Statistische Mechanik ungeordneter Systeme, SoSe 2005

Timo Aspelmeier, Alexander K. Hartmann, Universität Göttingen

29. Juni 2005

Umfrage → TAN Nummern!

10.4 Wang-Landau Algorithmus

Neuere Variante von biased Sampling: Wang-Landau Algorithmus [1]:

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:

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

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
    $H(E) = 0\ \forall E \in [E_{\min}, E_{\max}]$; (reset Histogramm)
    while (Histogramm not "flat") **do**
    begin
      Wähle Trial-Konfiguration $\underline{y}'$;
      Akzeptiere $\underline{y}'$ gemäß Gl. (1);
      Berechne Energie E;
      $g(E) := g(E) * f$;
      $H(E) = H(E) + 1$;
    end
    $f := \sqrt{f}$;
  end
end

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

Bei großem Energiebereich:
Aufteilung auf mehrere Überlappende Intervalle $[E_1, E_3], [E_2, E_4], \ldots [E_{k-2}, E_k]$.

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:

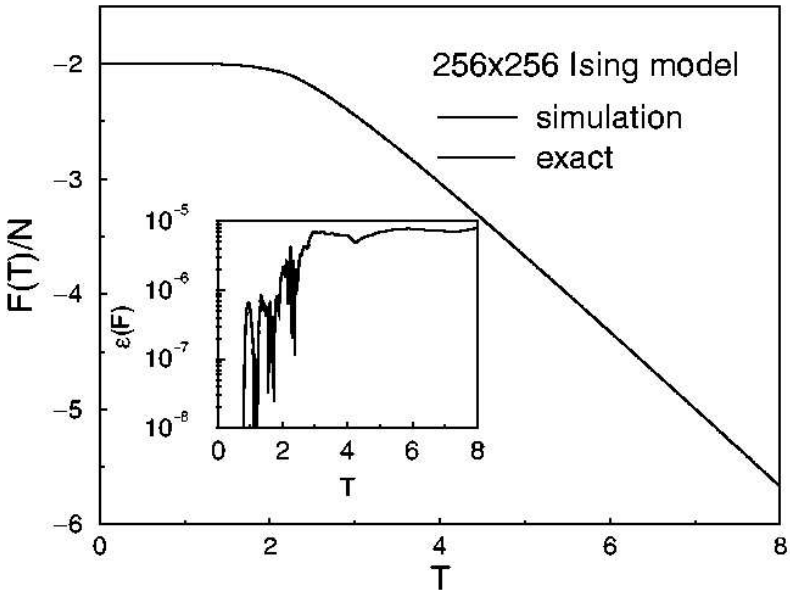


Abbildung 1: Freie Energie des 2d Ferromagneten (Größe $L \times L = 256 \times 256$) und Vergleich mit exaktem Ergebnis. Inset: Relativer Fehler zum exakten Ergebnis.

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).

11 Grundzustände 2-dim Spingläser

11.1 Graphen

- (ungerichteter) Graph: $G = (V, E)$, besteht aus *Knoten* $I \in V$, und Kanten $\{i, j\} \in E \subset V^{(2)}$. *Ungerichtet* heißt: $\{i, j\} = \{j, i\}$. (Anmerkung "gerichtet": $(i, j) \neq (j, i)$.)
- $N \equiv |V|$, $M \equiv |E|$.
- Knoten i, j *benachbart*, falls $\{i, j\} \in E$
- $N(i) = \{j | \{i, j\} \in E\}$ = Menge der Nachbarn von i
- *Grad* $d(i) = |N(i)|$ eines Knotens = Anzahl der benachbarten Knoten.
- *Pfad* von i_0 nach i_l = Folge von Kanten $E' = \{\{i_0, i_1\}, \{i_1, i_2\}, \ldots, \{i_{l-1}, i_l\}\}$. Achtung: alle Knoten $i_1, \ldots, i_{l-1}$ werden genau einmal "besucht". l = *Länge* des Pfads.
- *Zyklus* = Pfad mit $i_0 = i_l$.
- *gewichteter* Graph: zusätzlich Funktion $\omega : E \rightarrow \mathbb{R}$ von *Kantengewichten* (analog: Knotengewichte).

Beispiel: Graph

In Abb. 2 ist der Graph $G = (\{1,2,3,4,5,6\}, \{\{1,3), \{3,4\}\ \{4,1\}, \{4,2\}, \{6,1\}\})$ gezeigt. Knoten = Kreise, Kanten = Linien. Es ist $N(1) = \{3,4,6\}$, also Grad $d(1) = 3$, entsprechend $d(2) = 1$. Es gibt z.B. den Pfad $\{6,1\}$, $\{1,4\}$, $\{4,3\}$ von 6 nach 3 (Länge = 3) und den Zyklus $\{1,3\}$, $\{3,4\}$, $\{4,1\}$.

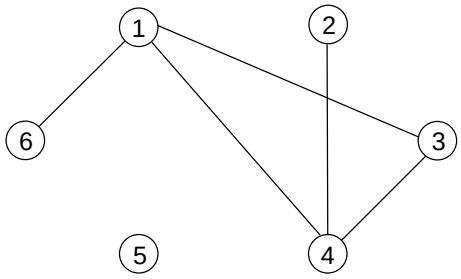


Abbildung 2: Ein ungerichteter Graph.

□

- Für einen Graph $G = (V, E)$ ist ein *Matching* M ist Teilmenge $M \subset E$ so dass im Graph $G_M = (V, M)$ $d(i) \leq 1\, \forall i \in V$
- Ein Matching M ist *perfekt*, wenn $d(i) = 1\, \forall i \in V$ in G_M.
- Für einen gewichteten Graphen: Gewicht des Matchings $\omega(M) \equiv \sum_{\{i,j\} \in M} \omega(\{i,j\})$
- *Minimales perfektes Matching* = Perfektes Matching M, dessen Gewicht $\omega(M)$ ein (absolutes) Minimum annimmt.

Beispiel: Matching

In Fig. 3 ist ein Beispielgraph gezeigt. Kanten im Matching sind fett dargestellt.

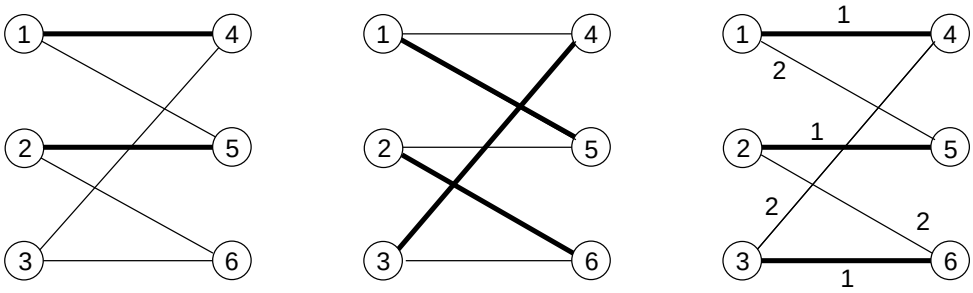


Abbildung 3: Beispiel Graph für Matching.

Im linken Teil ist das Matching $M_1 = \{\{1,4\}, \{2,5\}\}$ gezeigt.

Im mittleren Teil ist ein perfektes Matching $M_2 = \{\{1,5\}, \{2,6\}, \{3,4\}\}$ dargestellt.

Rechts: Graph mit Gewichten. M_2 ist kein minimales perfektes Matching, wohl aber $M_3 = \{\{1,4\}, \{2,5\}, \{3,6\}\}$ □

11.2 Abbildung auf Matching Problem

2d Ising Spinglas, Ising Spins $S_i = \pm 1$

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \tag{2}$$

Wechselwirkung (Bonds)$J_{ij} = \pm 1$ (mit gleicher Wahrscheinlichkeit) zwischen nächsten Nachbarn.

Ziel: Berechnung des Grundzustandes

Defs:

- Falls $S_i S_j = \text{sign}(J_{ij})$: Bond *erfüllt*.
- Zyklus ist *frustriert*, falls die Anzahl der $J_{ij} < 0$ *ungerade* ist.

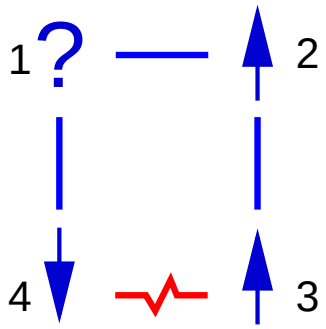


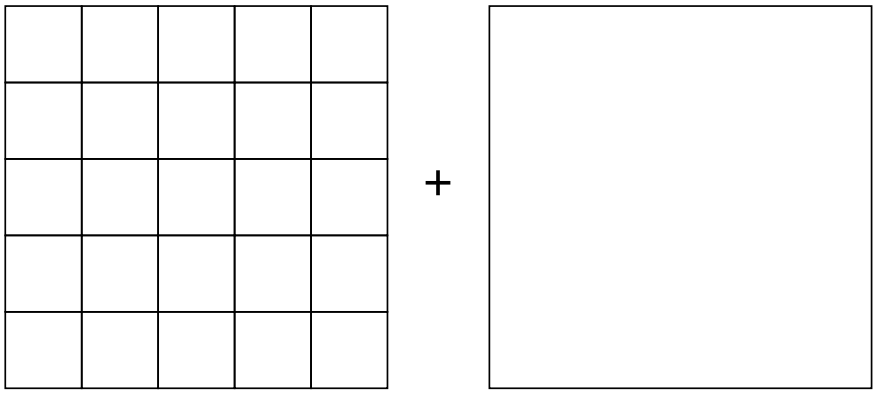
Abbildung 4: Eine frustrierte 4-Bond Zyklus. Egal wie man Spin 1 wählt, immer ist eine Bond nicht erfüllt.

In einem frustrierten Zyklus ist es unmöglich alle Bonds zu erfüllen.

- Plaquetten = Elementarer Zyklen (nicht eindeutig), aus denen sich alle Zyklen durch symmetrische Differenz ($A \Delta B \equiv (A \cup B) \setminus (A \cap B)$) darstellen lassen

Hier benötigt [2]: System P von Plaquetten , so dass jede Bond zu genau 2 Plaquetten gehört (X). (geht für planare Graphen)

Beispiel: 2d SG mit offenen Randbedingungen $\rightarrow$ P = alle 4 Bond Quadrate + Rand des Systems



Anmerkung: Für periodische Randbedingungen (System auf Torus) gibt es kein System P, dass (X) erfüllt:

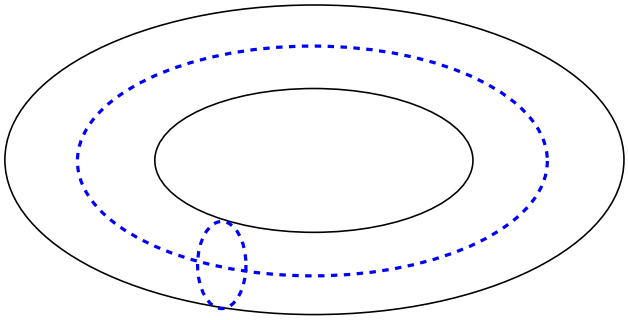


Abbildung 5: Neben den 4-Bond Plaquetten braucht man noch die beiden gestrichelt dargestellten Zyklen in P, um alle Zyklen als symmetrische Differenzen darstellen zu können.

Beispielsystem, alle Spins "hoch". Male "Strings" $\mathcal{L}_s$ senkrecht zu *nicht erfüllten* Kanten. (formal: Strings = Pfade im dualen Graphen)

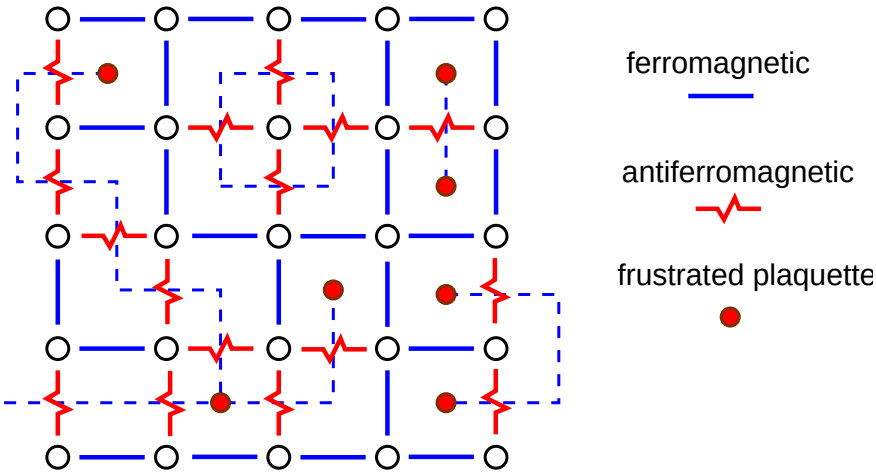


Abbildung 6: Spinglas, alle Spins sind "hoch" ($S_i = 1$). Die "Strings" laufen durch die nicht-erfüllten Bonds.

Beobachtung 1 [2]: Strings sind geschlossen oder beginnen/enden an frustrierten Plaquetten.
Beobachtung 2: Das gilt weiterhin, auch wenn man Spins flippt, d.h. *jede* Spinkonfiguration als Menge von Strings darstellbar (pro Kante läuft maximal ein String):

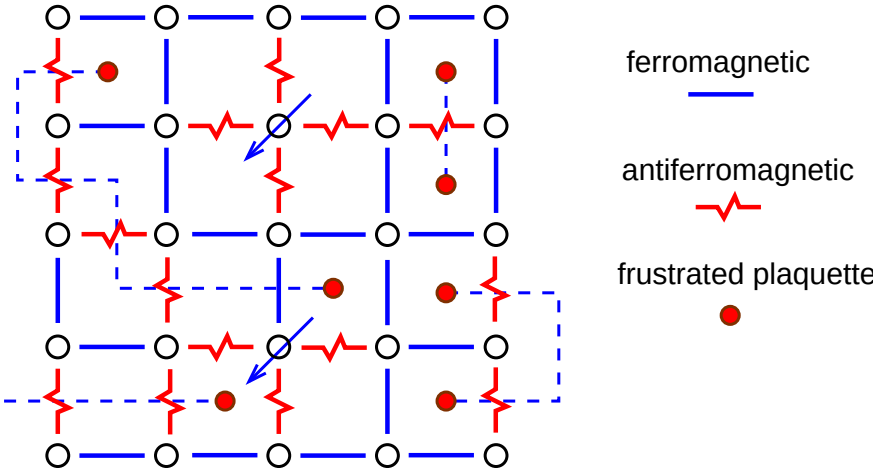


Abbildung 7: Spinglas, fast alle Spins sind "hoch" ($S_i = 1$), zwei Spins sind "runter" ($S_i = -1$). Die "Strings" laufen durch die nicht-erfüllten Bonds.

Menge $J_f \subset E$ enthalte alle nicht erfüllte Kanten (anhängig von den $\{S_i\}$). Dann gilt

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} |J_{ij}| + 2 \sum_{\langle i,j \rangle \in J_f} |J_{ij}| \tag{3}$$

Def: Sei für String $\mathcal{L}_s$ das *Gewicht*:

$$w(\mathcal{L}_s) = \sum_{\{i,j\} \text{ kreuzt } \mathcal{L}_s} |J_{ij}| \tag{4}$$

Damit

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} |J_{ij}| + 2 \sum_{\mathcal{L}_s} w(\mathcal{L}_s) \tag{5}$$

Grundzustand: Minimum $H \rightarrow$ Minimum von $\sum_{\mathcal{L}_s} w(\mathcal{L}_s)$

- $\rightarrow$ Es gibt keine geschlossenen Strings $\mathcal{L}_s$ (flippe alle Spins innerhalb von $\mathcal{L}_s \rightarrow$ Energiereduzierung)
- $\rightarrow$ Betrachte gewichteten Graph $G_F = (F, F \times F)$, F = frustrierte Plaquetten, mit $\omega(\{f_1, f_2\})$ = Gewicht des Strings entlang des kürzesten Pfades von f_1 nach f_2 (im dualen Graph).
- $\rightarrow$ Im Grundzustand bilden die Strings ein *perfektes Matching* von frustrierten Plaquetten mit minimalen Gewicht.

Perfekte minimale Matchings lassen sich in *polynomialer* Zeit (in der Zahl der Spins) mit dem Algorithmus von Edmonds [3, 4] berechnen
$\rightarrow$ große Systeme ($N = 500 \times 500$ Spins) möglich (Hinweis: man lässt üblicherweise alle Kanten $\{f_1, f_2\}$ mit $\omega(\{f_1, f_2\}) > \omega_{\max}$ weg, typ. $\omega_{\max} = 5$)

11.3 Domänenwände und Droplets

Domänenwände und Droplets sind bestimmte Typen von Anregungen:

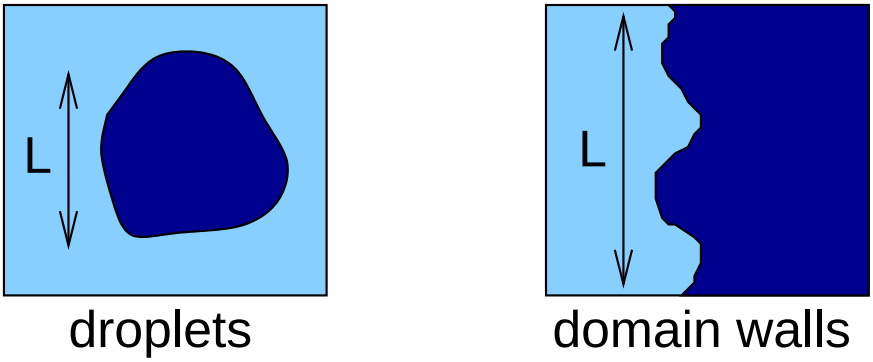


Abbildung 8: Droplets (links) und Domänenwände (rechts).

Erzeugung von Domänenwänden (z.B. freie Randbedingungen, Kopplungen $\{J_{ij}\}$):

1. Berechne Grundzustand $\{S_i^0\}$ von $\{J_{ij}\}$.
2. Füge Bonds zwischen den Spins $l_y = (1, y)$ und $r_y = (L, y)$ links+rechts am Rand für alle $y = 1, \ldots, L$ hinzu mit $J_{l_y r_y} = -J_{\text{huge}} S_{l_y}^0 S_{r_y}^0$ (z.B. $J_{\text{huge}} = 10^8$) $\rightarrow$ Kopplungen $\{J'_{ij}\}$.

   $\rightarrow$ Spins S_{l_y}, $S_{r_y}^0$ werden gezwungen anders als im Grundzustand zu stehen (relativ).
3. Berechne neuen Grundzustand $\{S'_i\}$ von $\{J'_{ij}\}$.

   $\rightarrow$ $\{S_i^0\}$ und $\{S'_i\}$ unterscheiden sich genau um eine Domäne.

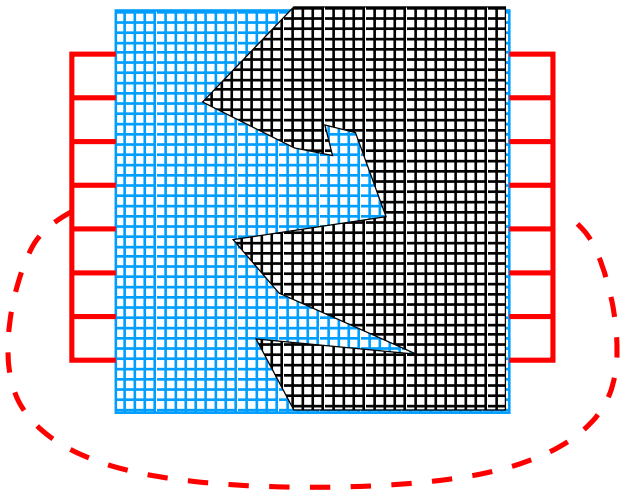


Abbildung 9: Erzeugung von Domänenwänden durch Randbedingungen (x-Richtung), die nicht kompatibel mit dem Grundzustand sind.

Messgröße: Energie der Domänenwand $= \Delta E = H(\{S_i^0\}) - H(\{S'_i\})$ (beide mit $\{J_{ij}\}$ berechnet).

Erwartung: $\Delta E \sim L^\theta$, θ=charakteristischer Exponent.

Ergebnisse: Siehe Aktivator 11.

Droplets: Siehe Aktivator 11.

Literatur

[1] F. Wang and D. P. Landau. Efficient, multi-range random walk algorithm to calculate the density of states. *Phys. Rev. Lett.*, 86:2050, 2001.

[2] I. Bieche, R. Maynard, R. Rammal, and J. P. Uhry. On the ground states of the frustration model of a spin glass by a matching method of graph theory. *J. Phys. A*, 13:2553, 1980.

[3] W. J. Cook, W. H. Cunningham, W.R. Pulleyblank, and A. Schriever. *Combinatorial Optimization.* Wiley, New York, 1998.

[4] A. K. Hartmann and H. Rieger. *Optimization Algorithms in Physics.* Wiley-VCH, Weinheim, 2001.