Statistische Mechanik ungeordneter Systeme, SoSe 2005

Timo Aspelmeier, Alexander K. Hartmann, Universität Göttingen

1. Juni 2005

7 Fortgeschrittene Monte Carlo Verfahren

7.1 Phasenübergang im (ungeordneten) Ferromagneten

Feststellung des Phasenübergangs: Binder Parameter der Magnetisierung (siehe auch Vorl. "Computergestütztes Wissenschaftliche Rechnen").

Dazu Wiederholung:
Mittlere Magnetisierung:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\underline{s}\}} m \exp(-\beta H(\underline{s})) \tag{1}$$

mit $Z = \sum_{\{\underline{s}\}} \exp(-\beta H(\underline{S}))$, $\beta = 1/k_B T$, $N = L^d$ Spins.
Kleines Magnetfeld B: $H_B(\underline{s}) = -\sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \rightarrow$
Für die Suszeptibilität gilt

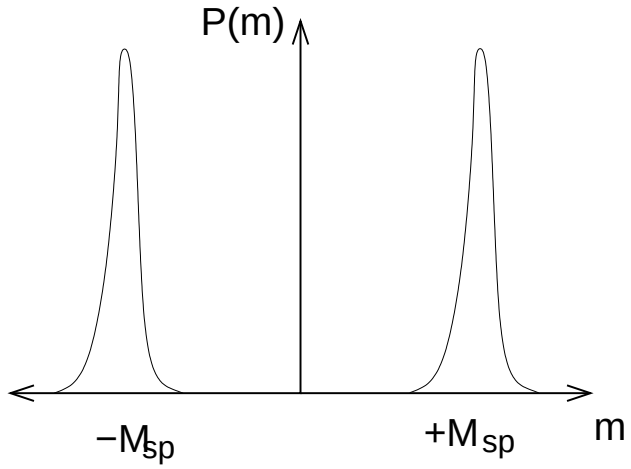
$$\begin{aligned}
\chi &\equiv \left. \frac{\partial \langle m \rangle}{B} \right|_{B=0} \\
&= \left. \frac{\partial}{\partial B} \right|_{B=0} \frac{1}{Z} \sum_{\{\underline{s}\}} m \exp(-\beta H(\underline{s})) \\
&= -\frac{1}{Z^2} \left. \frac{\partial Z}{\partial B} \right|_{B=0} \sum_{\{\underline{s}\}} m \exp(-\beta H(\underline{s})) + \frac{1}{Z} \left. \frac{\partial}{B} \right|_{B=0} \sum_{\{\underline{s}\}} m \exp(-\beta H(\underline{s})) \\
&= -\frac{1}{Z^2} \beta N \left(\sum_{\{\underline{s}\}} m \exp(-\beta H(\underline{s})) \right)^2 + \frac{1}{Z} \beta N \sum_{\{\underline{s}\}} m^2 \exp(-\beta H(\underline{s})) \\
&= \beta N \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right) = \beta N \sigma^2
\end{aligned} \tag{2}$$

Thermodynamisches Verhalten wird durch Korrelationslänge $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$ bestimmt, $\nu > 0$: kritischer Exponent

Annahmen:

1. $T < T_c$ Verteilung der Magnetisierung $m = \frac{1}{N} \sum_i s_i$ (L= Systemgröße) ist 2-fach Gauß (für $L > \xi$):

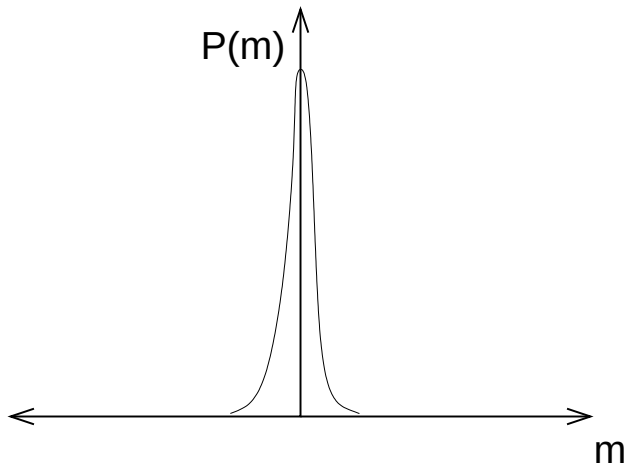
$$\begin{aligned}
P_L(m) &\sim \exp\left[-\frac{(m - M_{sp})^2}{2\sigma_-(T)^2} \right] + \exp\left[-\frac{(m + M_{sp})^2}{2\sigma_-(T)^2} \right] \\
&= \exp\left[-\frac{(m - M_{sp})^2 N}{2 k_B T \chi_-} \right] + \exp\left[-\frac{(m + M_{sp})^2 N}{2 k_B T \chi_-} \right]
\end{aligned} \tag{3}$$



(Kann natürlich nie exakt richtig sein, da $m \in [-1, 1]$ gilt.)
Es gilt $\langle m^2 \rangle \approx M_{sp}^2$, $\langle m^4 \rangle \approx M_{sp}^4$.

2. $T > T_c$ Verteilung der Magnetisierung ist 1-fach Gauß ($L > \xi$):

$$\begin{aligned} P_L(m) &\sim \exp\left[-\frac{m^2}{2\sigma_+(T)^2}\right] \\ &= \exp\left[-\frac{m^2 N}{2k_B T \chi_+}\right] \end{aligned} \tag{4}$$

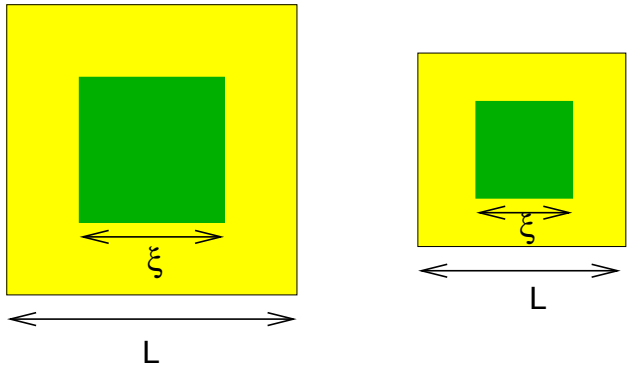


Es gilt $\langle m^2 \rangle = \sigma^2$, $\langle m^4 \rangle = 3\sigma^4$.
[NR mit $\frac{1}{\sqrt{2\pi/z}} \int \exp(-zx^2/2) = 1$ ($z = 1/\sigma^2$) folgt $\langle x^4 \rangle = \frac{4}{\sqrt{2\pi/z}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \int \exp(-zx^2/2)$ $= \frac{4}{\sqrt{2\pi/z}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \sqrt{2\pi/z} = 4z^{0.5} \frac{\partial^2}{\partial z^2} z^{-0.5} = 4z^{0.5} \frac{\partial}{\partial z}(-1/2) z^{-3/2} = 4z^{0.5}(-1/2)(-3/2) z^{-5/2} =$ $3z^{-2} = 3\sigma^4$]

3. Nahe am Phasenübergang ($T < T_c$): Mittlere absolute Magnetisierung per Spin $M \equiv \langle |m| \rangle$ zeigt (Vorlesung 2):

$$M(T) \sim |T - T_c|^\beta \tag{5}$$

Endliche Systeme: Skalenhypothese (siehe Renormierungsgruppe [1, 2]), System hängt vom Verhältnis L/ξ ab.



→ Ansatz::

$$\begin{aligned} M(T,L) &= |T-T_c|^{\beta}\tilde{m}(L/\xi) \\ &= \xi^{-\beta/\nu}\tilde{m}(L/\xi) = \xi^{-y}\tilde{m}(L/\xi) \end{aligned} \tag{6}$$

mit $y \equiv \beta/\nu$.

Begründung: mit $\tilde{m}(x)$ →const für $L \to \infty$ findet sich (5).

Für endliche Systeme, nahe am Phasenübergangspunkt ($T \approx T_c$) ist $L \ll \xi$, also muss ξ herausfallen → $\tilde{m}(x) \sim x^{-y}$ ($x \ll 1$) →

$$M(T \approx T_c, L) = L^{-y} \tag{7}$$

Äquivalenter Ansatz zu (6):

$$M(T,L) = L^{-y}\hat{m}(L/\xi) \tag{8}$$

mit $\hat{m}(x)$ →const für $x \to 0$ und $\hat{m}(x) \sim x^y$ für $x \to \infty$.

Begründung: Für $L \to \infty$ (T =const) bzw. $T \to T_c$ (L =const) finden sich wieder (5) bzw. (7).

Nun: Nicht nur Mittelwert, sonder Verteilung $P_L(m)$.

Idee: es gibt typischen Wert m_{typ}, der wie (8) skaliert → Ansatz:

$$P_L(m) = L^y\tilde{P}(mL^y, L/\xi) \tag{9}$$

wobei $P_L(m)$ symmetrisch in m sei.

Faktor L^y wegen Normierung $\int L^y P(mL^y, L/\xi)\,dm = L^y \int L^{-y}P(x, L/\xi)\,dx = \int P_L(x, L/\xi)\,dx = 1$.

Wenn man M damit ausrechnet erhält man tatsächlich (8):

$$\begin{aligned} M &= 2\int_0^\infty mP_L(m)\,dm \\ &\overset{(9)}{=} 2\int_0^\infty mL^y\tilde{P}(mL^y, L/\xi)\,dm \\ &= 2\int_0^\infty L^{-y}xL^yP(x, L/\xi)\,L^{-y}dx \quad (x = mL^y,\ dx = dmL^y) \\ &= L^{-y}2\int_0^\infty P(x, L/\xi)\,dx \equiv L^{-y}\hat{m}(L/\xi) \end{aligned}$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
\langle m^2 \rangle &= \int m^2 P_L(m)\, dm \\
&= \int m^2 L^y P(mL^y, L/\xi)\, dm \\
&= \int L^{-2y} x^2 L^y L^{-y} P(y, L/\xi)\, dx \quad (x = mL^y) \\
&= L^{-2y} \tilde{\xi}(L/\xi) \qquad (10)
\end{aligned}$$

Analog $\langle m^4 \rangle = L^{-4y} \tilde{\xi}_4(L/\xi)$.

Nun: *Binder Kumulante*:

$$b(L,T) = 0.5 \left(3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right) \qquad (11)$$

Es gilt:

- Aus 1.: $b(T,L) \to 1$ for $T \to 0$ $(T < T_c)$
- Aus 2.: $b(T,L) \to 0$ for $T \to \infty$ $(T > T_c)$
- Aus 3.: $b(T,L) = \tilde{b}(L/\xi) = \hat{b}(L^{1/\nu}(T - T_c))$ nahe an T_c.
  Damit $b(T = T_c, L) = \tilde{b}(0)$ für alle L: Kurven schneiden sich bei T_c.
  Endliche Systeme sind analytisch. Entwicklung um T_c:

$$\begin{aligned}
b(T,L) &= \hat{b}(0) + (T - T_c) \frac{\partial}{\partial T} \hat{b}(L^{1/\nu}(T - T_c)) + O((T - T_c)^2) \\
&= \hat{b}(0) + (T - T_c) \left. \frac{\partial \hat{b}(x)}{\partial x} \right|_{x=0} \frac{\partial}{\partial T} L^{1/\nu}(T - T_c) + O((T - T_c)^2) \\
&= \hat{b}(0) + b^\star L^{1/v}(T - T_c) + O((T - T_c)^2) \quad \left(b^\star = \left. \frac{\partial \hat{b}(x)}{\partial x} \right|_{x=0}\right) \qquad (12)
\end{aligned}$$

  $\to$ Kurven werden steiler an T_c mit steigendem L.

Geordneter Ferromagnet:

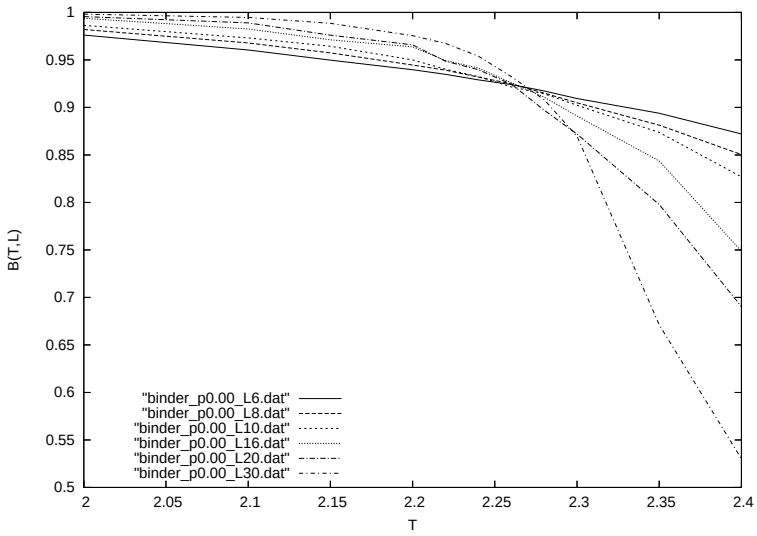


Abbildung 1: Binder-Parameter der Magnetisierung für 2-dimensionalen Ferromagnet $L = 6, 8, 10, 16, 20, 30$ für $T \in [2, 2.4]$.

Kurven schneiden sich am ($L \to \infty$) Phasenübergangspunkt. Hier $T_c = 2.269$ (bekannt aus exakten Rechnungen).

Ungeordneter Ferromagnet:
Eine Realisierung:

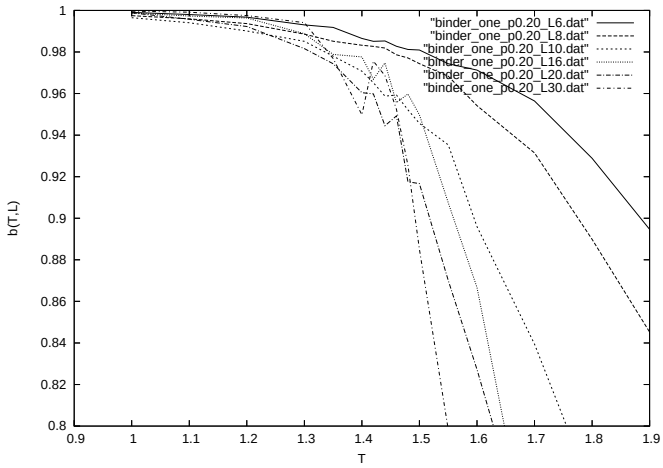


Abbildung 2: Binder-Parameter der Magnetisierung für verdünnte ($p = 0.2$) 2-dimensionale Ferromagnete $L = 6, 8, 10, 16, 20, 30$ (jeweils eine Realisierung der Unordnung) für $T \in [1, 2]$. Aus 9×10^4 MC Sweeps (vorher 10^4 Sweeps Equilibrierung, vom voll magnetisierten Zustand gestartet).

KEIN Schnittpunkt: Grund: Realisierungen sehen für verschiedene Systemgrößen völlig anders aus.

Ausweg: Mittelung über Unordnung, dann $\langle .. \rangle$ $\rightarrow$ kombiniertes Thermisches/Unordnungsmittel. Für 100 Realisierungen ($p = 0.2$):

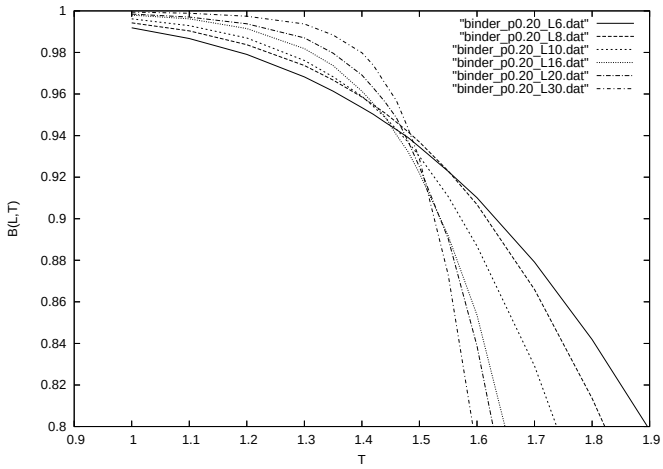


Abbildung 3: Binder-Parameter der Magnetisierung für verdünnte ($p = 0.2$) 2-dimensionale Ferromagnete $L = 6, 8, 10, 16, 20, 30$ gemittelt über 100 Realisierungen für $T \in [1, 2]$. Pro Realisierung 9×10^4 MC Sweeps (vorher 10^4 Sweeps Equilibrierung, vom voll magnetisierten Zustand gestartet).

$\rightarrow$ $T_c \approx 1.5$
Phasendiagramm:

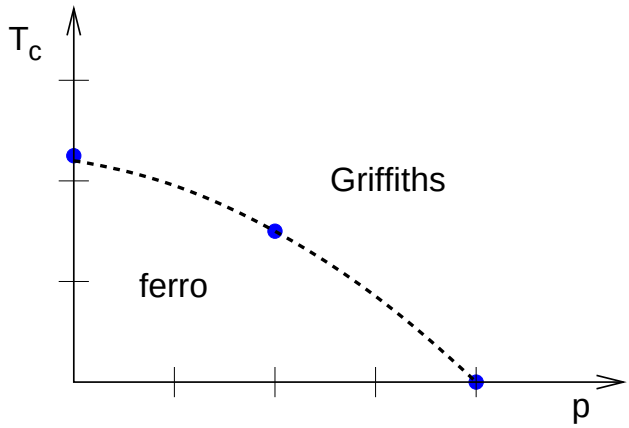


Abbildung 4: Phasendiagramm des verdünnten 2-dim Ferromagneten, soweit jetzt bekannt.

7.2 Cluster Algorithmen

Zur Erinnerung, die Akzeptanzrate für den Metropolis Algorithmus [3] lautet:

$$\tilde{W}(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{z}) = \min\left(1, \frac{P(\mathbf{z})}{P(\mathbf{y})} \frac{A(\mathbf{z} \rightarrow \mathbf{y})}{A(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{z})}\right) , \tag{13}$$

Hier: einfacher (geordneter) Ising Ferromagnet (Vereinfachung auf verdünnte Systeme einfach):

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad J > 0. \tag{14}$$

Grundidee: Mehrere Spins werden in einem Schritt geflipt → schneller, siehe Abb. 5. Hier Wolff Algorithmus [4].

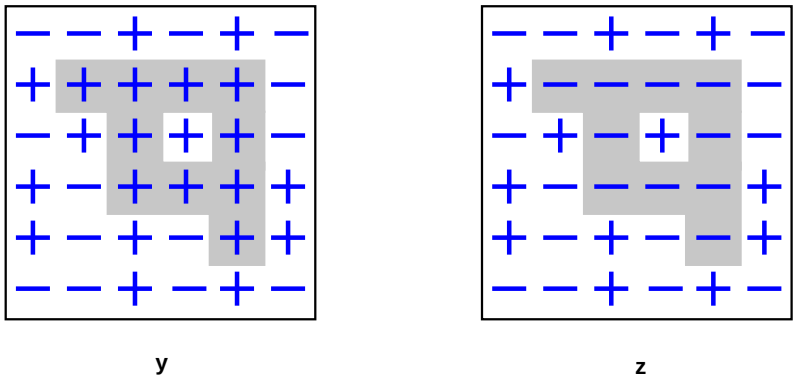


Abbildung 5: Beispiel für den Wolff Cluster Algorithmus. Die dunkle Fläche markiert den Cluster von Spins, der geflipt wird wenn der Algorithmus sich zwischen den Konfigurationen **y** und **z** bewegt.

Cluster C wird konstruiert:
Wähle ersten Spin i_0 zufällig, initialisiere $C = \{i_0\}$.
(alle Spins gleiche Wahrscheinlichkeit $1/N$)
Nachbarspins j des Clusters mit $s_i = s_{i_0}$ werden iterativ mit Wahrscheinlichkeit p hinzugefügt:
$\Leftrightarrow$: Bond $\{i, j\}$ zwischen j und Clusterspins i werden mit Wahrscheinlichkeit p *aktiviert*.
Am Ende: Cluster C = alle Spins die durch aktive Bonds verbunden sind.

Ziel: Bestimmung von p, so dass Algorithmus korrekt und schnell.

Spins $s_i = s_{i_0}$, die k Clusterspins zum Nachbarn haben, haben k "Chancen" auch zum Cluster zu kommen)
→ Wahrscheinlichkeit *nicht* zu Cluster zu gehören: $(1-p)^k$.
Beispiel: Der + Spin innerhalb des Clusters in Fig. 5 hat $k = 4$.

Def. 1: $n_{\text{same}} \equiv |\{i \notin C | s_i = s_{i_0} \text{ und } \exists \text{ Nachbar } j \in C\}|$ = Anzahl der erfüllten Bindungen an der Clustergrenze.
Bsp. in Abb. 5: der Cluster der + Spins in Konfiguration **y** hat $n_{\text{same}} = 13$.

Def. 2: $n_{\text{diff}} \equiv |\{i \notin C | s_i =\neq s_{i_0} \text{ und } \exists \text{ Nachbar } j \in C\}|$ = Anzahl der nicht-erfüllten Bindungen an der Clustergrenze.
($n_{\text{diff}} = 7$ in **y** in Abb. 5).

Die Gesamtmenge der n_{same} nicht aktiven Bindungen wurde mit Wahrscheinlichkeit $(1-p)^{n_{\text{same}}}$ nicht aktiv. → Ansatz

$$A(\mathbf{y} \to \mathbf{z}) = A_{\text{interior}} \times (1-p)^{n_{\text{same}}} \tag{15}$$

mit A_{interior} = Wahrscheinlichkeit für die Hinzufügung der Clusterspins (Summe über *alle* Möglichkeiten den Cluster zu konstruieren wird aber nicht genauer benötigt!).
Beobachtung: n_{diff} taucht nicht in $A(\mathbf{y} \to \mathbf{z})$ auf.

Für umgekehrten Schritt $\mathbf{z} \to \mathbf{y}$: die nicht-aktivierten/ nicht-erfüllten Bindungen tauschen Ihre Rolle →

$$A(\mathbf{z} \to \mathbf{y}) = A_{\text{interior}} \times (1-p)^{n_{\text{diff}}}\,, \tag{16}$$

wobei A_{interior} genauso wie oben, (relative Orientierung der Cluster Spins unverändert !!).

Zur Auswertung von Gl. (13): Energie-Berechnung der Konfigurationen $\mathbf{y}$ und $\mathbf{z}$.
Drei Beiträge:

- E_{interior} zwischen Cluster Spins
- E_{exterior} zwischen Spins nicht in C
- über den Rand de Clusters hinweg

Hinweis: E_{interior} und E_{exterior} ändern sich bei Cluster Flip nicht.
Damit:

$$\mathcal{H}(\mathbf{y}) = E_{\text{interior}} + E_{\text{exterior}} - n_{\text{same}}J + n_{\text{diff}}J \tag{17}$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{z}) = E_{\text{interior}} + E_{\text{exterior}} + n_{\text{same}}J - n_{\text{diff}}J \tag{18}$$

Einsetzen von Gl'en (15), (16), (17), und (18) in Gl. (13) ergibt (E_{interior}, E_{exterior} und A_{interior} fallen heraus):

$$\begin{aligned}\tilde{W}(\mathbf{y} \to \mathbf{z}) &= \min\left\{1, \frac{e^{n_{\text{diff}}J/T}e^{-n_{\text{same}}J/T}}{e^{-n_{\text{diff}}J/T}e^{n_{\text{same}}J/T}}\frac{(1-p)^{n_{\text{diff}}}}{(1-p)^{n_{\text{same}}}}\right\} \\ &= \min\left\{1, \left[\frac{e^{-2J/T}}{1-p}\right]^{n_{\text{same}}}\left[\frac{1-p}{e^{-2J/T}}\right]^{n_{\text{diff}}}\right\}\end{aligned} \tag{19}$$

Für $p = 1 - e^{-2/T}$ erhalten wir $\tilde{W}(y \to z) = 1$, d.h. *alle Cluster Flips werden akzeptiert!* → sehr effizient am Phasenübergang.
Für $T \to \infty$, gilt $p \to 0$, d.h. Cluster werden kleiner → Single-Spin-Flip Dynamik
Für $T \to 0$, gilt $p \to 1$, d.h. Cluster werden sehr groß → effektive Single-Spin-Flip Dynamik
Andere Anwendungen von Cluster Algorithmen: Gitter Quanten Systeme [5], Gase von harten Teilchen [6, 7].
Hinweis: Geht im Prinzip auch für Spingläser ist dann aber *nicht* schneller [8, 9]! Ausweg: Parallel Tempering.

Literatur

[1] J. Cardy. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics.* Cambridge University Press, Cambridge, 1996.

[2] N. Goldenfeld. *Lectures on phase transitions and the renormalization group.* Addison-Wesley, Reading (MA), 1992.

[3] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21:1087, 1953.

[4] U. Wolff. Collective monte carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62:361, 1989.

[5] H. G. Evertz. The loop algorithm. *Adv. Phys.*, 51:1, 2003.

[6] C. Dress and W. Krauth. Cluster algorithm for hard spheres and related systems. *J. Phys. A*, 28:L596, 1995.

[7] W. Krauth. Cluster monte carlo algorithms. In A. K. Hartmann and H. Rieger, editors, *New Optimization Algorithms in Physics*, page 7. Whiley-VCH, Weinheim, 2004.

[8] D.A. Kessler and M. Bretz. Unbridled growth of spin-glass clusters. *Phys. Rev. B*, 41:4778, 1990.

[9] S. Liang. Application of cluster algorithms to spin glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2145, 1992.