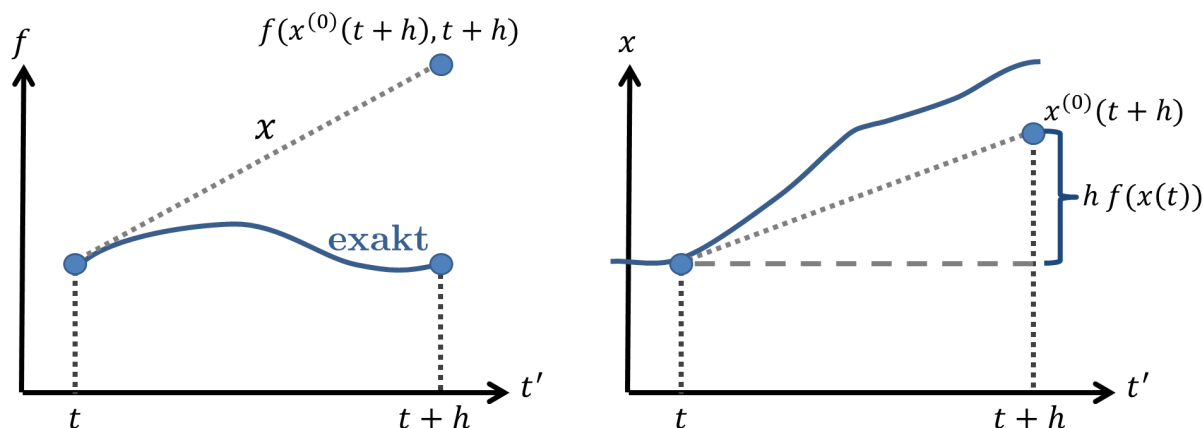


Abbildung 31

4.5 Prädiktor-Korrelator-Verfahren

Ein sehr genaues und stabiles Verfahren. Hier soll nur das Prinzip erläutert werden. (Siehe auch Abb. 31)

$$\dot{x} = f(x, t) \quad \xrightarrow{\text{Integrieren}} \quad x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} dt' f(x(t'), t')$$

Dabei ist $x(t')$ aber nicht bekannt!

- 1) Prädiktor: $x^{(0)}(t+h) = x(t) + h f(x(t), t)$ (im einfachsten Fall Euler)
- 2) Konstruktor: $x^{(1)}(t+h) = s(t) + \frac{1}{2} (f(x(t), t) + f(x^{(0)}(t+h), t+h))$

$x^{(1)}$ ist genauer, weil f nicht an linken Integralgrenze (\rightarrow Rechteckregel) sondern als Mittelwert von linker und rechter (nicht exakt) genommen wird (\rightarrow Trapezregel).

Verfahren kann iteriert werden:

$$x^{(0+1)}(t+h) = x(t) + \frac{h}{2} (f(x(t), t) + f(x^{(\nu)}(t+h), t+h))$$

Mit steigendem ν wird $x^{(\nu)}$ immer besser, d.h. es konvergiert gegen einen Fixpunkt $x^*(t+h)$.

$$x^*(t+h) = x(t) + \frac{h}{2} (f(x(t), t) + f(x^*(t+h), t+h))$$

In der Praxis:

- 1) Prädiktor häufig aus komplizierteren Formeln als Euler, dafür aber besser
- 2) unter Umständen mehrere Prädiktor-Korrelation-Schritte

4.6 Chaotische Systeme und fraktale Dimensionen

Chaos: Typisches Gebiet der Physik, das durch Einsatz von Rechnen unglaublich beeinflusst wurde, obwohl prinzipiell schon in Newtonscher Bewegungsgleichung enthalten. Dynamisches System

$$\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t)$$

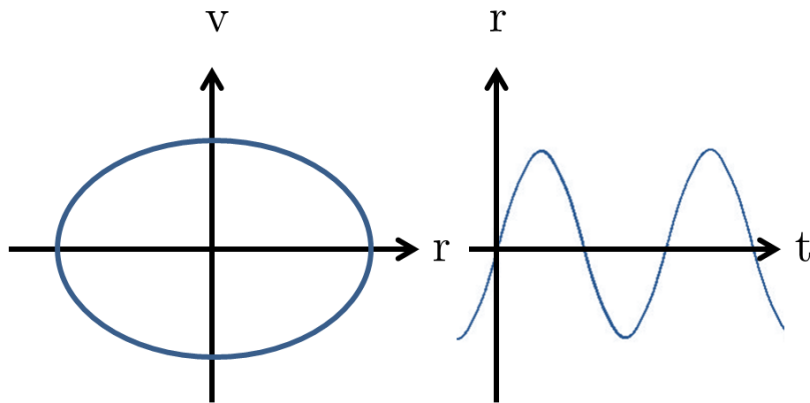


Abbildung 32

wird beschrieben durch Trajektorie $(x(t), v(t))$ im Phasenraum.

Beispiel (harmonischer Oszillator, Abb. 32)

$$\begin{aligned}\dot{r} &= v \\ \dot{v} &= -\omega^2 r\end{aligned}$$

System ist deterministisch, d.h. aus den Anfangsbedingungen x_0, v_0 folgt eindeutig die Trajektorie. Seit POINCARÉ (1892) ist ebenso bekannt, dass solche DGLn unter Umständen 'irreguläres Verhalten' zeigen können.

Anschaulich: 'normal' ist:

- gebunden \rightarrow periodisch
- nicht gebunden
- zur Ruhe kommend (gedämpft)

\Rightarrow 'chaotisch' wäre gebunden, aber nicht periodisch.

Geht das denn überhaupt?

- betrachte

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \quad (2d)$$

Trajektorien können sich nicht schneiden. Wenn eine Trajektorie (siehe Abb. 36)

- endet \rightarrow *Fixpunkt*
- sich schließt \rightarrow *periodische Bewegung*

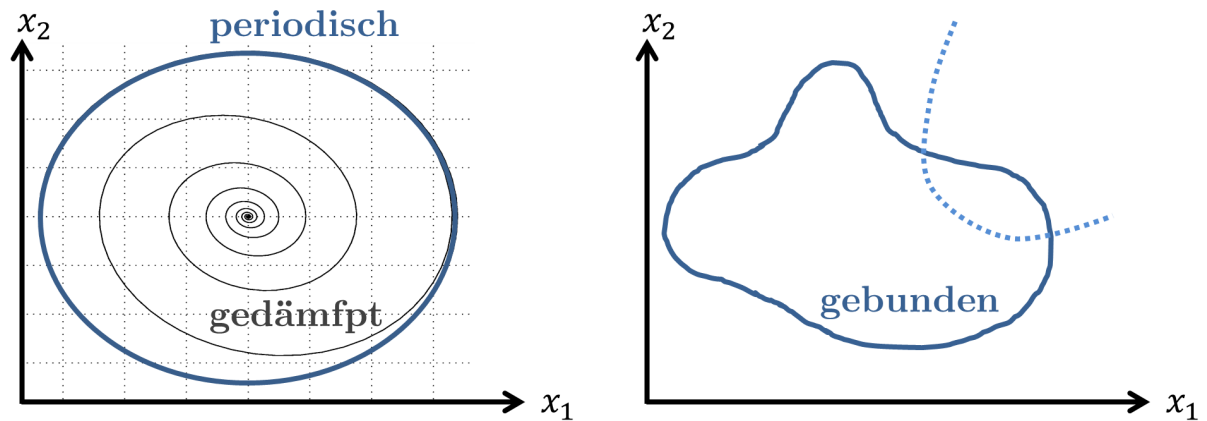


Abbildung 33

Für Chaos braucht man entweder

$$d \geq 3$$

oder $\dot{x} = f(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t)$,

denn nur dann können sich Trajektorien in $2d$ schneiden.

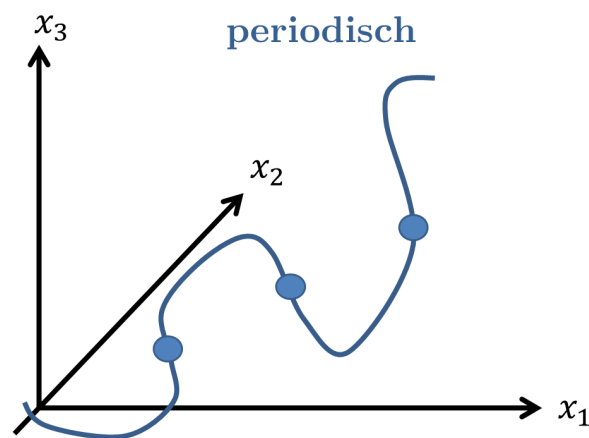


Abbildung 34

1d Molekularphysik mit $\mathbf{F} + \mathbf{F}(t)$ kann nicht chaotisch werden! Ab $d = 3$ kann eine Trajektorie in höhere Dimensionen ausweichen. Siehe Skizze in Abbildung 34. POINCARÉ-Schritt ist Punktmenge in (z.B) der $x_3 = 0$ Ebene.

- A muss **nicht linear** sein (sonst gibt es Schwingungen oder exponentielle Lösungen)

Wir betrachten als Beispiel für ein chaotisches System den DUFFING-Oszillator: **Beispiel:** (Duffing-Oszillator)

MP in 1 räumlichen Dimension mit

$$m\ddot{x} = F(x, \dot{x}, t) = -V_0(x^3 - x) - \underbrace{\beta\dot{x}}_{\text{Reibung}} + \underbrace{\gamma \cos(\omega t)}_{\text{treibende Kraft mit Frequenz } \omega}$$

mit Potential

$$V(x) = V_0 \left(\frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2} \right)$$

Für Numerik: 2 DGLn 1. Ordnung:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{v} = \frac{1}{m} F(x, \dot{x}, t) \\ \dot{x} = v \end{array} \right\} \Rightarrow \text{nicht linear, zeitabhängig} \rightarrow \text{Chaos nachweisbar}$$

\Rightarrow RK 2. Stufe.

Diskussion:

0) **Tests:** Harmonischer Oszillator, $x(0) = \pm 1$, Reibung...

1) **Fixpunkte:** Punkte im Phasenraum, für die die Lösung stationär ist.

$$F = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \gamma = 0, \\ x = \pm 1v = 0 \end{cases}$$

für lange Zeiten und $\gamma = 0$ endet man in einem der beiden Fixpunkte.

2) **Attraktor:** Punktmenge im Phasenraum, auf der die Lösung für $t \rightarrow \infty$ liegt (siehe Beispiel: Trajektorie des harmonischen Oszillators, Abbildung 36 (links)). Mit Reibung ohne Antrieb folgt, dass der Attraktor gleich dem Fixpunkt ist. Eigenschaften des 'seltsamen Attraktors' (*strange*), d.h. im chaotischen Bereich ($\beta = 1, \gamma \approx 0.8$)

- nicht periodisch
- nicht $2d$ (d.h. füllt nicht den Raum)
- zwei benachbarte Trajektorien auf dem Attraktor laufen auseinander

\Rightarrow formale Definitionen von Chaos durch LYAPONOV-Exponenten, der das Auseinanderlaufen beschreibt

Fraktale Dimensionen/ Box-Counting

Wie definiert/bestimmt man die Dimension eines Objektes bzw. einer Punktmenge? Einbettende Dimension ($d = 2$), Volumen V , Abbildung 35a.

- Führe Quadrate der Kantenlänge ϵ ein.
- Zähle die Würfel, in die ein Punkt der Menge fällt $N(\epsilon)$

$$N(\epsilon) \propto \epsilon^{-D} \quad (\text{klar bei euklid. Objekten: } d = D)$$

Definition der

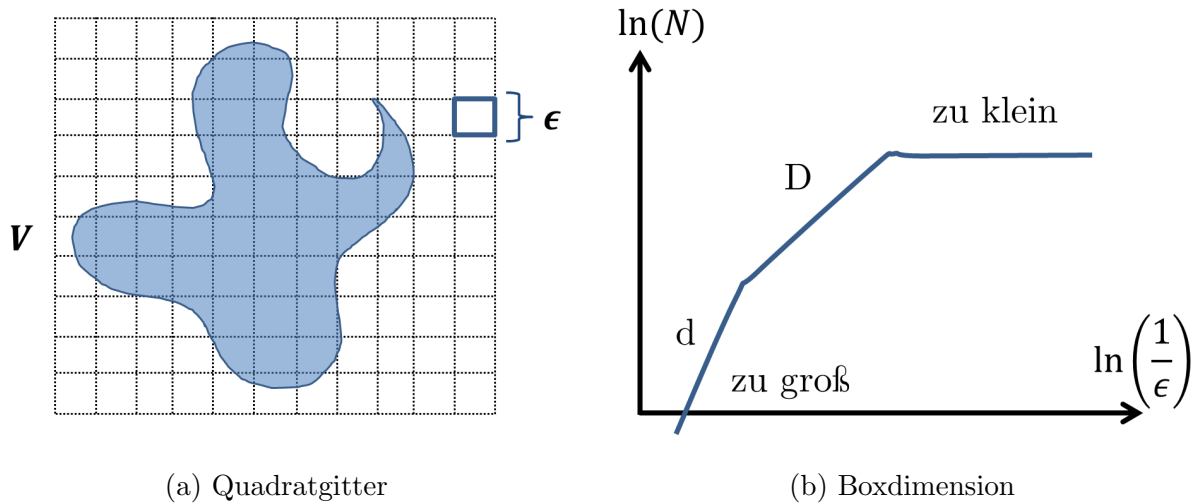


Abbildung 35

Hausdorff-Dimension

$$D = -\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln(N(\epsilon))}{\ln(\epsilon)} \quad (172)$$

Ein fraktales Objekt muss also auf allen Längenskalen durchlöchert sein. Problematisch für numerische Anwendungen ist jedoch $\lim \epsilon \rightarrow 0$, denn numerisch ist die Zahl der Punkte begrenzt (N_0)

- 1) Ist ϵ zu klein: es stehen nur N_0 Punkte zur Verfügung: $\Rightarrow N(\epsilon) = N_0 = \text{const.}$
- 2) Ist ϵ zu groß: jede Box enthält Punkte $\Rightarrow N(\epsilon) = \frac{V}{\epsilon^d} \propto \epsilon^{-d}$

Siehe Abbildung 35b.

Fraktale in der Natur sind (ähnlich wie beim Rechnen) stets begrenzt, d.h. es gibt obere und untere Abschnitte-Längenskalen, z.B. die Ausdehnung des Gesamtobjektes (ohne) und die Mikrostruktur, z.B. Zelle, Atom...(unten).

Wichtige Eigenschaften:

- Fraktale haben in der einbettenden Dimension kein Volumen:

$$V_F \approx \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \underbrace{\epsilon^d}_{\text{Volumen}} \cdot \underbrace{\epsilon^{-D}}_{\text{Anzahl der Boxen}} = 0$$

Beispiel: DLA (Diffusion limited aggregation $\hat{=}$ *Diffusionsbedingtes Wachstum*)

- zufälliger Startwert
- random walk bis Keim erkannt wird, dann Anlagerung
- \Rightarrow Cluster wächst
- (Simulation, z.B. $d=2$, Quadratgitter)

Tricks:

- Startradius nachfahren
- Außenradius einführen und bei Verlassen neues Teilchen starten
- Fraktale sind **selbstähnlich**, d.h. sie haben einen zu Grunde legenden Bauplan, der sich auf allen Längenskalen wiederholt (\rightarrow Koch-Kurve). In der Praxis werden andere Verfahren verwendet, um D zu bekommen, nämlich aus einer Beziehung zwischen Volumen V (Zahl der Punkte) und Längenskala R einer Menge von Objekten.
 - Menge von Objekten:
 - * entweder während Wachstum
 - * oder bei Zerlegen eines Systems in viele Teilsysteme
 - Volumen V = Zahl der Punkte
 - $R = \sqrt{\sum_{i=1}^N (r_i - r_{\text{Schwerpunkt}})^2 \frac{1}{n}} = \text{Gyrationsradius}$

4.7 Molekulardynamik im mikrokanonischen Ensemble

moderne Physik beschäftigt sich viel mit Vielteilchensystemen (wie Gase, Flüssigkeiten, Plasma) meist speziell Festkörperproblemen (Halbleiterphysik, Magnetismus...) Betrachtet man die Teilchen als klassisch (z.Bsp. hinreichend große Moleküle²¹ oder granulare Materie), kann man die Bewegungsgleichung für wechselwirkende Teilchen lösen: **Molekulardynamik-Simulation**. (Wichtiges Verfahren)

- (Intensive Wechselwirkungen) $\hat{=}$ MD-Simulationen.
- Teilchen können innere Freiheitsgrade haben. Beispielsweise bei Molekülen: Rotation und Schwingung. Wird im einfachsten Fall vernachlässigt
 \rightarrow Moleküle als Kugel mit Schwerpunkt(skoordinate) \mathbf{r}_i :
- N Teilchen, die miteinander wechselwirken mit Potential $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$

\Rightarrow Bewegungsgleichung (nach NEWTON):

Newton'sche Bewegungsgleichung

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = -\text{grad}_{\mathbf{r}_i} V(\mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \quad i = 1, \dots, N \quad (173)$$

mit Anfangsbedingungen $\mathbf{r}_i^{(0)}, \dot{\mathbf{r}}_i^{(0)}$

- Achtung, ohne Dissipation erhalten diese MD Simulationen die Energie und Teilchenzahl
 - *mikrokanonisches Ensemble*
 - innere Energie U durch Anfangsbedingungen vorgegeben
 - Entropie $S(U, V, N)$ wird maximiert

Wie üblich, wird die Zeit diskretisiert. Des Weiteren, gibt es zwei verschiedene Vorgehen, je nach Problemstellung:

²¹...daher auch die Namensgebung

1. Teilchen dicht gepackt, sie wechselwirken zu jeder Zeit mit den anderen
 - \Rightarrow diskretisieren Zeit $t \rightarrow \Delta t$ also festes Zeitintervall Δt , lösen alle DGL zu jedem Zeitschritt
 - \Rightarrow **Zeitgesteuerte MD Simulation**, zu englisch ('*time step driven*').
2. Teilchen weit auseinander (im Verhältnis zur Reichweite der Wechselwirkung)
 - \Rightarrow die Teilchen fliegen frei auf endlichen Strecken
 - \Rightarrow zwischen Stößen wird die DGL analytisch gelöst nur für den Stoßprozess wird DGL mit Potential numerisch gelöst
 - \Rightarrow **Ereignisgesteuerte Simulation** ('*event driven*')

Zu 1) TD: populär ist der **Verlet Algorithmus**, den es in 2 Versionen gibt:

1)

$$\mathbf{r}_i(t+h) = \mathbf{r}_i(t) + h \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{h^2}{2} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathcal{O}(h^2) \quad (174)$$

$$\mathbf{r}_i(t-h) = \mathbf{r}_i(t) - h \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{h^2}{2} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) - \mathcal{O}(h^2) \quad (175)$$

I. Verlet-Algorithmus

$$\mathbf{r}_i(t+h) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t-h) + h^2 \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathcal{O}(h^4) \quad (176)$$

$$\text{mit} \quad \ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t))}{m} \quad (177)$$

Anfangsbedingungen

$$\mathbf{r}_i(0), \dot{\mathbf{r}}_i(0) \quad \underbrace{\Rightarrow}_{\text{Euler}} \quad \mathbf{r}_i(h) = \mathbf{v}_i(0)h + \mathbf{r}_i(0)$$

Dabei wird $\mathbf{r}_i(t+h)$ berechnet, ohne dass \mathbf{v}_i berechnet werden muss. Wenn \mathbf{v} bestimmt werden muss (z.B. für kinetische Energie):

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{r}(t+h) - \mathbf{r}(t-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

2) Geschwindigkeitsvariation: (*häufiger*)

$$\mathbf{r}(t+h) = \mathbf{r}(t) + \dot{\mathbf{r}}(t)h + \frac{h^2}{2} \ddot{\mathbf{r}}(t) + \mathcal{O}(h^3) \quad (178)$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t+h) = \dot{\mathbf{r}}(t) + \ddot{\mathbf{r}}(t)h + \frac{h^2}{2} \dddot{\mathbf{r}}(t) + \mathcal{O}(h^3) \quad (179)$$

und

$$h \ddot{\mathbf{r}}(t) = \ddot{\mathbf{r}}(t+h) - \ddot{\mathbf{r}}(t) + \mathcal{O}(h^2) \quad (180)$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t+h) = \dot{\mathbf{r}}(t) + \frac{h}{2}(\ddot{\mathbf{r}}(t) + \ddot{\mathbf{r}}(t+h)) + \mathcal{O}(h^3) \quad (181)$$

$$\text{mit} \quad \ddot{\mathbf{r}}(t) = \frac{\mathbf{F}(\dot{\mathbf{r}}_1(t), \dots, \dot{\mathbf{r}}_N(t))}{m}$$

$$\ddot{\mathbf{r}}(t+h) = \frac{\mathbf{F}(\dot{\mathbf{r}}_1(t+h), \dots, \dot{\mathbf{r}}_N(t+h))}{m}$$

Anfangsbedingungen $\mathbf{r}_i(0), \dot{\mathbf{r}}_i(0) \Rightarrow \mathbf{F}(\mathbf{r}_1(0), \dots, \mathbf{r}_N(0))$

1. Schritt: $\mathbf{r}(t+h)$ aus $\mathbf{r}(t), \dot{\mathbf{r}}(t)$
2. Schritt: $F(\mathbf{r}_1(t+h), \dots, \mathbf{r}_N(t+h))$
3. Schritt: $\dot{\mathbf{r}}(t+h)$ aus $\mathbf{r}(t), \mathbf{r}(t+h), \dot{\mathbf{r}}(t)$

wichtiges Kriterium für Güte eines Algorithmus:

Erhaltung der Energie: hier:

- Mittelwert stabil
- momentane Werte schwanken (sollte ja eigentlich nicht sein)

Es gibt auch andere Algorithmen mit:

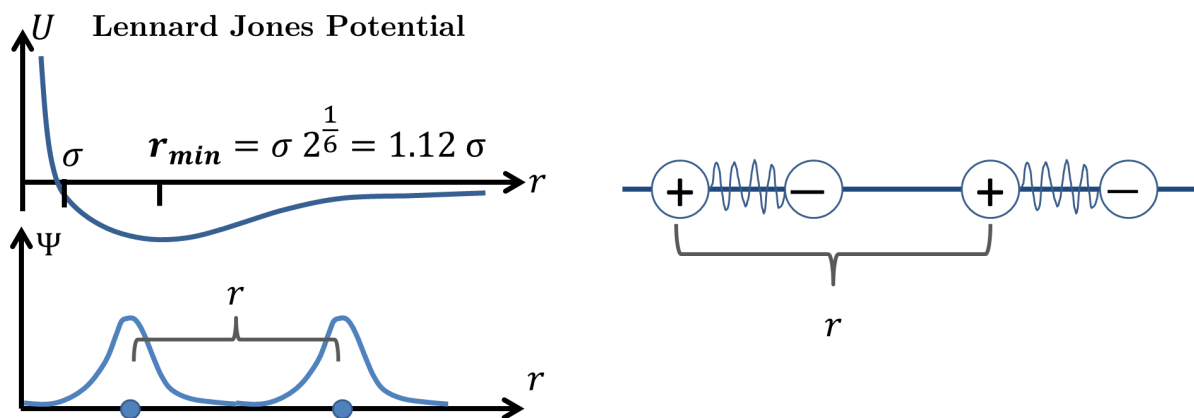
- geringere momentane Schwankung
- Drift der Energie auf längeren Zeitskalen

Kräfte: zur Beschreibung eines Festkörpers: QM-Rechnung der Kräfte auf Atome (sog. ab-initio Rechnungen)

\Rightarrow Energie als Funktion der Atomposition

\Rightarrow Gitterstruktur, Gleichgewichtsabstände, Kräfte

für Gase, Flüssigkeiten gibt es das stark vereinfachte



(a) Lennard Jones Potential und die überlap-
pende Wellenfunktion zweier Atome

(b) Polarisation der Ladungsverteilung (Van der
Waals Kräfte)

Abbildung 36

Lennard-Jones-Potential

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (182)$$

für neutrale Atome ohne innere Freiheitsgrade, gezeigt in Abbildung 36a.

- **kleine Abstände:** Wellenfunktion zweier Atome überlappen, (Abb. 36a) Pauli Prinzip verbietet Annäherung (bei abgeschlossenen Schalen im gleichen Zustand)
 $\Rightarrow U \propto r^{-12}$ (gut für Edelgase)
bei nicht abgeschlossenen Schalen auch chemische Bindung möglich. (H_2 Molekül)
- **große Abstände:** VAN DER WAALS Kräfte durch Polarisierung der Ladungsverteilung (Abb. 36b)
 \Rightarrow anziehende Wechselwirkung der Dipole (QM-Effekt) mit $U \propto -r^{-6}$.
- eventuell auch weitere Wechselwirkungen wie z.B. Coulombwirkung bei elektrisch geladenen Teilchen, ...

Beispiel: (N Teilchen mit Lennard-Jones Potential)

- Anfangsbedingung: $\mathbf{v}_i(0) = 0$, $\mathbf{r}_i(0)$ äquidistant, Eindimensional (1D)

zu 2) ereignisgesteuerte Simulation

- $\mathbf{r}_i^{(0)}, \mathbf{v}_i^{(0)}$ seinen Koordinaten nach einem Stoß (oder Anfangsbedingung):

$$\mathbf{r}_i(t) = \mathbf{r}^{(0)} + \mathbf{v}^{(0)}t$$

Bilde nun alle $\frac{N(N-1)}{2}$ Abstände zwischen dem Teilchen

$$|\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_j(t)| > R_i + R_j \quad \forall i, j \quad \Rightarrow \quad \text{freier Flug}$$

- Stoß findet statt, wenn für ein Paar (i, j) gilt:

$$\begin{aligned} |\mathbf{r}_i(t_s) - \mathbf{r}_j(t_s)| &= R_i + R_j & t_s &= \text{Stoßzeit} \\ \text{und } |\mathbf{r}_i(t_s) - \mathbf{r}_j(t_s)| &> R_i + R_j & \forall 0 < t < t_s \text{ und alle anderen } i, j \end{aligned}$$

1. **Berechnung der Stoßzeit** (für gleiche Radien):

$$|\mathbf{r}_i^{(0)} - \mathbf{r}_j^{(0)} + (\mathbf{v}_i^{(0)} - \mathbf{v}_j^{(0)}) t_{s,ij}| = 2R$$

$$\Rightarrow (\Delta \mathbf{r}_{i,j})^2 + 2(\Delta \mathbf{r}_{i,j})(\Delta \mathbf{v}_{i,j})t_{s,ij} + (\Delta \mathbf{v}_{i,j})^2 t_{s,ij}^2 = 4R^2$$

$$t_{s,ij} = \frac{1}{(\Delta \mathbf{v}_{i,j})^2} \left(-\Delta \mathbf{v}_{i,j} \Delta \mathbf{r}_{i,j} - \sqrt{(\Delta \mathbf{v}_{i,j} \Delta \mathbf{r}_{i,j})^2 - ((\Delta \mathbf{r}_{i,j})^2 - 4R^2)(\Delta \mathbf{v}_{i,j})^2} \right)$$

Stoßzeit $t_s = \min\{t_{s,ij} > 0\} \quad \forall i, j$

2. **Geschwindigkeitsänderung bei Stoß**

Hier ist die Kraft \perp Kugeloberfläche.

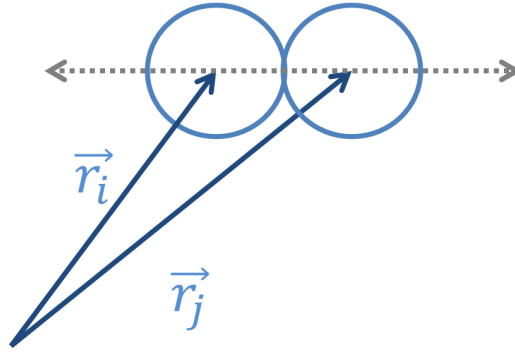


Abbildung 37

- Impulsänderung entlang der Verbindungsline der Schwerpunkte $||\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j||$
- Änderung von $\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j$ folgt aus Energiesatz und Impulssatz
(hier: gleiche Massen als harte Kugeln, Abb. 37)

Impulssatz:

$$m(\mathbf{v}'_i - \mathbf{v}_i) = -m(\mathbf{v}'_j - \mathbf{v}_j) \quad \text{mit } (v' \hat{=} \text{nach Stoß})$$

Energiesatz:

$$\begin{aligned} \frac{m}{2}(\mathbf{v}_i^2 + \mathbf{v}_j^2) &= \frac{m}{2}(\mathbf{v}'_i{}^2 + \mathbf{v}'_j{}^2) & + Q \\ \text{mit} \quad \mathbf{v}_i^2 - \mathbf{v}'_i{}^2 &= \mathbf{v}'_j{}^2 - \mathbf{v}_j^2 & + \frac{2Q}{m} \\ (\mathbf{v}_i^2 - \mathbf{v}'_i{}^2)(\mathbf{v}_i^2 + \mathbf{v}'_i{}^2) &= (\mathbf{v}'_j{}^2 - \mathbf{v}_j^2)(\mathbf{v}_j^2 + \mathbf{v}'_j{}^2) \\ \text{(wegen Impulserhaltung)} \quad v_i + v'_i &= v'_j + v_j & + \frac{2Q}{m(v_i - v'_i)} \end{aligned}$$

und weiterhin

$$\begin{aligned} \text{Impuls: } v'_i - v_i &= v_j - v'_j = v_j - (v_i + v'_i - v_j) = 2v_j - v_i - v'_i \\ &\Rightarrow v'_i - v_i = v_j - v_i \end{aligned}$$

und allgemein in 3d:

$$\Delta \mathbf{v}_i = \mathbf{l}_{i,j}(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \mathbf{l}_{i,j} \quad \text{mit} \quad \mathbf{l}_{i,j} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (183)$$

Häufig ist auch eine **Energiedissipation**²² erwünscht:

²²leichter Energieverlust

$$\Delta \mathbf{v}_i = \mathbf{l}_{i,j} \left[(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) - \frac{Q}{m \Delta v_i} \right] \mathbf{l}_{i,j} \quad (184)$$

Restriktionskoeffizient:

$$r = \frac{v'_j - v'_i}{v_i - v_j}$$

typische Annahme:

$$\begin{aligned} Q &\propto \Delta v_i^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{Q}{m} = \epsilon \Delta v_i^2 \\ \Rightarrow \quad v'_i &= v_i + (v_j - v_i) - \epsilon \underbrace{\Delta v_i}_{v_j - v_i} = v_i + (1 - \epsilon)(v_j - v_i) \\ &= \epsilon v_i + (1 - \epsilon) v_j \quad \epsilon > 0 \end{aligned}$$

ϵ ist dabei ein Maß für die beim Stoß dissipative Energie. Mit Restriktionskoeffizienten ($\hat{=}$ Maß für die verbleibende Energie)

$$r = 1 - 2 \epsilon$$

Randbedingungen:

Häufig, etwa bei Simulationen von Flüssigkeiten; Gasen ist man an Systemen mit vielen Teilchen interessiert. In Simulationen nur endliche Teilchenzahl N möglich. Realistische Teilchenzahlen in Großrechnern sind $\approx 100\,000$ (1997). Wünschenswert wäre: $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty$ (Außer bei Nanotechnologie)
 \Rightarrow Extrapolation uninteressant, wo liegt das Problem?

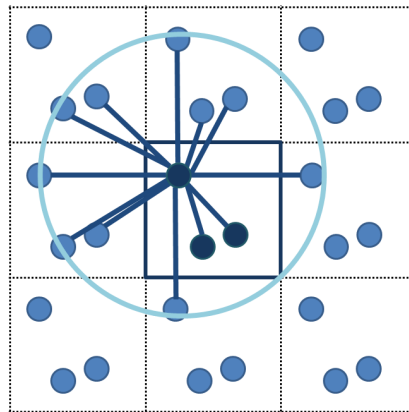


Abbildung 38

Beispiel: (N Teilchen auf einfach kubischem Gitter $N = 512 = 8^3$)

\Rightarrow Gittergröße: $8 \cdot 8 \cdot 8 = 512 = N$

\Rightarrow Oberfläche: $8 \cdot 8 \cdot 6 = 384$ Teilchen auf der Oberfläche (mehr als die Hälfte).

\Rightarrow Normal: 6 Nachbarn, auf Oberfläche < 6 Nachbarn.

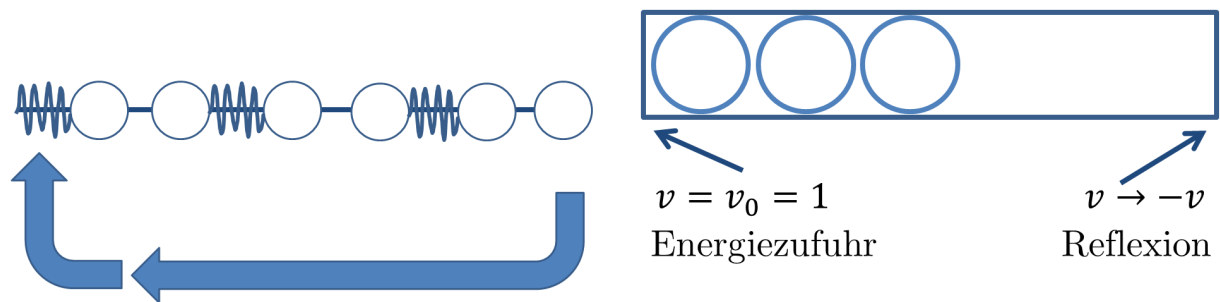
\Rightarrow Problem sind die Oberflächen wegen geändertem Verhalten. (wegen der Nachbarn)

Lösungsansatz: System periodisch fortsetzen. Periodische Randbedingungen. (Abb. 38)

- Bewegung der Teilchen wird nur in *einer* Zelle berechnet
- Wechselwirkung wird (prinzipiell) als Summe der Wechselwirkungen mit allen Bildern genommen

⇒ Wechselwirkung wie im unendlichen System, Verteilung im Ort aber periodisch (Approximation).

(Andere Interpolation: periodische Anfangsbedingung führen zu periodischen Dichten)



(a) 1-dimensionales System granularer Materie

(b) ED - MD Simulation

Abbildung 39

Einfaches Beispiel: (1-dim System granularer Materie (geht auch in 2,3D)) Siehe Abbildung 39a.

nur einen Abstand mehr einführen

⇒ periodische Randbedingung (‘*Nächster Nachbar Wechselwirkung*’)

komplizierteres Beispiel: (unendlich langreichweitige Wechselwirkung)

- entweder abschneiden, falls Wechselwirkung hinreichend schnell abfällt
- oder unendliche Reihe ausrechnen (→Ewald Summation) z.B. erforderlich bei elektrostatischen Dipol-Wechselwirkung

Ergebnis: Unterschied zu unendlichen Systemen: Periodizität! Oberflächeneffekte verschwinden, aber System bleibt periodisch.

Beispiel: (Event driven molekulardynamische Simulation)

$N = 80$, $1d$, $R = 0$ (links getrieben, rechts reflektiert $v \dashrightarrow -v$) → Abbildung 39b. Energiedissipation über Restriktionskoeffizienten

$$r = 1 - 2 \epsilon \quad (\epsilon \text{ wird vorgegeben})$$

Anfangsbedingungen:

x_i (*gleicher Abstand*)

v_i (zuällig aus $[-v_{ini}, v_{ini}]$)

4.8 Stochastische Differentialgleichungen

Bislang:

- klassische Bewegungsgleichungen lösen \Rightarrow Molekulardynamik *ohne* Ankopplung an Wärmebad
- Ankopplung an Wärmebad (Mastergleichung) ohne Bewegungsgleichung

Jetzt: Versuchen Bewegungsgleichung zu erweitern, sodass Wärmebad beschrieben wird

- Wandstöße sorgen für zufällige Impulsübertragung

\Rightarrow Bewegungsgleichung muss um einen *zufälligen* Beitrag erweitert werden:

$$\dot{x} = \underbrace{F(x(t))}_{\text{deterministisch}} + \underbrace{\eta(t)}_{\text{stochastisch}} \quad (185)$$

$$dx = f(x(t))dt + d\omega(t)$$

Beispiel: (BROWN'sche Molekularbewegung)

(BROWN 1827, (EINSTEIN 1905, SMOLUCHOWSKI 1906 \rightarrow FOKKER-PLANCK-Gleichung), LANGEVIN 1908) Folgen LANGEVIN Bewegungsgleichung für *ein* Teilchen auf einer Flüssigkeit. (1d).

LANGEVIN Gleichung

$$\underbrace{\dot{v}}_{\text{NEWTON}} = \underbrace{-\frac{c}{m}v(t)}_{\text{STOKES'sche Reibung}} + \underbrace{\frac{1}{m}\eta(t)}_{\text{Rauschen}}, \quad \text{mit } c = 6\pi\nu a \quad (186)$$

c enthält die Viskosität und Teilchengröße, η (Rauschen) meint vor allem die zufällige Impulsübertragung pro Zeit).²³

Problem: Deterministischer Anteil gibt *eine* Lösung für *eine* Anfangsbedingung. Durch Rauschen wird Trajektorie 'zufällig'.

\Rightarrow Wir müssen ein Ensemble von Trajektorien betrachten.

Eigenschaften des Rauschens $\eta(t)$:

1. Mittelwert $\langle \eta \rangle = 0$

$$\int_t^{t+\Delta t} \eta(t')dt' \rightarrow \text{GAUSS-Verteilung.} \quad (187)$$

Summe von Zufallsprozessen in $(t, t + \Delta t)$.

²³Bewegungsgleichung für ein Teilchen, da ja in Wirklichkeit Wechselwirkung mit anderen Teilchen..ohne Wechselwirkung hätte man gleich ganz viele Teilchen nehmen können

2. Rauschen ist unkorreliert. Für gilt:

$$\begin{aligned}
 \langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle &= 0 \quad \forall t_1 \neq t_2 \quad \Rightarrow \quad \langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle = \Gamma \delta(t_1 - t_2) \\
 \langle \Delta\omega(t_2), \Delta\omega(t_2) \rangle &= \left\langle \int_{t_1}^{t_1+\Delta t} \eta(t') dt' \int_{t_2}^{t_2+\Delta t} \eta(t'') dt'' \right\rangle \\
 &= \Gamma \int_{t_2}^{t_2+\Delta t} \int_{t_1}^{t_1+\Delta t} dt' dt'' \delta(t'_1 - t'_2) \\
 &= \Gamma \Delta t \delta_{t_1, t_2} \\
 \langle \Delta\omega \rangle &= \left\langle \int_t^{t+\Delta t} \eta(t') dt' \right\rangle = 0 \tag{188}
 \end{aligned}$$

$$\langle \Delta\omega^2 \rangle = \Gamma \Delta t \tag{189}$$

erfüllt durch GAUSS-Verteilung mit $\Gamma \Delta$

Beide Eigenschaften, 1. und 2. determinieren **weißes Rauschen**. Zentrales Problem jedoch: Γ ?

Deterministischer Anteil hat Lösung

$$v(t) = v_0 \beta; e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad \tau = \frac{m}{c} \tag{190}$$

mit Rauschen - Berechnen **Autokorrelationsfunktion**. Zunächst:

$$\begin{aligned}
 v(t + \Delta t) - v(t) &= -\frac{c}{m} v(t) \Delta t + \frac{1}{m} \int_t^{t+\Delta t} \eta(t') dt' \\
 \underbrace{\langle v(0) v(t + \Delta t) \rangle}_{\text{eine Konstante}} - \langle v(0) v(t) \rangle &= -\frac{c}{m} \langle v(0) v(t) \rangle \Delta t + \frac{1}{m} \underbrace{\langle v(0) \int_t^{t+\Delta t} \eta(t') dt' \rangle}_{=0} \\
 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle v(0) v(t) \rangle &= \frac{\langle v(0) v(t + \Delta t) \rangle - \langle v(0) v(t) \rangle}{\Delta t} = -\frac{c}{m} \langle v(0) v(t) \rangle \\
 \langle v(0) v(t) \rangle &= \langle v(0)^2 \rangle e^{-\frac{t}{\tau}} \quad \text{mit } \tau = \frac{m}{c}
 \end{aligned}$$

Autokorrelationsfunktion

$$\langle v(t) v(t') \rangle = \frac{k_B T}{m} e^{-\frac{|t-t'|}{\tau}} \tag{191}$$

wegen Gleichverteilung folgt als Verbindung zur statistischen Mechanik

$$\left\langle \frac{m}{2} v^2 \right\rangle = \frac{k_B T}{2}$$

Wir betrachten weiterhin $\tau \rightarrow 0$ (entspricht $m \rightarrow 0$), sodass

$$\langle v(t) v(t') \rangle \approx \frac{2k_B T}{m} \tau \delta(t'_t) \approx \frac{2k_B T}{c} \delta(t'_t)$$

Letzteres im Sinne, dass Integrale (über $\pm\infty$) gleich sind! Vergleich mit $m \rightarrow 0$:

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{1}{c} \eta(t) \quad \text{mit } \langle \eta(t') \eta(t) \rangle = \Gamma \delta(t - t')$$

Wiener-Prozess

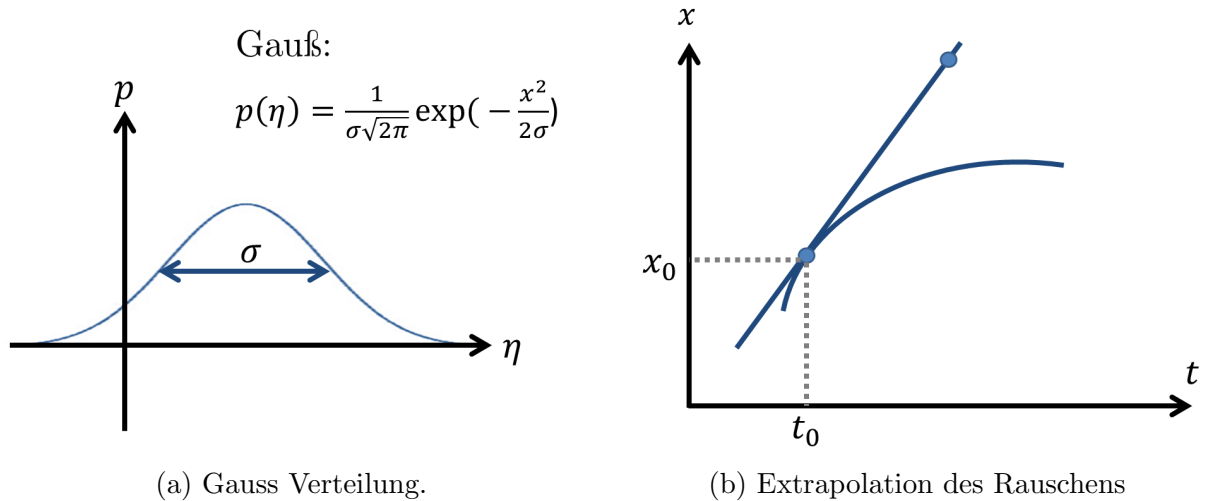


Abbildung 40

1. (Siehe hierzu auch Abbildung 40a)

$$\Gamma = c^2 \frac{2k_B T}{c} = 2k_B T c \quad (192)$$

2. lösen

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{1}{c} \eta(t) \quad \Rightarrow \quad x(t) = x(0) + \int_0^t \frac{\eta(t')}{c} dt' \\ &\Rightarrow \quad \langle x(t) \rangle = \langle x(0) \rangle = x(0) \end{aligned}$$

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \frac{1}{c^2} \int_0^t \int_0^t dt' dt'' \underbrace{\langle \eta(t') \eta(t'') \rangle}_{\Gamma \delta(t' - t'')} = \frac{2k_B T}{c^2} ct = \underbrace{2Dt}_{\text{EINSTEIN-Beziehung}} = \frac{2k_B T t}{c}$$

Einstein-Beziehung

$$2Dt = \frac{2k_B T t}{c} \quad (193)$$

D ist die Diffusionskonstante mit

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\nu a} \quad \text{mit: Viskosität } \nu \text{ und Teilchenradius } a$$

Ausbreitung von *Random Walk* $\propto \sqrt{t} \Rightarrow$ **Wiener Prozess**

Wo liegt das Problem? Warum nicht Euler? Extrapolation des Rauschens (Abb. 40b) gibt es aber nicht, wird $\eta(t) \eta(t') = \Gamma \delta(t - t')$.

Random Walk: eines der einfachsten Modelle der Computersimulation, siehe Abbildung 41.

- 'Random Walker' startet auf Gitterpunkt

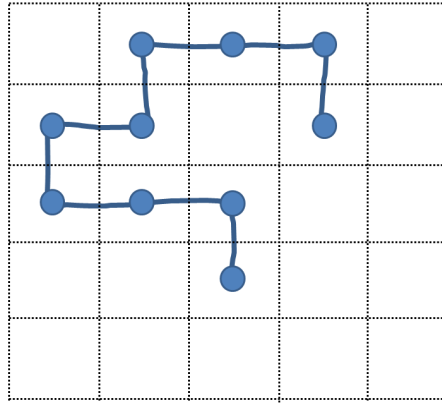


Abbildung 41

- bewegt sich dann bei jedem Zeitschritt 'zufällig': z.B. Bewegung auf $2d$ -Quadratgitter
- einzelne Trajektorie zufällig \Rightarrow statistische Auswertung durch Mittelung über viele RW's

Diskrete Version der DGL $\dot{x} \propto \eta(t)$

$$\langle x(t) \rangle = \langle x(0) \rangle = x(0), \quad \langle x(t)^2 \rangle = t \quad \Leftrightarrow \quad \sqrt{\langle x(t)^2 \rangle} \propto \sqrt{t}$$

Ausbreitung der RW also $\propto \sqrt{t}$ in jeder Dimension \Rightarrow Modell für Diffusion

Numerik stochastischer Differentialgleichungen (SDGL)

4.8.1 Erst die Numerik

Additives Rauschen der Form

$$\dot{x} = f(x) + \eta(t) \quad (194)$$

$\eta(t)$: stochastischer Prozess und

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta(t), \eta(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t') \forall t \quad (195)$$

Diskretisieren der Zeit

$$t_n = n\Delta t \quad \forall n \in \mathcal{N}$$

- ohne Rauschen

$$\underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \dot{x} dt}_{x(t+\Delta t) - x(t)} = \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} f(x(t')) dt'}_{f(x(t))\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)} \xrightarrow{\text{Euler}} x_{n+1} = x_n + f(x_n)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

lokaler Abbruchfehler ist von Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$

- mit Rauschen

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)\Delta t + \Delta w(t_n) + \dots$$

mit

$$\begin{aligned}
\Delta w(t_n) &= \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} \eta(t') dt' \\
\langle \Delta w(t_n) \Delta w(t_{n'}) \rangle &= \left\langle \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} \int_{t_{n'}}^{t_{n'}+\Delta t} \eta(t_1) \eta(t_2) dt_1 dt_2 \right\rangle \\
&= \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} \int_{t_{n'}}^{t_{n'}+\Delta t} \Gamma \delta(t_1 - t_2) dt_1 dt_2 \\
&= \Gamma \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} \delta_{nn'} dt_1 = \Gamma \Delta t \delta_{nn'}
\end{aligned}$$

\Rightarrow wieder weißes Rauschen, aber mit Breite $\Gamma \Delta t$, siehe (a). Macht keinen Fehler, *aber* durch das Rauschen wird der Schritt Δx zusätzlich erhöht.

\Rightarrow stochastische Eigenschaften bleiben erhalten aber $\Delta x \rightarrow \Delta x \propto \sqrt{\Delta t}$ in niedrigster Ordnung (statt Δt)

$$f(x_n + \Delta x) \approx f(x_n) + \mathcal{O}(\Delta x) = f(x_n) + \mathcal{O}(\Delta t^{\frac{1}{2}})$$

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n) \Delta t + \Delta w(t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^{\frac{3}{2}}) \quad (196)$$

\rightarrow mit Rauschen: andere Konvergenz

\rightarrow andere Breite des Rauschens für endliche Zeitschritte ($\Gamma \rightarrow \Gamma \Delta t$)

Praktische Durchführung des EULER-MARUYAMA-Verfahrens (Wie bei Euler-Verfahren für deterministische DGL + Rauschen, also Zufallszahlen der Breite $\Gamma \Delta t$). **z.B.** (aber nicht unbedingt) GAUSSverteilte Zufallszahlen mit Verteilung

$$p(\Delta w) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\Delta w^2}{2\sigma^2}} \quad \text{mit } \sigma^2 = \Gamma \Delta t \quad \underbrace{=}_{\substack{\text{z.B. für Brownsche} \\ \text{Molekularbewegung}}} 2k_B T \underbrace{6\pi\eta a \Delta t}_{\substack{\text{z.B. für Brownsche} \\ \text{Molekularbewegung}}}$$

$$\dot{x} = \underbrace{f(t, x)}_{\text{det. Teil}} + \underbrace{g(x(t)) \eta(t)}_{\substack{\text{Rauschen} \\ \text{stoch. Teil}}} \quad (197)$$

zusammen mit

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t') \quad (198)$$

EULER-MARUYAMA-Verfahren

$$x_{n+1} = x_n + f(t_n, x_n) \Delta t + g(t_n) \Delta w \quad (199)$$

wobei

$$P(\Delta w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \mathcal{O}} e^{-\frac{\Delta w^2}{2\mathcal{O}^2}}, \quad \mathcal{O}^2 = \Gamma \Delta t \quad (200)$$

$$\langle \Delta w \rangle = 0, \quad \langle \Delta w^2 \rangle = \Gamma \Delta t \quad (201)$$

Beachte: GAUSSverteilung ist nicht notwendig um (198) zu erfüllen, aber hinreichend.

Beispiel: BROWN'sche Molekularbewegung

$$\dot{x} = v \quad \Rightarrow \quad m\ddot{x} = -\gamma\dot{x} + \eta(t) \quad \text{mit} \quad \frac{\gamma}{m} = 1 = \gamma = m$$

$$\Rightarrow \begin{cases} f_1(v) = v \\ f_2(v) = -v \end{cases} \quad \text{sowie} \quad \eta(t) \eta(t') = \Gamma \delta(t - t'), \quad \Gamma = 1$$

Bei Diskretisierung $\eta(t) \rightarrow \Delta w(t) = \text{Zufallszahl mit Breite } \Gamma \Delta t$

$$\Rightarrow z = \begin{pmatrix} x \\ \dot{x} \end{pmatrix} \Rightarrow \dot{z} = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \ddot{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ -\frac{\gamma}{m} z_2 + \frac{1}{m} \eta(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} Z_2 \\ \frac{-\gamma}{m} z_2 \end{pmatrix}}_{\text{det Teil}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{m} \eta(t) \end{pmatrix}}_{\text{stoch}}$$

Beachte: *kein* Wiener Prozess, da endliche Masse die zur Beschleunigung für kurze Zeiten führt ($m \rightarrow 0 \Rightarrow v \propto \eta$).

\Rightarrow Abweichungen von $\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2Dt$

\Rightarrow Wegen der endlichen Masse $\hat{=}$ Beschleunigung für kurze Zeiten.

4.8.2 Jetzt Multiplikatives Rauschen

etwas komplizierter:

$$\dot{x} = f(t, x) + g(t, x) \cdot \eta(t)$$

1. **Möglichkeit:** Diskretisierung wie EULER

Itô-Diskretisierung

$$\Delta x = x(t + \Delta t) - x(t) = f(x)\Delta t + g(x(t))\Delta w + \mathcal{O}(\Delta t^{\frac{3}{2}}) \quad (202)$$

2. **Möglichkeit:** HEUN-Verfahren (mit Parameter α) wie Runge-Kutta 2. Stufe

Stratonovich-Diskretisierung

$$\Delta x = \frac{\Delta t}{2} (f(x) + f(x + \alpha \Delta x)) + \frac{\Delta w}{2} (g(x) + g(x + \alpha \Delta x)) \quad (203)$$

Wobei

$$f(x + \alpha \Delta x) = f(x) + f'(x) \alpha \Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

$$g(x + \alpha \Delta x) = g(x) + g'(x) \alpha \Delta x + \frac{1}{2} g''(x) (\alpha \Delta x)^2 + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

Mit $\mathcal{O}(\Delta x) = \mathcal{O}(\Delta t^{\frac{1}{2}})$ folgt

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \Delta x &= f(x) \Delta t + \frac{1}{2} f'(x) \alpha \Delta x \Delta t + \mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta t) \\
&+ g(x) \Delta w + \frac{1}{2} g'(x) \alpha \Delta x \Delta w + \frac{\alpha^2}{4} g''(x) \underbrace{\Delta x^2 \Delta w}_{=\mathcal{O}(\Delta t^{\frac{3}{2}})} + \underbrace{\mathcal{O}(x^3)}_{\Delta t^{\frac{3}{2}}} \\
&= f(x) \Delta t + g(x) \Delta w + \frac{\alpha}{2} g'(x) \Delta x \Delta w + \mathcal{O}(\Delta x^3) \\
&= f(x) \Delta t + g(x) \Delta w + \frac{\alpha}{2} g'(x) \underbrace{(f(x) \Delta t + g(x) \Delta w + \dots)}_{=\mathcal{O}(\Delta t^{\frac{1}{2}})} \Delta w \\
&= f(x) \Delta t + g(x) \Delta w + \underbrace{\frac{\alpha}{2} g'(x) g(x) \Delta w^2}_{\mathcal{O}(\Delta t)} + \mathcal{O}(\Delta t^{\frac{3}{2}}) \tag{204}
\end{aligned}$$

- (202) und (204) unterscheiden sich um einen Term der Ordnung Δt , global ist die Abweichung dann von Ordnung $\mathcal{O}(1)$.
- Spezialfall $\frac{\partial g}{\partial x} = 0$ (additives Rauschen) \Rightarrow (202) und (204) stimmen überein
- $\alpha = 0$ ergibt EULER, $\alpha = 1$ ergibt HEUN
- (202) approximierend SDGL nach Itô
- (204) approximierend SDGL nach Stratonovich

Aus Sicht der Numerik: $\alpha = 0$ (EULER) und $\alpha = 1$ (HEUN) unterscheiden sich um Term der Ordnung $\Delta t \Rightarrow$ verschiedene Ergebnisse.

Die Verfahren konvergieren zu verschiedenen Integralen!

$$\Rightarrow \text{Ito-Stratonovich-Dilemma} \begin{cases} \text{EULER} \rightarrow \text{ITO} \\ \text{HEUN} \rightarrow \text{STRATONOVICH} \end{cases}$$

Beispiel:

$$\dot{x} = \eta(t) \quad \Rightarrow \quad \langle x^2 \rangle = \langle x_0^2 \rangle + 2Dt$$

Transformation $y = x^2$:

$$\dot{y} = 2x \dot{x} = 2x \eta(t) = 2\sqrt{y} \eta(t)$$

Betrachte Diskretisierung mit $f = 0$ und $g(y) = 2\sqrt{y}$

$$\Delta y = 2\sqrt{y} \Delta w + \frac{\alpha}{2} 2 \frac{1}{2\sqrt{y}} 2\sqrt{y} \Delta w^2 \tag{205}$$

$$\Delta y = 2\sqrt{y} \Delta w + \alpha \Delta w^2 \tag{206}$$

$$\Rightarrow \quad \langle \Delta y \rangle = \langle \alpha \Delta w^2 \rangle = \alpha 2 D \Delta t$$

Stimmt mit Lösung oben überein für $\alpha = 1 \Rightarrow$ 'STRATONOVICH ist richtig'

Achtung: hier nur beispielhaft gezeigt! Mathematisch viel komplizierter \rightarrow Integraldefinitionen. Demnach: in Physik ist Stratonovich sinnvoll.

Einfachstes, irreversibles Verfahren, das Stratonovich-Gleichung verwendet: Heun-Verfahren.

4.9 Zeitquantifizierung von Monte Carlo Methoden

Wir betrachten *Spin Modell* wie zuvor in Kapitel 3.9: Hamiltonian:

$$H = \underbrace{-\frac{J}{2} \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j}_{\text{Austausch
nächster
Nachbar}} - \underbrace{D \sum_{i=1}^N (\mathbf{S}_i^2)^2}_{\text{Anisotropie}} - \underbrace{\mathbf{B} \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i}_{\text{ZEEMAN}} \quad (207)$$

im klassischen Limes $|\mathbf{S}|$

- MC hatten wir schon \rightarrow kanonisches Ensemble
- **jetzt** LANGEVIN Dynamik als alternativer Zugang zum kanonischen Ensemble ²⁴
- 1. **Bewegungsgleichung:** aus HEISENBERGScher Bewegungsgleichung folgt im klassischen Limes ($\hbar \rightarrow 0$)

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} (\mathbf{S}_i \times \mathbf{h}_i) \quad \text{mit } \mathbf{h}_i = -\nabla_{\mathbf{S}_i} H \quad (208)$$

Herleitung über QM-Heisenbergsche Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \underbrace{\hat{\mathbf{S}}(t)}_{\substack{\text{Spin-} \\ \text{Drehimpuls-} \\ \text{operator}}} \rangle = \langle [\mathbf{S}(t), \hat{H}] \rangle$$

und weitere Annahmen (ist eigentlich eine Schwingung! Wie bei Phononen)²⁵
Benötig noch:

- Vertauschungsregeln für Kommutatoren

$$[\hat{\mathbf{S}}_x(t), \hat{\mathbf{S}}_y(t)] = i\hbar \hat{\mathbf{S}}_z(t) \quad (\text{zyklisch})$$

- Entwicklung des Kommutators:

$$[\hat{\mathbf{S}}(t), \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{S}}(t))] = i\hbar \left(\hat{\mathbf{S}}(t) - \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{S}}} \right) \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{S}}(t)) + \mathcal{O}(\hbar^2)$$

Damit ergibt sich:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\mathbf{S}}(t) \rangle = -i\hbar \left\langle \left(\hat{\mathbf{S}}(t) \times \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{S}}} \right) \hat{\mathbf{H}} \right\rangle + \mathcal{O}(\hbar^2)$$

Betrachte nun den klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ (qm-Bewegungsgleichung geht in den klassischen Grenzfall über).

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{S}_i} H(\mathbf{S}_i))$$

²⁴(Analogon zum Kreisel: Zwar nicht rotation aber präzession)

²⁵Der Vorfaktor hat was mit \hbar -quer zu tun und kommt aus der quantenmechanischen Rechnung Raus: ein Spin S (Drehimpuls) hat magnetisches Moment μ und $\frac{g\mu_B}{\hbar} = \gamma$ wobei g =LANDÉFaktor (für 2 Elektronen), μ_B : BOHRsches Magneton, γ : gyromagnetisches Verhältnis.

Wobei die Erwartungswerte in klassische Größen übergehen. (**Ehrenfest-Theorem**):
 $\mathbf{S} = \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$ und $H = \langle \hat{\mathbf{H}} \rangle$. Spin \mathbf{S} in mit dem magnetischen Moment μ verknüpft über

$$\mathbf{S} = \mu \cdot \underbrace{1}_{\substack{\text{gyromagnet.} \\ \text{Verhältn.}}} \quad \text{und} \quad \mu_i = \mu_s S_i$$

$$\gamma = g \mu_B \frac{1}{\hbar} = 1,76 \cdot 10^{11} \frac{1}{T_s}$$

mit LANDÉ-Faktor g und BOHRschem Magenton μ_B .

- \Rightarrow **Präzession** wie Eulersche Gleichung in Mechanik
- erhält Energie

2. **Klassische Bewegungsgleichung** wurde um Reibungsterm Erweitert:
+Dissipation:

- (Landau-Lifshitz-Gleichung)

$$\dot{\mathbf{S}}_i = -\frac{\gamma}{\mu_s} (\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i) + \frac{\alpha\gamma}{\mu_s} (\mathbf{S}_i \times (\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i)) \quad (209)$$

α : phänomenologische Dämpfungskonstante

- (Landau-Lifshitz-Gleichung mit Gilbert Dämpfung)

$$\dot{\mathbf{S}}_i = -\frac{\gamma}{\mu_s} (\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i) - \frac{\alpha\gamma}{\mu_s} (\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t})$$

Beschreibt Ankopplung an ein Wärmebad

- (Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung)

$$\dot{\mathbf{S}}_i = -\frac{\gamma}{(1 + \alpha^2)} \mathbf{S}_i \times (\mathbf{H}_i + \alpha(\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i))$$

Gleichung 2 und Gleichung 2 sind äquivalent für $|\mathbf{S}_i| = 1$.

3. **Rauschterm** addiere weißes Rauschen zum effektiven Feld
+ Fluktuation:

$$\mathbf{h}_i \rightarrow \mathbf{h}_i + \eta_i(t)$$

mit

$$\langle \eta_i(t) \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle \eta_i^\nu(t) \eta_j^\theta(t') \rangle = \frac{2\alpha\mu_s}{\gamma} k_B T \underbrace{\delta_{ij}}_{\substack{\text{Gitter-} \\ \text{plätze}}} \underbrace{\delta_{\nu,\theta}}_{\substack{\text{kart.} \\ \text{Kompo-} \\ \text{nenten}}} \delta(t - t')$$

führt zu Gleichgewichtseigenschaften des kanonischen Ensembles. Der Vergleich von Monte Carlo und UG liefert Zeitquantifizierung.

Einfaches Beispiel: 1 Makrospin mit

$$H = -DS_z^2 - \mathbf{B}\mathbf{S}$$

Modell für Superparamagnetsimus: Für $\Delta E = D \approx k_B T$ kann die Energiebarriere thermisch überwunden werden.

Theorie: mittlere Zeit τ zum überspringen der Energiebarriere ist

$$\tau = \tau_0 e^{\frac{\Delta E}{k_B T}}$$

- Für $B = 0$ ist $\Delta E = D$ und τ bekannt $\tau(D, T)$.
- Ansonsten lässt sich $\tau, \Delta E$ asymptotisch rechnen.

Numerik:

LANGEVIN: starten in Energieminimum. Wie wachsen die Fluktuationen?

$$\dot{\mathbf{S}} = -\frac{\gamma}{\mu} \mathbf{S} \times ((\mathbf{h} + \eta) + \alpha \mathbf{S} \times (\mathbf{h} + \eta)) \quad (210)$$

Linearisieren:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad S_z = \sqrt{1 - S_x^2 - S_y^2} \quad (211)$$

$$\Rightarrow \dot{\mathbf{S}}_x = -\frac{\gamma}{\mu} \left(\underbrace{S_y}_{S_y \ll 1} (h_z - \eta_z) - \underbrace{S_z}_{=1} (h_y + \eta_y) \right) - \underbrace{\alpha \dots}_{\text{klein für } \alpha \rightarrow 0} \quad (212)$$

mit

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix} \quad (213)$$

$$\Rightarrow h_y = 0 \quad \text{und} \quad \mathbf{h} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{S}} = (2DS_z + B_z)\hat{\mathbf{z}} \quad (214)$$

$$\Rightarrow \dot{\mathbf{S}}_x \approx \frac{\gamma}{\mu} \eta_y(t) \quad (215)$$

$$\Rightarrow \langle \Delta S_x^2 \rangle = D \Delta t = \frac{\gamma^2}{\mu^2} \frac{2\alpha\mu}{\gamma} k_B T \Delta t \quad (216)$$

$$\langle \dot{\mathbf{S}}_y^2 \rangle = \langle \dot{\mathbf{S}}_z^2 \rangle = 2\frac{\gamma}{\mu} \alpha k_B T \Delta t = \langle \Delta S_y^2 \rangle \quad (217)$$

Wir berechnen $\langle \Delta S_x^2 \rangle$ für einen MONTE CARLO Schritt: Dabei ist

$$r = \sqrt{S_x^2 + S_y^2}$$

die Schrittweite und R die Maximale Schrittweite.

- Wahrscheinlichkeitsverteilung für Versuchsschritt $p_t(r)$
- Wahrscheinlichkeitsverteilung für Akzeptanz $p_a(r)$ (*heat bath*).

$$\left. \begin{aligned} p_a(r) &= \frac{1}{1 + e^{\frac{\Delta E(r)}{k_B T}}} \\ p_t(r) &= \frac{3\sqrt{R^2 - r^2}}{2\pi R^3} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \langle \Delta S_x^2 \rangle = \langle \frac{r^2}{2} \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \frac{r^2}{2} p_r(r) p_a(r) \quad (218)$$

$$= 2\pi \int_0^R dr \frac{r^3}{2} \frac{3\sqrt{R^2 - r^2}}{2\pi R^3 \left(1 + \underbrace{e^{\frac{\Delta E(r)}{k_B T}}}_{1 + \frac{\Delta E(r)}{k_B T}} \right)} \quad (219)$$

$$\approx \frac{3}{4R^3} \int_0^R dr r^3 \sqrt{R^2 - r^2} \approx \frac{R^2}{10} \quad (220)$$

direkter Vergleich:

$$\begin{array}{ll} \text{LANGEVIN:} & \text{MONTE CARLO:} \\ \langle \Delta S_x^2 \rangle = 2 \frac{\gamma}{\mu} \alpha k_B T \Delta t & \langle \Delta S_x^2 \rangle = \frac{R^2}{10} \end{array}$$

\Rightarrow 1 MCS entspricht Zeitintervall Δt für

$$R^2 = \frac{20k_B T \alpha \gamma}{\mu} \Delta t \quad (221)$$

für $R \ll 1$, für große Dämpfung, wenn Bewegungsgleichung keine Rolle spielt

Strange phenomena in matter's flatlands

*This year's Laureates opened the door on an unknown world where matter exists in strange states. The Nobel Prize in Physics 2016 is awarded with one half to **David J. Thouless**, University of Washington, Seattle, and the other half to **F. Duncan M. Haldane**, Princeton University, and **J. Michael Kosterlitz**, Brown University, Providence. Their discoveries have brought about breakthroughs in the theoretical understanding of matter's mysteries and created new perspectives on the development of innovative materials.*

David Thouless, Duncan Haldane, and Michael Kosterlitz have used advanced mathematical methods to explain strange phenomena in unusual phases (or states) of matter, such as superconductors, superfluids or thin magnetic films. Kosterlitz and Thouless have studied phenomena that arise in a flat world – on surfaces or inside extremely thin layers that can be considered two-dimensional, compared to the three dimensions (length, width and height) with which reality is usually described. Haldane has also studied matter that forms threads so thin they can be considered one-dimensional.

The physics that takes place in the flatlands is very different to that we recognise in the world around us. Even if very thinly distributed matter consists of millions of atoms, and even if each atom's behaviour can be explained using quantum physics, atoms display completely different properties when lots of them come together. New collective phenomena are being continually discovered in these flatlands, and condensed matter physics is now one of the most vibrant fields in physics.

The three Laureates' use of topological concepts in physics was decisive for their discoveries. Topology is a branch of mathematics that describes properties that change step-wise. With modern topology as a tool, this year's Laureates presented surprising results, which have opened up new fields of research and led to the creation of new and important concepts within several areas of physics.

Quantum physics becomes visible in the cold

Deep down, all matter is governed by the laws of quantum physics. Gases, liquids and solids are the usual phases of matter, in which quantum effects are often hidden by random atomic movements. But in extreme cold, close to absolute zero (–273 degrees Celsius) matter assumes strange new phases and behaves in unexpected ways. Quantum physics, which otherwise only works in the micro-scale world, suddenly becomes visible (fig. 1).

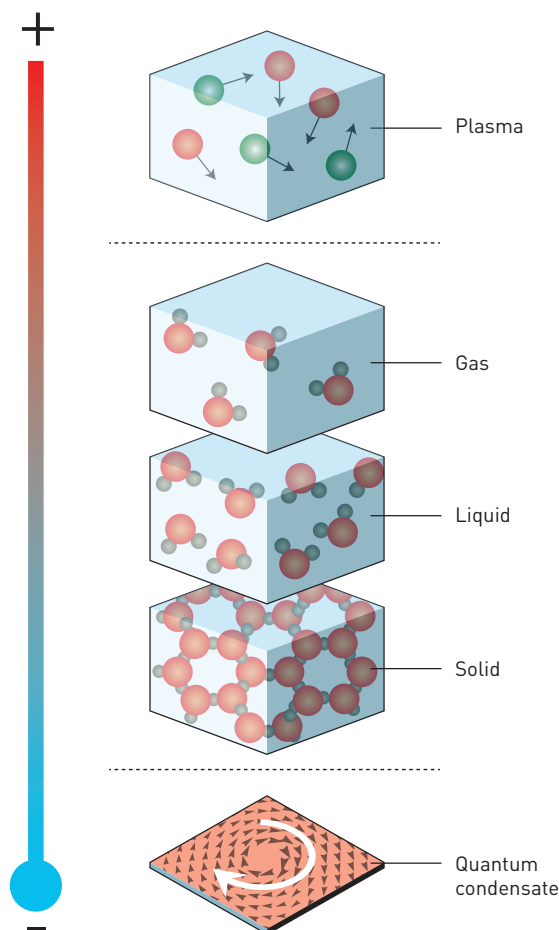


Fig. 1 Phases of matter. The most common phases are gas, liquid and solid matter. However, in extremely high or low temperatures matter assumes other, more exotic states.

Ordinary phases of matter also transition between each other when the temperature changes. For example, such a phase transition occurs when ice, which consists of well-ordered crystals, is heated and melts into water, a more chaotic phase of matter. When we look at matter's little known flatlands, we find material phases that have not yet been fully explored.

Strange things can happen in the cold. For example, the resistance otherwise encountered by all moving particles suddenly ceases. This is the case when electrical current flows with no resistance in a superconductor, or when a vortex in a superfluid spins forever without slowing down.

The first person to systematically study superfluids was the Russian Pyotr Kapitsa, in the 1930s. He cooled helium-4, which is found in air, to -271 degrees Celsius and made it crawl up the sides of its holder. In other words, it behaved just as strangely as a superfluid should when viscosity has completely vanished. Kapitsa was rewarded with the 1978 Nobel Prize in Physics, and since then several types of superfluids have been created in the laboratory. Superfluid helium, thin films of superconductors, thin layers of magnetic materials and electrically conductive nanothreads are a few of the many new material phases that are now being intensively studied.

Vortex pairs provided the solution

Researchers long believed that thermal fluctuations destroy all order in matter in a flat, two-dimensional world, even at absolute zero. If there are no ordered phases, there can be no phase transitions. But in the early 1970s, David Thouless and Michael Kosterlitz met in Birmingham, Great Britain, and they challenged the then current theory. Together, they took on the problem of phase transitions in the flatlands (the former out of curiosity, the latter out of ignorance, they themselves claim). This cooperation resulted in an entirely new understanding of phase transitions, which is regarded as one of the twentieth century's most important discoveries in the theory of condensed matter physics. It is called the KT transition (Kosterlitz-Thouless transition) or the BKT transition, where the B is for Vadim Berezinskii, a now deceased theoretical physicist from Moscow who had presented similar ideas.

The topological phase transition is not an ordinary phase transition, like that between ice and water. The leading role in a topological transition is played by small vortices in the flat material. At low temperatures they form tight pairs. When the temperature rises, a phase transition takes place: the vortices suddenly move away from each other and sail off in the material on their own (fig. 2).

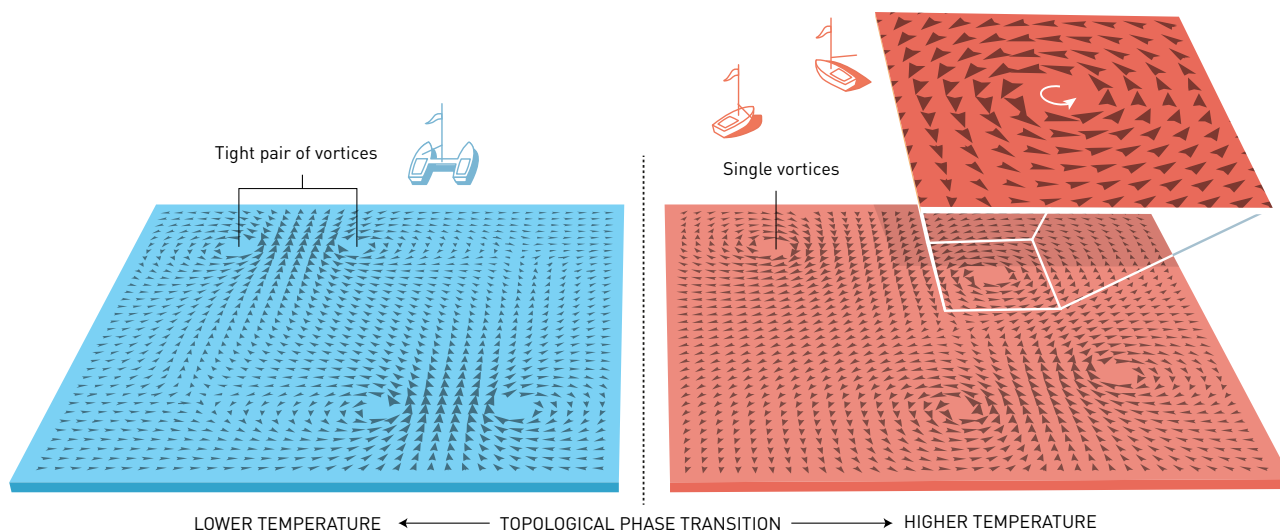


Fig. 2 Phase transition. This occurs when phases of matter transition between each other, such as when ice melts and becomes water. Using topology, Kosterlitz and Thouless described a topological phase transition in a thin layer of very cold matter. In the cold, vortex pairs form and then suddenly separate at the temperature of the phase transition. This was one of the twentieth century's most important discoveries in the physics of condensed matter.

The wonderful thing about this theory is that it can be used for different types of materials in low dimensions – the KT transition is universal. It has become a useful tool, one that is not only applied in the world of condensed matter, but also in other areas of physics, such as atomic physics or statistical mechanics. The theory behind the KT transition has also been developed by both its originators and others, and also confirmed experimentally.

The mysterious quantum leaps

Experimental developments eventually brought about a number of new states of matter that required explanation. In the 1980s, both David Thouless and Duncan Haldane presented groundbreaking new theoretical work that challenged previous theories, of which one was the quantum mechanical theory for determining which materials conduct electricity. This had initially been developed in the 1930s and, a few decades later, this area of physics was considered to be well understood.

It was therefore a great surprise when, in 1983, David Thouless proved that the previous picture was incomplete and, at low temperatures and in strong magnetic fields, a new type of theory was necessary, one where topological concepts were vital. At around the same time, Duncan Haldane also arrived at a similar, and similarly unexpected, conclusion while analysing magnetic atomic chains. Their work has been instrumental in the subsequent dramatic developments to the theory of new phases of matter.

The mysterious phenomenon that David Thouless described theoretically, using topology, is the quantum Hall effect. This was discovered in 1980 by the German physicist Klaus von Klitzing, who was rewarded with the Nobel Prize in 1985. He studied a thin conducting layer between two semiconductors, where the electrons were cooled to a few degrees above absolute zero and subjected to a strong magnetic field.

In physics, it is not uncommon for drastic things to happen when the temperature is lowered; for example, many materials become magnetic. This happens because all the small atomic magnets in the material suddenly point in the same direction, giving rise to a strong magnetic field, which can also be measured.

However, the quantum Hall effect is more difficult to understand; the electrical conductance in the layer appears to only be able to assume particular values, which are also extremely precise, something that is unusual in physics. Measurements provide precisely the same results even if the temperature, magnetic field or the amount of impurities in the semiconductor vary. When the magnetic field changes enough, the conductance of the layer also changes, but only in steps; reducing the strength of the magnetic field makes electrical conductance first exactly twice as big, then it triples, quadruples, and so on. These integer steps could not be explained by the physics known at the time, but David Thouless found the solution to this riddle using topology.

Answered by topology

Topology describes the properties that remain intact when an object is stretched, twisted or deformed, but not if it is torn apart. Topologically, a sphere and a bowl belong to the same category, because a spherical lump of clay can be transformed into a bowl. However, a bagel with a hole in the middle and a coffee cup with a hole in the handle belong to another category; they can also be remodelled to form each other's shapes. Topological objects can thus contain one hole, or two, or three, or four... but this number has to be an integer. This turned out to be useful in describing the electrical conductance found in the quantum Hall effect, which only changes in steps that are exact multiples of an integer (fig. 3).

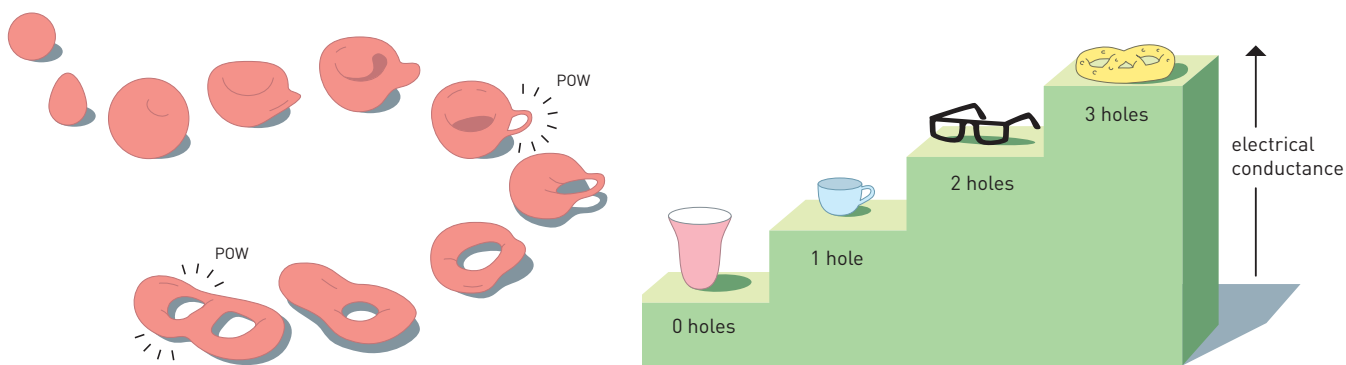


Fig 3. Topology. This branch of mathematics is interested in properties that change step-wise, like the number of holes in the above objects. Topology was the key to the Nobel Laureates' discoveries, and it explains why electrical conductivity inside thin layers changes in integer steps.

In the quantum Hall effect, electrons move relatively freely in the layer between the semi-conductors and form something called a topological quantum fluid. In the same way as new properties often appear when many particles come together, electrons in the topological quantum fluid also display surprising characteristics. Just as it can't be ascertained whether there is a hole in a coffee cup by only looking at a small part of it, it is impossible to determine whether electrons have formed a topological quantum fluid if you only observe what is happening to some of them. However, conductance describes the electrons' collective motion and, because of topology, it varies in steps; it is quantised. Another characteristic of the topological quantum fluid is that its borders have unusual properties. These were predicted by the theory and were later confirmed experimentally.

Another milestone occurred in 1988, when Duncan Haldane discovered that topological quantum fluids, like the one in the quantum Hall effect, can form in thin semiconductor layers even when there is no magnetic field. He said he'd never dreamed of his theoretical model being realised experimentally but, as recently as 2014, this model was validated in an experiment using atoms that were cooled to almost absolute zero.

New topological materials in the pipeline

In much earlier work, from 1982, Duncan Haldane made a prediction that amazed even the experts in the field. In theoretical studies of chains of magnetic atoms that occur in some materials, he discovered that the chains had fundamentally different properties depending on the character of the atomic magnets. In quantum physics there are two types of atomic magnets, odd and even. Haldane demonstrated that a chain formed of even magnets is topological, while a chain of odd magnets is not. Like the topological quantum fluid, it is not possible to determine whether an atomic chain is topological or not by simply investigating a small part of it. And, just as in the case of the quantum fluid, the topological properties reveal themselves at the edges. Here, this is at the ends of the chain, because the quantum property known as spin halves at the ends of a topological chain.

Initially, no one believed Haldane's reasoning about atomic chains; researchers were convinced that they already completely understood them. But it turned out that Haldane had discovered the first example of a new type of topological material, which is now a lively field of research in condensed matter physics.

Both quantum Hall fluids and even magnetic atomic chains are included in this new group of topological states. Later, researchers discovered several other unexpected topological states of matter, not only in chains and thin border layers, but also in ordinary three-dimensional materials.

Topological insulators, topological superconductors and topological metals are now being talked about. These are examples of areas which, over the last decade, have defined frontline research in condensed matter physics, not least because of the hope that topological materials will be useful for new generations of electronics and superconductors, or in future quantum computers. Current research is now revealing the secrets of matter in the exotic flatlands discovered by this year's Nobel Laureates.

LINKS AND FURTHER READING

Additional information on this year's prizes, including a scientific background in English, is available on the website of the Royal Swedish Academy of Sciences, <http://kva.se>, and at <http://nobelprize.org>. There, and at <http://kvatv.se>, you can watch video footage of the press conferences, the Nobel Lectures and more. Information on exhibitions and activities related to the Nobel Prizes and the Prize in Economic Sciences is available at www.nobelmuseum.se.

The Royal Swedish Academy of Sciences has decided to award the Nobel Prize in Physics 2016

with one half to

DAVID J. THOULESS

Born 1934 in Bearsden, UK. Ph.D. 1958 from Cornell University, Ithaca, NY, USA. Emeritus Professor at University of Washington, Seattle, WA, USA.

<https://sharepoint.washington.edu/phys/people/Pages/view-person.aspx?pid=85>

and the other half to

F. DUNCAN M. HALDANE and

Born 1951 in London, UK. Ph.D. 1978 from Cambridge University, UK. Eugene Higgins Professor of Physics at Princeton University, NJ, USA.

www.princeton.edu/physics/people/display_person.xml?netid=haldane&display=faculty

J. MICHAEL KOSTERLITZ

Born 1942 in Aberdeen, UK. Ph.D. 1969 from Oxford University, UK. Harrison E. Farnsworth Professor of Physics at Brown University, Providence, RI, USA.

<https://vivo.brown.edu/display/jkosterl>

"for theoretical discoveries of topological phase transitions and topological phases of matter"

Monte Carlo Simulation with Time Step Quantification in Terms of Langevin Dynamics

U. Nowak,^{1,*} R. W. Chantrell,² and E. C. Kennedy³

¹*Theoretische Tieftemperaturphysik, Gerhard-Mercator-Universität-Duisburg, 47048 Duisburg, Germany*

²*SEES, University of Wales Bangor, Dean Street, Bangor, LL57 1UT, United Kingdom*

³*Department of Applied Maths and Theoretical Physics, The Queen's University of Belfast, Belfast, BT7 1NN, United Kingdom*

(Received 7 June 1999)

For the description of thermally activated dynamics in systems of classical magnetic moments numerical methods are desirable. We consider a simple model for isolated magnetic particles in a uniform field with an oblique angle to the easy axis of the particles. For this model, a comparison of the Monte Carlo method with Langevin dynamics yields new insight to the interpretation of the Monte Carlo process, leading to the implementation of a new algorithm where the Monte Carlo step is time quantified. The numeric results for the characteristic time of the magnetization reversal are in excellent agreement with asymptotic solutions for the Néel-Brown model.

PACS numbers: 75.40.Gb, 75.40.Mg, 75.50.Tt

Studies of spin dynamics in particulate systems are currently of significant interest as model systems for understanding the thermodynamics of the reversal process. Brown [1] developed a theoretical formalism for thermally activated magnetization reversal based on the Fokker-Planck (FP) equation which led to a high energy barrier asymptotic formula in the axially symmetric case of a particle with easy (uniaxial) anisotropy axis collinear with the applied magnetic field. Since then extensive calculations [2–6] have been carried out in which improved approximations were found for the axially symmetric case. Coffey and co-workers [4–6] also derived formulas for the nonaxially symmetric case, investigating also the different regimes imposed by the damping parameter α of the Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) equation. This work represents an important basis for the understanding of dynamic processes in single-domain particles. New experimental techniques which allow for an investigation of nanometer-sized, isolated, magnetic particles confirmed this theoretical approach to thermal activation [7].

Unfortunately, the extension of this work to the important case of strongly coupled spin systems such as are found in micromagnetic calculations of magnetization reversal is nontrivial, and realistic calculations in systems with many degrees of freedom would appear to be impossible except by computational approaches. These are currently of two types: (i) calculations involving the direct simulation of the stochastic (Langevin) equation of the problem, in this case the LLG equation supplemented by a random force representing the thermal perturbations; this is referred to as the Langevin dynamics (LD) formalism [8,9]; and (ii) Monte Carlo (MC) simulations [10] with a continuously variable (Heisenberg-like) Hamiltonian [11,12]. The LD approach, although having a firm physical basis, is limited to time scales of the order of a few ns for strongly coupled systems. The MC approach is capable of studying longer time scales involving reversal over large energy barriers, but has the severe problem of

having no physical time associated with each step, resulting in unquantified dynamic behavior.

Physically, the dynamic behavior of interacting spin systems is a topic of considerable current interest, much of this interest being driven by the need to understand spin electronic devices such as MRAM. The possibility of truly dynamic models of strongly coupled systems would seem to be an important factor in the development of a fundamental physical understanding. This requires dynamic studies over the whole time range from ns and sub-ns to the so-called “slow dynamic” behavior arising from thermally excited decay of metastable states over time scales from 10–100 s and upwards. It is inconceivable that the LD technique can be used over the whole time scale and therefore a truly time quantified MC technique is necessary in order to allow calculations over the longer time scales of physical interest. Here we propose a technique for the quantification of the MC time step and give a supporting argument which results in a theoretical expression for the time step in terms of the size of the MC move, and also gives the validity criterion that the MC time step must be sufficiently large. Comparison with an analytical formula for relaxation in the intermediate to high damping limit is used to verify the theoretically predicted relationship relating the time step to the size of MC move. This represents an important first step in the process of deriving a theoretical formalism for time quantified MC calculations of strongly interacting spin systems.

We consider an ensemble of isolated single-domain particles where each particle is represented by a magnetic moment with energy

$$E(\underline{S}) = -dV S_z^2 - \mu_s \underline{B} \cdot \underline{S}, \quad (1)$$

where $\underline{S} = \underline{\mu}/\mu_s$ is the magnetic moment of unit length, $\underline{B} = B_x \hat{x} + B_z \hat{z}$ represents a magnetic field under an arbitrary angle ψ to the easy axis of the system, d is the uniaxial anisotropy energy density, and V is the volume of

the particle. Throughout this Letter we use the material parameters $V = 8 \times 10^{-24} \text{ m}^3$, $d = 4.2 \times 10^5 \text{ J/m}^3$, magnetic moment $\mu_s = 1.12 \times 10^{-17} \text{ J/T}$.

The LLG equation of motion with LD [1] is

$$\dot{\underline{S}} = -\frac{\gamma}{(1 + \alpha^2)\mu_s} \underline{S} \times (\underline{H}(t) + \alpha \underline{S} \times \underline{H}(t)), \quad (2)$$

where $\gamma = 1.76 \times 10^{11} (Ts)^{-1}$ is the gyromagnetic ratio, $\underline{H}(t) = \underline{\zeta}(t) - \frac{\partial E}{\partial \underline{S}}$, and $\underline{\zeta}$ is the thermal noise with $\langle \zeta_i(t) \rangle = 0$ and $\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t') 2\alpha k_B T \mu_s / \gamma$. i and j denote the Cartesian components.

The equation above is solved numerically using the Heun method [9]. Also, it is possible to obtain analytically asymptotic solutions for the escape rate which have been extensively compared with the exact numerical solutions from the corresponding matrix form of the FP equation for a wide range of parameters and nonaxially symmetric potentials [4–6].

Both of our simulations, MC as well as LD, start with the magnetic moments in the z direction. The magnetic field has a negative z component so that the magnetization will reverse after some time. The time that is needed for the z component of the magnetization to change its sign averaged over a large number of runs ($N = 1000$) is the characteristic time τ which corresponds to the inverse of the escape rate following from exact numerical solutions of the corresponding FP equation.

For the MC simulations we use a heat-bath algorithm with acceptance probability $p_a(\Delta E) = 1/[1 + \exp(\Delta E/k_B T)]$. The trial step of our MC algorithm is a random movement of the magnetic moment within a cone with a given size. In order to achieve this efficiently we construct a random vector with constant probability distribution within a sphere of radius R . This random vector is added to the initial moment and subsequently the resulting vector is normalized.

The size of the cone R of our algorithm influences the time scale the method simulates. We investigate the influence of R on our MC algorithm by varying R and calculating τ . As usual in a MC procedure the time is measured in Monte Carlo steps (MCS). For our calculation we use a field of $|\underline{B}| = 0.2 \text{ T}$ and an angle of $\psi = 27^\circ$ to the easy axis. The resulting energy barrier is $\Delta E = 8.2 \times 10^{-19} \text{ J}$; the temperature we chose for Fig. 1 is $\Delta E/k_B T = 3.3$. As Fig. 1 demonstrates, it is $\tau \sim R^{-2}$. This dependence can be understood by considering the moments as performing a random walk where R is proportional to the mean step width. Having understood that the MC time can be set by choosing an appropriate size of the step width we search for a relation for R such that one MCS corresponds to a real-time interval, in the sense of LD.

MC methods calculate trajectories in phase space following a master equation which describes the coupling of a system to the heat bath. Hence, only the irreversible part of the dynamics of the system is considered [13]—there

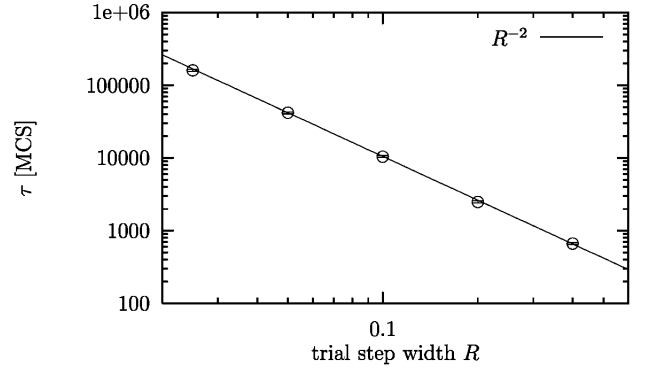


FIG. 1. Characteristic time versus trial step width for a MC simulation. The solid line is fitted, yielding $\tau \sim R^{-2}$.

is no precession of the moments since no equation of motion is solved during the simulation. Nevertheless, in the following we will argue that the exact knowledge of the movement of the single moments is not necessary in order to describe the effects of thermal activation in an ensemble of systems under the following conditions: (i) the relevant time scales are larger than the precession time t_p of the moments; (ii) the system is locally in equilibrium on these time scales. This is the case in the high damping limit where the energy dissipation during one cycle of the precession is considerably large so that the system relaxes (to the local energy minimum) on the same time scale $t_r \approx t_p$, or for large enough times where always the high damping limit is observed [5].

In Fig. 2 we present the time evolution of our system in phase space, (S_x, S_y) , following from a simulation of the LLG equation for high damping, $\alpha = 1$. We use $\Delta E/k_B T = 8.2$, a rather low temperature so that the characteristic time τ for the escape from the local energy minimum is of the order of 10^{-6} s (see also Fig. 3). The spin-precession time is $t_p = 9 \times 10^{-11} \text{ s}$ here. The simulation starts close to the local energy minimum with

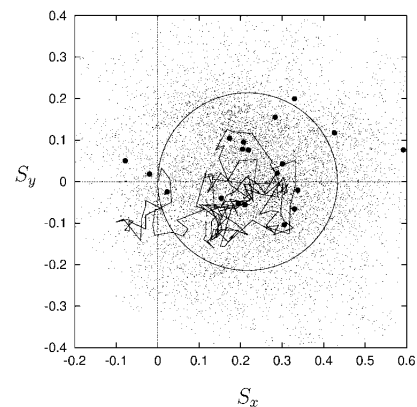


FIG. 2. Configuration in phase space (S_x, S_y) of an ensemble of 20 particles following from a LD simulation for $\alpha = 1$; see text for details.

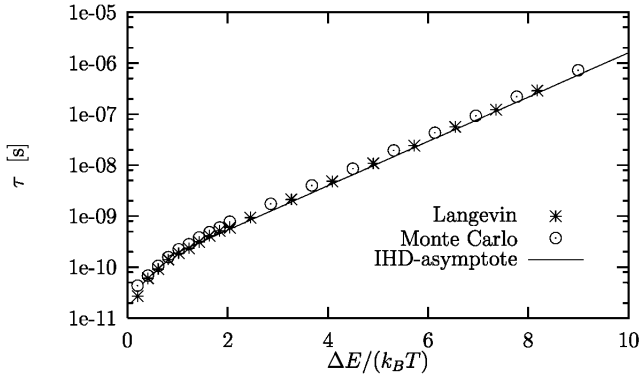


FIG. 3. τ versus inverse temperature: comparison of intermediate to high damping (IHD) asymptote, LD simulation, and MC simulation.

$S_x = S_y = 0, S_z = 1$ and the solid line shows the trajectory of one moment over a time interval of $\Delta t = t_p$. The 20 points are the positions of an ensemble of 20 moments after the same time. As one can see, the moments show no significant precession (the precession of an undisturbed moment, i.e., without relaxation and fluctuations is indicated by the circle around the energy minimum at $S_y = 0, S_x \approx 0.22$). The small dots represent 1000 states of the ensemble for $t < 6 \times t_p$. Altogether, Fig. 2 demonstrates that in the high damping case already after time periods of only a few t_p the moments are uncorrelated and the ensemble reaches a local equilibrium configuration (remember that the time scale to leave the local equilibrium is much larger here so that Fig. 2 shows only the local short-time equilibration, not the escape from the local energy minimum).

We will show that this high-damping scenario can also be simulated by a MC simulation and we will now derive a relation for R in order to quantify the MC time step. The intention is to compare the fluctuations which are established in the MC technique within one MCS with the fluctuations within a given time scale associated with the linearized LLG equation. Close to a local energy minimum one can write the energy, given that first order terms vanish as

$$E \approx E_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij} S_i S_j, \quad (3)$$

where the S_i are the variables representing small deviations from equilibrium. In our system, for $B_x = 0$ we find equilibrium along the z axis, leading to variables S_x and S_y . The energy increase ΔE associated with fluctuation in S_x and S_y is $\Delta E \approx \frac{1}{2}(A_{xx}S_x^2 + A_{yy}S_y^2)$, with $A_{xx} = A_{yy} = 2dV + \mu_s B_z$. Rewriting the LLG equation in the linearized form, $\dot{S}_x = L_{xx}S_x + L_{xy}S_y$, $\dot{S}_y = L_{yx}S_x + L_{yy}S_y$, it has been shown [14] that the correlation function takes the form $\langle S_i(t)S_j(t') \rangle = \mu_{ij}\delta_{i,j}\delta(t - t')$. Dirac's δ function is here an approximation for exponentially decaying correlations on time scales $t - t'$ that are

much larger than the time scale of the exponential decay t_r . The covariance matrix μ_{ij} can be calculated from the system matrices \mathbf{A} and \mathbf{L} as [14] $\mu_{ij} = -k_B T (L_{ik}A_{kj}^{-1} + L_{jk}A_{ki}^{-1})$. For our problem a short calculation yields $\mu_{xx} = \mu_{yy} = 2k_B T \frac{\alpha\gamma}{(1+\alpha^2)\mu_s}$. Integrating the fluctuating magnetization $S_x(t)$ over a finite time interval Δt we obtain

$$\langle \bar{S}_x^2 \rangle = \mu_{xx} \Delta t = 2k_B T \frac{\alpha\gamma}{(1+\alpha^2)\mu_s} \Delta t, \quad (4)$$

representing the fluctuations of S_x averaged over a time interval Δt following from the linearized LLG equation.

Next, we calculate the fluctuations $\langle S_x^2 \rangle$ during one MCS of a MC simulation. This is possible if we assume that all magnetic moments are initially in their equilibrium position. For our MC algorithm described above the probability distribution for trial steps with step width $r = \sqrt{S_x^2 + S_y^2}$ is $p_t = 3\sqrt{R^2 - r^2}/(2\pi R^3)$. For the acceptance probability we use $\Delta E(r^2)$ from Eq. (3). Hence, for the fluctuations within one MC step it is

$$\langle S_x^2 \rangle = 2\pi \int_0^R r dr \frac{r^2}{2} p_t(r) p_a(r) = \frac{R^2}{10} + \mathcal{O}(R^4), \quad (5)$$

where the last line is an expansion for small R . By equalizing the fluctuations within corresponding time intervals we find the relation

$$R^2 = \frac{20k_B T \alpha\gamma}{(1+\alpha^2)\mu_s} \Delta t. \quad (6)$$

Note from our derivation above it follows that one time step Δt must be larger than the intrinsic time scale t_r of the relaxation. This means, as already mentioned above, that the Monte Carlo method can work only on time scales that are much larger than any microscopic time scale of a precession or relaxation (to local equilibrium) of the moment.

In principle, Eq. (6) gives the possibility to choose the trial step for a MC simulation in such a way that 1MCS corresponds to a real-time interval, say $\Delta t = 10^{-12}$ s. However, there are of course restrictions for possible values of R , like $R < 1$. Also, R should not be too small since then a Monte Carlo algorithm is inefficient. Therefore, either one has to choose such a value for Δt so that R takes on reasonable values (these will usually be of the order of 10^{-12} s) or one uses a reasonable constant value for R , say 0.1, and uses Eq. (6) to calculate Δt as the real-time interval corresponding to 1MCS. In the following we use the first method since it turns out to be very efficient to change R with temperature. However, we confirmed that the other method yields the same results.

To test the validity of our considerations we performed MC simulations with an algorithm using a trial step according to Eq. (6) with $\Delta t \approx 6 \times 10^{-12}$ s (the inverse value of γ ; in other words, the time in the LLG equation is rescaled

by γ). For Fig. 3 we set $\alpha = 1$ and compare the data for $\tau(T)$ following from our MC simulation with results from LD simulations and with the IHD asymptote [5,6], namely,

$$\tau = \frac{2\pi\omega_0}{\Omega_0\omega_2} e^{\beta(V_0-V_2)} = \frac{2\pi\omega_0}{\Omega_0\omega_2} e^{\Delta E/k_B T}, \quad (7)$$

where ω_0 and Ω_0 are the saddle and damped saddle angular frequencies which have been defined in Eqs. (21) and (22) of Ref. [6] explicitly. ω_2 is the well angular frequency for the deeper of the two potential wells and is defined in Eq. (20) of Ref. [6]. All have been defined in terms of the coefficients of the truncated Taylor series representation of the energy equation described in detail in Sec. V of Ref. [4] [particularly Eqs. (59)–(64)]. For the purpose of comparison with MC and LD simulations, we consider one escape path only, $e^{\beta(V_0-V_2)}$, where $\beta = V/k_B T$ and $V_0 - V_2$ is the energy described by Eq. (62) of Ref. [4]. For our purposes, $\beta(V_0 - V_2)$ may be represented by $\Delta E/k_B T$. The validity condition for the IHD formula is $\alpha \Delta E/k_B T \gg 1$, where $\Delta E/k_B T > 1$ which have been satisfied in all cases represented here.

From Fig. 3 it is clear that the LD data agree with the asymptote above. For higher temperatures the asymptote is no longer appropriate. Here, the numerical data for τ tend to zero for $T \rightarrow \infty$ as one expects. The MC data deviate slightly and are roughly 10% larger. However, considering the fact that to the best of our knowledge this is the first comparison of a “real-time MC simulation” with LD simulations and asymptotic formulas, the agreement is remarkable, especially taking into account the simple form of Eq. (6) underlying our algorithm and that there is no adjusted parameter in all our calculations and formulas.

Since we expect that our MC procedure leads to a high damping limit we also tested the α dependence of τ . Figure 4 shows the corresponding data for the same parameter values as before and $\Delta E/k_B T = 3.3$. The figure shows that the MC data converge to the IHD formula and to the data from LD simulation for large α . Even the small 10% deviation of the MC data mentioned before (Fig. 3) vanishes in the limit of larger α .

To summarize, considering a simple system of isolated single-domain particles, we derived an equation for the trial step width of the MC process so that one step of the MC algorithm can be related to a certain time interval of the LLG equation. Testing this algorithm we found agreement with data from LD simulation as well as with intermediate to high damping asymptotes for the characteristic times of the magnetization reversal. Even though our algorithm was derived only for the special system which we consider here, the arguments we brought forward might be the fundament even for the MC simulations of more complicated systems. Work following these lines is under progress and first results for an interacting spin system

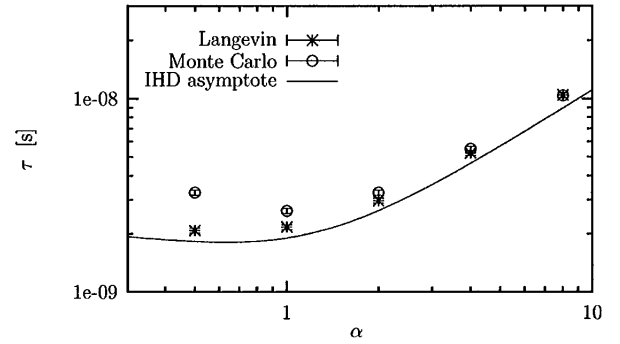


FIG. 4. τ versus damping constant: comparison of IHD asymptote, LD simulation, and MC simulation.

using the same MC step width within a single spin flip method confirm the validity of our approach [15].

We thank W.T. Coffey and K.D. Usadel for helpful discussions. E.C.K. thanks EPSRC for financial support (GR/L06225), as well as R.W.C. (GR/M24011). This work was done within the framework of the COST action P3 working group 4.

*Email address: uli@thp.uni-duisburg.de

- [1] W.F. Brown, Phys. Rev. **130**, 1677 (1963).
- [2] I. Klik and L. Gunther, J. Stat. Phys. **60**, 473 (1990).
- [3] H.B. Braun, Phys. Rev. Lett. **71**, 3557 (1993); J. Appl. Phys. **85**, 6127 (1999).
- [4] W.T. Coffey, D.S.F. Crothers, J.L. Dormann, L.J. Geoghegan, and E.C. Kennedy, Phys. Rev. B **58**, 3249 (1998).
- [5] W.T. Coffey, D.S.F. Crothers, J.L. Dormann, Yu.P. Kalmykov, E.C. Kennedy, W. Wernsdorfer, Phys. Rev. Lett. **80**, 5655 (1998).
- [6] W.T. Coffey, D.S.F. Crothers, J.L. Dormann, L.J. Geoghegan, E.C. Kennedy, and W. Wernsdorfer, J. Phys. Condens. Matter **10**, 9093 (1998).
- [7] W. Wernsdorfer, E. Bonet Orozco, K. Hasselbach, A. Benoit, B. Barbara, N. Demoncey, A. Loiseau, H. Pascard, and D. Mailly, Phys. Rev. Lett. **78**, 1791 (1997).
- [8] R.W. Chantrell, J.D. Hannay, M. Wongsam, T. Schrefl, and H.-J. Richter, IEEE Trans. Magn. **34**, 1839 (1998).
- [9] J.L. García-Palacios and F.J. Lázaro, Phys. Rev. B **58**, 14937 (1998).
- [10] K. Binder and D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1997).
- [11] J.-M. Gonzalez, R. Ramirez, R. Smirnov-Rueda, and J. Gonzalez, Phys. Rev. B **52**, 16034 (1995).
- [12] D. Hinzke and U. Nowak, Phys. Rev. B **58**, 265 (1998).
- [13] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1965), p. 548.
- [14] A. Lyberatos, D.V. Berkov, and R.W. Chantrell, J. Phys. Condens. Matter **5**, 8911 (1993).
- [15] D. Hinzke and U. Nowak, cond-mat/9908150, Phys. Rev. B (to be published).