

Statistische Mechanik ungeordneter Systeme, SoSe 2005

Timo Aspelmeier, Alexander K. Hartmann, Universität Göttingen

24. Juni 2005

10 Monte Carlo für Spingläser

Spingläser haben sehr zerklüftete Energielandschaft \rightarrow bei niedrigen Temperaturen T in lokalen Minima gefangen. \rightarrow keine gute Equilibrierung.

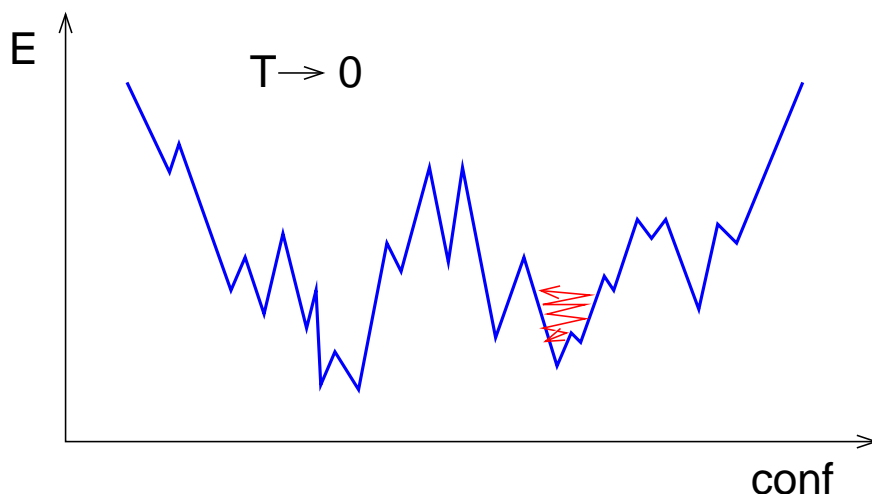


Abbildung 1: Bei tiefen Temperaturen können Spingläser bei single-spin-flip Monte Carlo Simulationen nur schwer lokalen Minima der Energielandschaft entkommen.

Hier werden einige mögliche Auswege vorgestellt.

10.1 Parallel Tempering

Grundidee:

1. *eine* Realisierung (der eingefrorenen Unordnung) bei *mehreren* Temperaturen $T_1 < T_2 < \dots < T_m$ gleichzeitig simulieren, die Konfigurationen bei verschiedenen T_k sind unabhängig.
2. Von Zeit zu Zeit Konfigurationen bei benachbarten T_k, T_{k+1} mittels eines “übergreifenden” Monte Carlo Schritts ausgetauscht, so dass detaillierte Balance erfüllt ist.

Dazu: Thermodynamisches Gewicht zweier benachbarter Konfigurationen \underline{S} bei T_k und \underline{U} bei T_{k+1} .

$$P_{k,k+1}(\underline{S}, \underline{U}) = \frac{1}{\tilde{Z}_{k,k+1}} \exp\left(-\beta_k H(\underline{S})\right) \exp\left(-\beta_{k+1} H(\underline{U})\right), \quad (1)$$

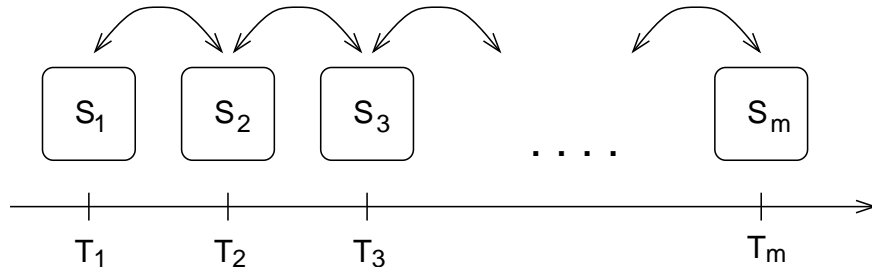


Abbildung 2: Parallel Tempering mit m verschiedenen Temperaturen $T_1 < T_2 < \dots < T_m$. Bei jeder Temperatur wird das System mit normalen Monte Carlo simuliert. Von Zeit zu Zeit werden Konfigurationen zwischen benachbarten Temperaturen ausgetauscht, so dass detaillierte Balance erfüllt ist.

mit $\tilde{Z}_{k,k+1}$ = zugehörige Zustandssumme, $\beta_k = 1/T_k$ und H : Hamiltonian.
Def.:

$$\Delta_{k,k+1}(\underline{S}, \underline{U}) \equiv (-\beta_k + \beta_{k+1}) \left(H(\underline{S}) - H(\underline{U}) \right) \quad (2)$$

Hinweise:

1. $(-\beta_k + \beta_{k+1}) < 0$
2. $\Delta_{k,k+1}(\underline{S}, \underline{U}) = -\Delta_{k,k+1}(\underline{U}, \underline{S})$.

Wahl der Übergangsraten:

$$W_{k,k+1}([\underline{S}, \underline{U}] \rightarrow [\underline{U}, \underline{S}]) = \exp(-\max[\Delta_{k,k+1}(\underline{S}, \underline{U}), 0]). \quad (3)$$

Somit: Tausch findet nicht statt mit Wahrscheinlichkeit: $1 - W_{k,k+1}([\underline{S}, \underline{U}] \rightarrow [\underline{U}, \underline{S}])$.

Interpretation: Falls Konf. bei höhere Temperatur T_{k+1} die niedrigere Energie hat, $H(\underline{U}) < H(\underline{S})$, also eine atypische Situation, ist: $\Delta_0 \equiv \Delta_{k,k+1}(\underline{S}, \underline{U}) < 0$, also $W_{k,k+1}([\underline{S}, \underline{U}] \rightarrow [\underline{U}, \underline{S}]) = 1$

Beweis von detaillierter Balance:

Annahme, o.V.d.A. $H(\underline{U}) < H(\underline{S})$, also $W_{k,k+1}([\underline{U}, \underline{S}] \rightarrow [\underline{S}, \underline{U}]) = \exp(\Delta_0)$:

$$\begin{aligned} & W_{k,k+1}([\underline{S}, \underline{U}] \rightarrow [\underline{U}, \underline{S}]) P_{k,k+1}(\underline{S}, \underline{U}) - W_{k,k+1}([\underline{U}, \underline{S}] \rightarrow [\underline{S}, \underline{U}]) P_{k,k+1}(\underline{U}, \underline{S}) \\ &= 1 P_{k,k+1}(\underline{S}, \underline{U}) - \exp(\Delta_0) P_{k,k+1}(\underline{U}, \underline{S}) \\ &= 1 \frac{1}{\tilde{Z}_{k,k+1}} \exp\left(-\beta_k H(\underline{S})\right) \exp\left(-\beta_{k+1} H(\underline{U})\right) - \\ & \quad \exp\left((-\beta_k + \beta_{k+1})(H(\underline{S}) - H(\underline{U}))\right) \frac{1}{\tilde{Z}_{k,k+1}} \exp\left(-\beta_k H(\underline{U})\right) \exp\left(-\beta_{k+1} H(\underline{S})\right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Empirische Erfahrung: Akzeptanzraten für Austausch ca 0.5. \rightarrow Wahl der Temperaturen (iteratives Schema, siehe [1]), dichter bei tieferen Temperaturen.

10.2 Parallel Tempering für Spingläser

Spinglas Hamiltonian:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j; \quad (5)$$

hier: Ising Spins $S_I = \pm 1$ auf einfach kubischen Gitter, nächste Nachbar Wechselwirkung $\langle ij \rangle$. Bonds J_{ij} sind Normalverteilt

$$p(J) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-J^2/2) \quad (6)$$

Ziel: Untersuchung der Phasenraumstruktur. Seien $\underline{S}^{(1)}$ und $\underline{S}^{(2)}$ zwei unabhängige Zustände bei Temperatur T . Meßgrößen:

Überlapp: (N : Anzahl Spins)

$$q \equiv \frac{1}{N} \sum_i S_i^{(1)} S_i^{(2)} \quad (7)$$

Link-Überlapp: (N_b : Anzahl Bonds (hier $3N$))

$$q_l \equiv \frac{1}{N_b} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{(1)} S_j^{(1)} S_i^{(2)} S_j^{(2)} \quad (8)$$

q vergleicht die Spins zweier Konfigurationen, q_l die Bindungen. Es ist $q, q_l \in [-1, 1]$.

Bsp1: für $S_i^{(1)} = -S_i^{(2)}$ ist $q = -1$ und $q_l = 1$.

Bsp2: Sei $S_i^{(1)}$ ein Zustand, und $S_i^{(2)}$ unterscheide sich um ein "Droplet" (siehe Bild 3). Sei V die Anzahl der Spins im Droplet und O die Anzahl der Bonds zwischen Droplet und Nicht-Droplet (Oberfläche des Droplets). Dann gilt:

$$q = 1 - 2V/N \quad (9)$$

$$q_L = 1 - 2O/N \quad (10)$$

$$(11)$$

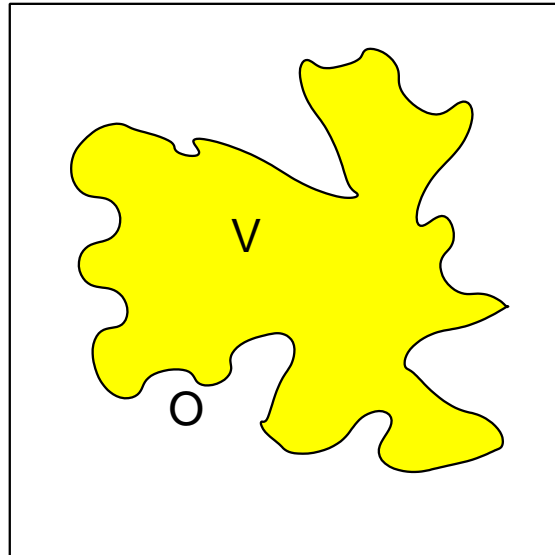


Abbildung 3: Ein umgedrehte Domäne von Spins, ein Droplet, mit Volumen V und Oberfläche O .

Die Verteilungen $P(q)$, $P_l(q_l)$ der Überlapps, thermodynamisch gemittelt $\langle \dots \rangle$ und über die Unordnung $[\dots]_J$ charakterisieren die Energielandschaft (M =Anzahl der Konfigurationen im Sample):

$$P(q) = \frac{2}{M(M-1)} [\langle \sum_{\alpha, \beta} \delta(q - q^{\alpha, \beta}) \rangle]_J \quad (12)$$

Ferromagnet: $P(q)$ und $P(q_l)$ sind für $N \rightarrow \infty$ δ Funktionen: $P(q) = 0.5(\delta(q+q_0) + \delta(q-q^0))$ und $P_l(q_l) = \delta(q - q_l^0)$ mit $q^0, q_l^0 \rightarrow 1$ for $T \rightarrow 0$.

SK-Spینگlas: $P(q)$ und $P_l(q)$ sind breite Verteilungen mit Gewicht über einen ganzen Bereich.

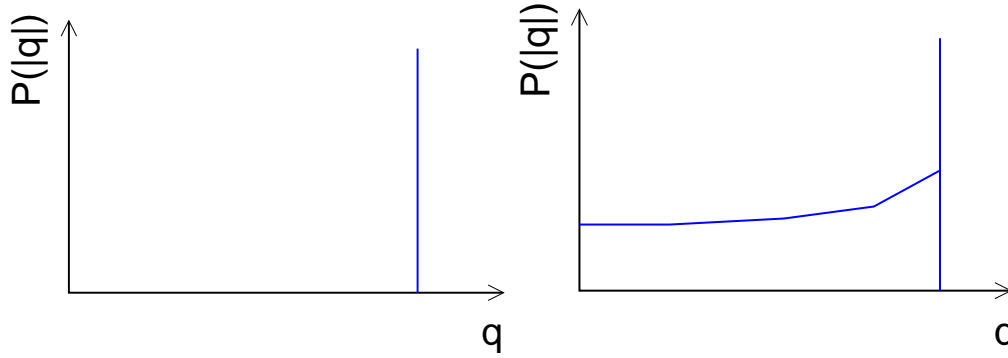


Abbildung 4: Schematische Verteilung der Überlapps (für q , ähnlich für q_l) im thermodynamischen Limes für Ferromagnet (links) und SK Spینگlas (rechts).

Frage: was ergibt sich für endlichdimensionale Spینگläser (Lang und intensiv diskutierte Frage) in der Spینگlasphase \rightarrow Simulationen mit Parallel Tempering. Dazu: Bei jeder Temperatur T_k *zwei* unabhängige Konfigurationen $\rightarrow q, q_l$ ausrechenbar.

Erste Teilfrage: Wie stellt man Equilibrierung fest?

Antwort: [2] Man kann für die gemittelte Energie $U = -1/N \sum_{\langle i,j \rangle} [J_{ij} \langle S_i S_j \rangle]_J$ und den gemittelten Link Überlapp (für die Gauss Verteilung) zeigen (siehe Aktivator 10):

$$[\langle q_l \rangle]_J = 1 - \frac{T|U|}{(z/2)} \quad (13)$$

Am Anfang: Für jede T sind die Konfigurationen zufällig $\rightarrow q_l$ klein, $|U|$ klein, also $1 - \frac{T|U|}{(z/2)}$ groß \rightarrow beide Seiten nähern sich von verschiedenen Seiten dem Gleichgewicht.

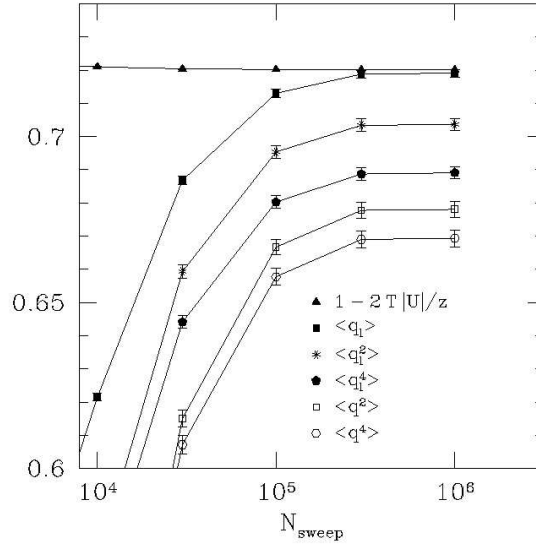


Abbildung 5: Link Überlapp sowie $1 - \frac{3T|U|}{2}$ als Funktion der Monte Carlo Schritte (sowie einige Momente von q bzw. q_l). Für thermisches Gleichgewicht müssen $\langle q_l \rangle$ und $1 - \frac{T|U|}{(z/2)}$ überein stimmen.

Zweite Teilfrage: Ergebnisse?

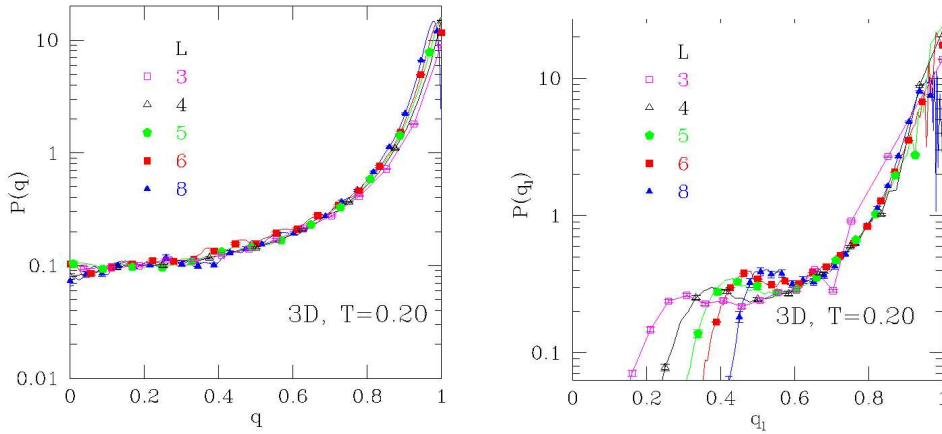


Abbildung 6: Verteilung der Überlapps (links) bzw. Link-Überlapps bei $T = 0.2$ ($T_c \approx 1.1$) für verschiedene kleine Systemgrößen.

Fazit: Das Verhalten liegt zwischen Ferromagnet und SK Modell, durch viele andere aktuelle Ergebnisse bestätigt.

10.3 Biased Sampling

Messung von Mittelwerten in MC Simulationen:

$$\langle A \rangle := \sum_{\mathbf{y}} A(\mathbf{y}) P(\mathbf{y}), \quad (14)$$

Wiederholung: Importance Sampling: Sample Konfigurationen $\underline{y}^1, \dots, \underline{y}^M$ gemäß $P(\cdot) \rightarrow \langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_i A(\mathbf{y})$ (arithmetisches Mittel)
Annahme: Generierung von Konfigurationen \underline{y}^i gemäß anderer Verteilung $Q(\cdot)$, Annahme: $Q(\mathbf{y}) > 0 \forall \mathbf{y}$, damit wird Gl. (14) zu [3]

$$\langle A \rangle = \sum_{\mathbf{y}} A(\mathbf{y})P(\mathbf{y}) = \sum_{\mathbf{y}} A(\mathbf{y}) \frac{P(\mathbf{y})}{Q(\mathbf{y})} Q(\mathbf{y}) = \langle AP/Q \rangle_Q, \quad (15)$$

wobei $\langle \dots \rangle_Q$ Mittelung gemäß Q .

Also: Sample gemäß Q , berechne arithmetisches Mittel von $\{A(\mathbf{y}^i)P(\mathbf{y}^i)/Q(\mathbf{y}^i)\}$.

Anwendungsbeispiel: Varianzreduktion.

$$\sigma^2(A) := \sum_{\mathbf{y}} (A(\mathbf{y}) - \langle A \rangle)^2 P(\mathbf{y}) = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (16)$$

von großem Interesse, da Fehlerschätzung: $\sigma(A)/\sqrt{(M-1)}$ von $\langle A \rangle$.

Varianz von AP/Q bei Sampling gemäß $Q(\cdot)$:

$$\begin{aligned} \sigma_Q^2(AP/Q) &:= \sum_{\mathbf{y}} \left(\frac{A(\mathbf{y})P(\mathbf{y})}{Q(\mathbf{y})} - \left\langle \frac{AP}{Q} \right\rangle_Q \right)^2 Q(\mathbf{y}) \\ &= \sum_{\mathbf{y}} \left(\frac{A(\mathbf{y})P(\mathbf{y})}{Q(\mathbf{y})} - \langle A \rangle \right)^2 Q(\mathbf{y}). \end{aligned} \quad (17)$$

Annahme: $\langle A \rangle$ sei bekannt. Dann wähle:

$$Q(\mathbf{x}) = \frac{A(\mathbf{x})P(\mathbf{x})}{\langle A \rangle}. \quad (18)$$

Einsetzen in Gl. (17): $\sigma_Q^2(AP/Q) = 0$, Messung ist also beliebig genau. Kein Wunder, denn man misst ja immer $AP/Q = \langle A \rangle$.

Gl. (18) bedeutet im Allgemeinen, wenn $\langle A \rangle$ nicht bekannt ist:

Sample dort, wo der Messwert groß ist.

Probleme gibt es, wenn es verschiedene nicht zusammenhängende Bereich gibt, wo der Messwert groß ist. Dann muss man durch die Regionen hindurch, wo A klein ist.

Für Spingläser: Am geschicktesten das Histogramm der Meßgröße von Interesse flach halten, wie z.B. $P(q)$. ("Umbrella Sampling") [4]

Neuere Variante von biased Sampling: Wang-Landau Algorithmus [5]:

Generiere Konfigurationen mit Energie $E = \mathcal{H}(\mathbf{y})$ gemäß $P(\mathbf{y}) \sim 1/g(\mathcal{H}(\mathbf{y}))$, wobei $g(E)$ die Zustandsdichte ist.

Dazu Übergangsraten:

$$\tilde{W}(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{z}) = \min \left\{ 1, \frac{g(\mathcal{H}(\mathbf{y}))}{g(\mathcal{H}(\mathbf{z}))} \right\}. \quad (19)$$

Simulation im Energiebereich $[E_{\min}, E_{\max}]$

```

algorithm Wang-Landau( $E_{\min}, E_{\max}, \mathcal{H}$ )
begin
  Initialisiere  $g(E) = 1 \ \forall E \in [E_{\min}, E_{\max}]$ ;
  Wähle Anfangskonfig  $\underline{y}$ ;
   $f := \exp(1)$ ; (Skalenfaktor)
  while ( $f > \exp(10^{-8})$ ) do
    begin
       $H(E) = 0 \ \forall E \in [E_{\min}, E_{\max}]$ ; (restet Histogram)
      while (Histogram not “flat”) do
        begin
          Wähle Trial-Konfiguration  $\underline{y}'$ ;
          Akzeptiere  $\underline{y}'$  gemäß Gl. (19);
          Berechne Energie  $E$ ;
           $g(E) := g(E) * f$ ;
           $H(E) = H(E) + 1$ ;
        end
         $f := \sqrt{f}$ ;
      end
    end
  end

```

Hinweis: $g(E)$ wird multiplikativ geupdatet $g(E) := g(E) * f$, weil die Zustandsdichte eine exponentiell wachsende Größe ist (\rightarrow konvergiert schneller als z.B. $g(E) := g(E) + f$;))

Bei großem Energiebereich:

Aufteilung auf mehrere Überlappende Intervalle $[E_1, E_3], [E_2, E_4], \dots [E_{k-2}, E_k]$.

Verwendung der Zustandsdichte:

$Z = \sum_e g(E) \exp(-E/T)$, \rightarrow freie Energie $F = -kT \ln Z \rightarrow$ Erwartungswerte/Fluktuationen aus $\partial F / \partial T$ etc.

Funktioniert gut für ungeordnete Systeme:

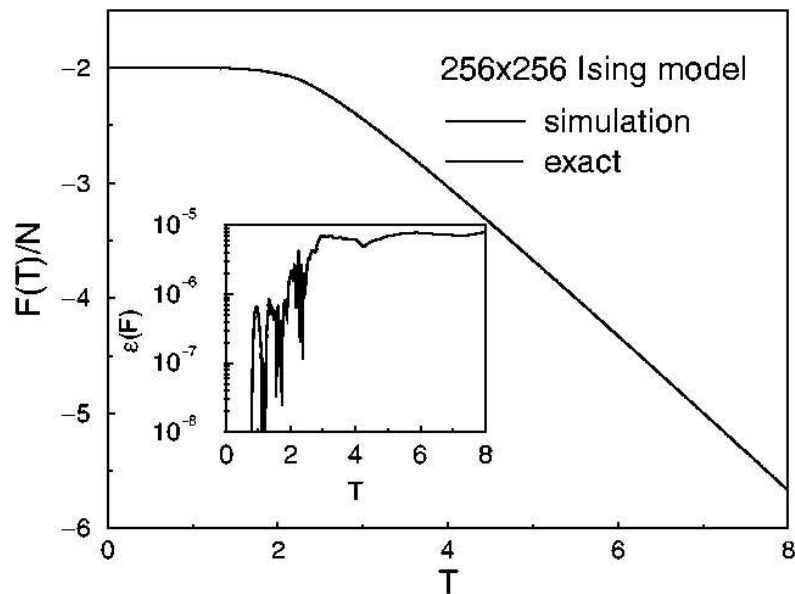


Abbildung 7: Freie Energie des 2d Ferromagneten (Größe $L \times L = 256 \times 256$) und Vergleich mit exaktem Ergebnis. Inset: Relativer Fehler zum exakten Ergebnis.

Für Spingläser: Nicht alles aus $g(E)$ ausrechenbar \rightarrow man braucht mehr Histogramme, z.B. $\tilde{g}(q)$ (wurde aber noch nicht erfolgreich gemacht, unklar ob entropische Barrieren eine große Rolle spielen).

Literatur

- [1] K. Hukushima and K. Nemoto. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 65:1604, 1996.
- [2] H. G. Katzgraber, M. Palassini, and A. P. Young. Monte Carlo simulations of spin glasses at low temperatures. *Phys. Rev. B*, 2001.
- [3] M. N. Rosenbluth and A. W. Rosenbluth. *J. Chem. Phys.*, 23:356, 1955.
- [4] G. M. Torrie and J. P. Valleau. Nonphysical sampling distributions in Monte Carlo free-energy estimation: umbrella sampling. *J. Chem. Phys.*, 23:187, 1977.
- [5] F. Wang and D. P. Landau. Efficient, multi-range random walk algorithm to calculate the density of states. *Phys. Rev. Lett.*, 86:2050, 2001.