

Seminar zur Theorie der Teilchen und Felder
Numerische Simulation des Ising-Modells mit der
Monte-Carlo-Methode

Golo Strickmann

3.2.10

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Monte-Carlo-Methode	2
3	Ising-Modell	3
3.1	Observablen:	3
4	Numerische Realisierung	4
4.1	Schätzwert	4
4.1.1	simple sampling	4
4.1.2	importance sampling	4
4.2	Markow-Prozess	4
4.2.1	Ergodizität	5
4.2.2	detailed balance	5
4.3	Metropolis-Algorithmus	6
4.3.1	Realisierung des Metropolis-Algorithmus:	7
4.4	Messungen	8
4.5	Ausblick	9
4.5.1	Cluster-Algorithmus	9
5	Quellen	10

1 Einleitung

Computereperimente sind ein immer beliebter werdendes Hilfsmittel der theoretischen Physik. Besonders bei analytisch nicht lösbaren Problemen, wie dem 3d-Ising-Modell, bewähren sie sich. Die Kunst ist es, für ein Problem einen effizienten Algorithmus zu finden, um möglichst schnell Simulationsergebnisse zu erhalten. Wir betrachten die Simulation eines Ising-Modells mit anhand der *Single-Spin-Flip-Dynamik*, welche den *Metropolis-Algorithmus* als Grundlage hat. Da dieser Zufallszahlen verwendet, gehört er zu der Gruppe der *Monte-Carlo-Simulationen*.

2 Monte-Carlo-Methode

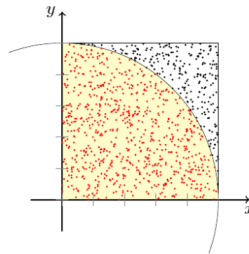


Abbildung 1: Illustration zur Berechnung von π

Die Lösung eines mathematischen Problems unter Verwendung von Zufallszahlen wird **Monte-Carlo-Methode** genannt. So kann beispielsweise die Zahl π wie folgt approximiert werden:

Man generiert zufällige Punkte des Einheitsquadrats und ermittelt den Abstand zum Ursprung. Das Verhältnis der Punkte N_i , die innerhalb des Kreises mit dem Radius 1 liegen zur Gesamtzahl der Punkte N_{ges} entspricht $\pi/4$. Damit ergibt sich für π :

$$\pi = 4 \cdot \frac{N_i}{N_{ges}}$$

3 Ising-Modell

Beim Ising-Modell interpretieren wir die gesamte Magnetisierung M des Systems als effektive Konsequenz der Spins von Atomen. Dabei wird die Energie des Systems durch die Hamiltonfunktion

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \quad (1)$$

beschrieben, wobei im folgenden der Einfachheit halber $B = 0$ angenommen wird. Es wird nur die Wechselwirkung der nächsten Nachbarn mit einer Kopplungsstärke J berücksichtigt. Folgende zwei inhärenten Diskreditäten machen es besonders leicht, das Problem zu implementieren: Die Lokalisierung der Atome auf einem periodischen Gitter und die Beschränkung auf Spinwerte von $+1$ und -1 . Entsprechend der Zugehörigkeit zum kanonischen Ensemble sind die Wahrscheinlichkeiten der Zustände α boltzmann-gewichtet

$$p_\alpha = e^{-\beta E_\alpha} \quad (2)$$

Je größer das System und je besser der Algorithmus, desto genauer kann das Problem untersucht werden.

3.1 Observablen:

Größen, die uns interessieren sind die Erwartungswerte der Magnetisierung $\langle M \rangle$ und der inneren Energie $\langle E \rangle$ des System und daraus abgeleitete Größen, wie die Suszeptibilität χ oder die spezifische Wärme C .

Wir betrachten das Ising-Modell als Repräsentant des kanonischen Ensembles. Teilchenzahl N und Temperatur T des Systems sind also konstant. Durch vom Wärmebad angeregte thermische Fluktuationen ist die Gesamtenergie H des Systems nicht konstant. Wir tragen diesem Umstand durch Betrachtung der Dynamik des Systems Rechnung und erhalten die Messwerte anhand einer Zeitmittelung.

4 Numerische Realisierung

4.1 Schätzwert

Da der Erwartungswert einer Observablen

$$\langle Q \rangle = \sum_{\alpha} Q_{\alpha} p_{\alpha} \quad (3)$$

für ausreichend große Systeme aufgrund der zu hohen Anzahl der Zustände α nicht exakt ausgerechnet werden kann, wird ein Schätzwert Q_M definiert. Dieser sollte mit zunehmender Stichprobengröße $M \rightarrow \infty$ rasch gegen den Erwartungswert konvergieren $Q_M \rightarrow \langle Q \rangle$.

Wählen wir die Zustände, die zum Schätzwert beitragen, mit der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p^{(i)}$ aus, so gilt für den Erwartungswert

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M \frac{Q_i}{p^{(i)}} p_i}{\sum_{i=1}^M \frac{1}{p^{(i)}} p_i} \quad (4)$$

4.1.1 simple sampling

Bei einer gleichverteilten Auswahl der Beiträge des Schätzwertes ($p^{(i)} = \frac{1}{M}$) ergibt sich der Schätzwert

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_i p_i}{\sum_{i=1}^M p_i}$$

4.1.2 importance sampling

Eine bessere Wahl ist, Zustände, die öfter vorkommen, verstärkt zu berücksichtigen. Dies führt natürlich zu einer boltzmann-verteilten Auswahl der Zustände $p^{(i)} = e^{-\beta E_i}$. Der Schätzwert beträgt dann

$$Q_M = \sum_{i=1}^M Q_i \quad (5)$$

Weil die Zustände enger beisammen liegen, ist auch die Varianz des Schätzwertes minimal.

4.2 Markow-Prozess

Eine leicht implementierbare Möglichkeit, Zustände nach einer beliebigen Wahrscheinlichkeitsverteilung $p^{(i)}$ auszuwählen ist der Markow-Prozess. Beginnend mit einem Anfangszustand werden sukzessive Zustände mit der Übergangsrate $P(\mu \rightarrow \nu)$ generiert. Die Übergangsraten hängen nicht von der Vorgeschichte

ab und sollen für große Stichproben eine Verteilung nach $p^{(i)}$ gewährleisten. Da ein Zustand generiert werden muss, ist

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (6)$$

Um zu gewährleisten, dass die gewünschte Verteilung erreicht wird, müssen zwei Kriterien erfüllt sein

- Ergodizität
- detailed balance

4.2.1 Ergodizität

Jeder Zustand muss von jedem Zustand aus nach einer endlichen Zahl von Markow-Schritten erreichbar sein.

4.2.2 detailed balance

Detailed balance verhindert das Auftreten von stabilen Grenzyklen und gewährleistet, dass die Verteilung auch erreicht wird. Zur Verdeutlichung betrachten wir die Gleichgewichtsbedingung

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (7)$$

unter Berücksichtigung der Summenregel (6)

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) p_{\nu}$$

In Vektorschreibweise mit dem Zeitinkrement 1:

$$\mathbf{p}(t+1) = \mathbf{P} \cdot \mathbf{p}(t)$$

Nun soll für den Gleichgewichtsfall $t \rightarrow \infty$

$$\mathbf{p}(\infty) = \mathbf{P} \cdot \mathbf{p}(\infty)$$

gelten.

Doch um Grenzyklen

$$\mathbf{p}(\infty) = \mathbf{P}^n \cdot \mathbf{p}(\infty)$$

zu verhindern, reicht (7) nicht aus und muss eingeschränkt werden. Die **detailed balance**-Bedingung

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = P(\nu \rightarrow \mu) p_{\nu} \quad (8)$$

verhindert ein zyklisches Variieren des Wahrscheinlichkeitsvektors \mathbf{p} und ist zugleich leicht zu realisieren (siehe Abschnitt 4.3).

4.3 Metropolis-Algorithmus

Eine konkrete Realisierung des Markow-Prozesses wird im Folgenden anhand der Single-Spin-Flip-Dynamik des Ising-Modells veranschaulicht. Wie der Name schon sagt, werden neue Zustände erzeugt, indem ein einziger Spin umgedreht wird.

Die Übergangsrate P wird als das Produkt von Generations- g und Akzeptanzrate A aufgefasst

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) \cdot A(\mu \rightarrow \nu) \quad (9)$$

wobei die Spins gleichberechtigt ausgewählt werden ($g = 1/N$). Damit ist die Ergodizität gewährleistet, denn aus jedem beliebigen Zustand kann durch eine Reihe von Spinflips jeder andere Zustand erzeugt werden. Die Bedingung der detailed balance führt zu

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} \stackrel{(9)}{=} \frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} \stackrel{(8)}{=} \frac{p_\nu}{p_\mu} \stackrel{(2)}{=} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (10)$$

das heißt das Verhältnis der Übergangsraten hängt nur von der Energiedifferenz ab. Der Ansatz

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (11)$$

erfüllt augenscheinlich die Bedingung (10). In Abb.2 ist die Akzeptanzrate gegen die Energie aufgetragen, wobei A_0 so gewählt ist, dass A maximal den Wert 1 annimmt.

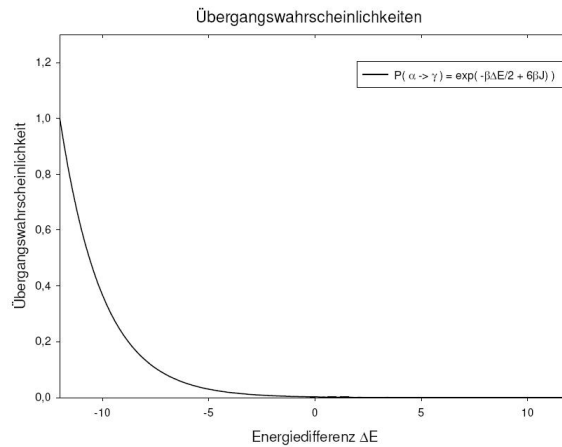


Abbildung 2: Übergangswahrscheinlichkeit des trivialen Algorithmus in Abhängigkeit von ΔE für das 3d Ising-Modell

Um eine höhere Akzeptanzrate zu erhalten und damit einen effizienteren Algorithmus, gibt es eine andere Möglichkeit (10) paarweise zu erfüllen:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{für } E_\nu > E_\mu \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (12)$$

Algorithmen mit einer Akzeptanzrate in Form von (12) werden **Metropolis-Algorithmen** genannt.

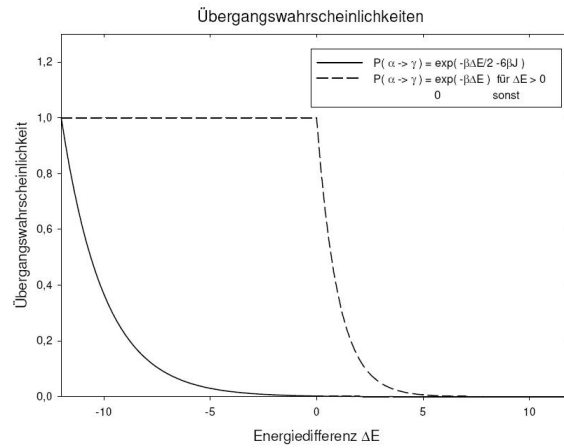


Abbildung 3: Übergangswahrscheinlichkeit des Metropolis-Algorithmus (gestrichelte Linie) in Abhängigkeit von ΔE für das 3d Ising-Modell

Wie man in Abb.3 erkennen kann, werden beim Metropolis-Algorithmus deutlich mehr Spinflips vollzogen, als bei dem primitiven Ansatz (11).

4.3.1 Realisierung des Metropolis-Algorithmus:

Der Algorithmus generiert pro Schritt (1.-4.) zwei Zufallszahlen und läuft nach folgendem Schema:

0. Anfangszustand auswählen
1. Gitterpunkt auswählen (per ZZ)
2. Energiedifferenz und Akzeptanzrate A ermitteln
3. ZZ a aus $]0, 1]$ ermitteln
4. falls $a < A$: Spin flippen und weiter zu (1.)

N Durchläufe bezeichnet man als Monte-Carlo-Step (*MCS*). Das ist die Zeiteinheit, nach der sich das System signifikant verändert haben kann.

Es ist sinnvoll, die Akzeptanzraten $A(\Delta E)$ einmalig im Vorfeld der Simulation zu berechnen. Man erspart sich auf diese Weise überflüssige Fließkommazahlenberechnungen.

Weiterhin ist es von Nutzen, die Erwartungswerte nicht auf die naive Art zu berechnen

$$E_t = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i(t) s_j(t),$$

sondern aufgrund der Änderung des vorherigen Zustandes unter Verwendung der Kenntnis des „Erwartungswertes“ des Anfangszustandes

$$E_t = E_0 + \sum_t \Delta E_t.$$

Dies hat außerdem den Vorteil, dass sich anhand des Plots der Erwartungswerte eine Möglichkeit ergibt, den Gleichgewichtszustand des Systems zu erkennen.

4.4 Messungen

Nach dem Erreichen des Gleichgewichtszustandes kann die Messung initiiert werden. Um beispielsweise den kritischen Exponenten α zu ermitteln, berechnet man $c = \frac{k\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ für eine Reihe von T (siehe Abb.4)

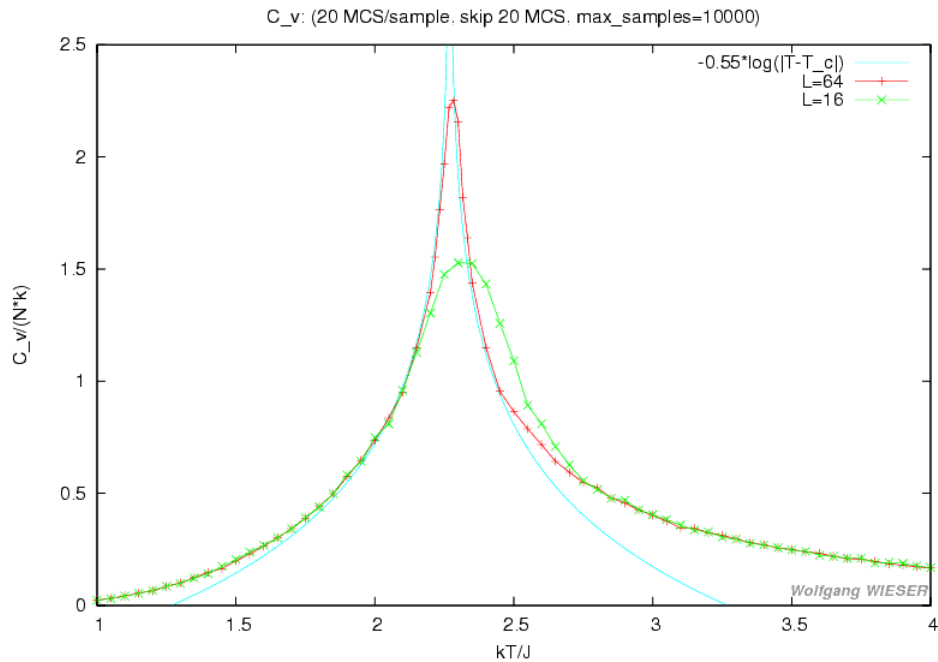


Abbildung 4: Spezifische Wärme pro Spin c gegen kT/J

Man erkennt deutlich, dass das Gitter mit der Länge von 64 Spins (rot) das theoretische Ergebnis (blau) besser approximiert, als das Gitter der Länge von 16 Spins (grün).

Um die Relaxationsdauer ins Gleichgewicht zu minimieren, gilt es, die Anfangszustände günstig zu wählen. Im Falle einer Messreihe mit der Temperatur als Parameter verwenden wir den Gleichgewichtszustand der nächstkleineren Temperatur als Anfangszustand der darauf folgenden Messung.

4.5 Ausblick

4.5.1 Cluster-Algorithmus

In der Nähe der kritischen Temperatur treten aufgrund der großen Korrelationslänge Cluster auf. Die Flipwahrscheinlichkeit eines Spins innerhalb eines Clusters ist minimal, da eine maximale Energiedifferenz vorliegt. Daher ist es sinnvoll, nach einem anderen Algorithmus zu suchen. Der **Wolf-Cluster-Algorithmus** generiert einen Cluster (s. Abb.5) und flipt diesen. Dabei

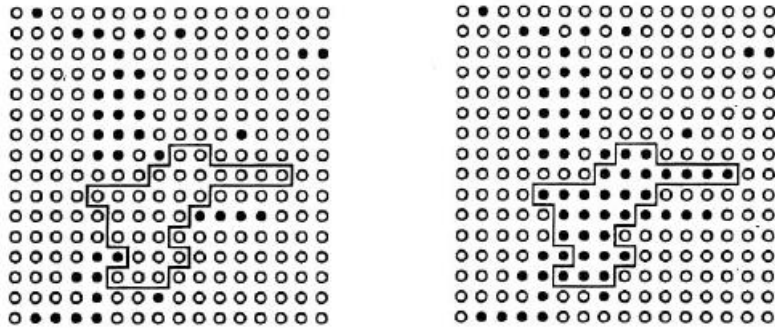


Abbildung 5: Illustration des Cluster-Algorithmus

5 Quellen

- wikipedia.de
- Newman, M., Barkema, G. T. und Newman, M. E. J., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press
- www.triplespark.net/sim/isingmag/