

Ising-Modell mit Monte Carlo Methode

Bachelorarbeit

der
Philosophisch-naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Bern

vorgelegt von

Bänz Bessire

2007

Leiter der Arbeit

Prof. Uwe-Jens Wiese

Institut für Theoretische Physik, Universität Bern

Zusammenfassung

Motiviert durch eine allgemeine Betrachtung des Phänomens der Phasenübergänge, wird in dieser Arbeit das Ising-Modell sowie die Monte Carlo Methode theoretisch eingeführt. Der praktische Teil dieser Arbeit umfasst die Simulation des diskutierten Modells in einer und zwei Dimensionen mit dem Metropolis Algorithmus und zusätzlich für $d = 2$ mit dem Swendsen-Wang Cluster Algorithmus. Neben der Diskussion erzielter Resultate wird insbesondere aufgezeigt, dass im Fall $d = 2$ das Ising-Modell einen Phasenübergang aufweist. Dabei werden die beiden verwendeten Algorithmen in ihrer Effizienz im Bereich unterhalb der kritischen-Temperatur verglichen.

Für Eva

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation: Phasenübergänge und kritische Phänomene	1
2	Theoretische Grundlagen	3
2.1	Das Ising-Modell	3
2.1.1	Definition und Eigenschaften	3
2.1.2	Kritische Exponenten und Universalität	6
2.1.3	Analytische Resultate $d = 1$	6
2.1.4	Analytische Resultate $d = 2$	7
2.2	Die Monte Carlo Methode	7
2.2.1	Importance Sampling	7
2.2.2	Markov Prozess und Markov Kette	8
2.2.3	Ergodizität und Detailed Balance	9
2.3	Der Metropolis Algorithmus	11
2.4	Der Swendsen-Wang Cluster Algorithmus	12
2.5	Die Fehleranalyse	15
2.6	Der Phasenübergang im Ising-Modell	18
3	Implementierung	21
3.1	Verwendete Hardware und Simulationsdauer	21
3.2	Zufallszahlengenerator	21
3.3	Nächste Nachbarn und periodische Randbedingungen	22
3.4	Der Metropolis Algorithmus	22
3.5	Der Swendsen-Wang Cluster Algorithmus	24
3.6	Die Fehleranalyse	24
4	Diskussion der Messresultate	27
4.1	Der Gleichgewichtszustand	27
4.2	Messresultate $d = 1$ mit Metropolis Algorithmus	28
4.3	Messresultate $d = 2$ mit Metropolis Algorithmus	32
4.4	Messresultate $d = 2$ mit Swendsen-Wang Cluster Algorithmus	38
	Danksagung	42
	A Messresultate	45
	Literaturverzeichnis	49

Kapitel 1

Motivation: Phasenübergänge und kritische Phänomene

Dem Phänomen des Phasenüberganges begegnen wir in vielen Bereichen unseres alltäglichen Lebens. Allgemein versteht man unter einem Phasenübergang eine qualitative Zustandsänderung eines Materials bei entsprechender Variation der Aussenbedingungen (Temperatur, Magnetfeld, Druck, ...). Dabei sind die augenfälligsten Phasenübergänge diejenigen, zwischen den Aggregatzuständen gasförmig, flüssig und fest. Darüber hinaus gibt es jedoch noch zahlreiche weitere Phasenübergänge. Als Beispiel sei hier der Übergang Diamant-Graphit erwähnt, welcher bei einer Temperatur von 4500 K und einem Druck von 10 GPa auftreten kann.¹ Die drei erwähnten Phasen gasförmig, flüssig und fest können in einem sogenannten Phasendiagramm dargestellt werden (Abbildung 1.1).

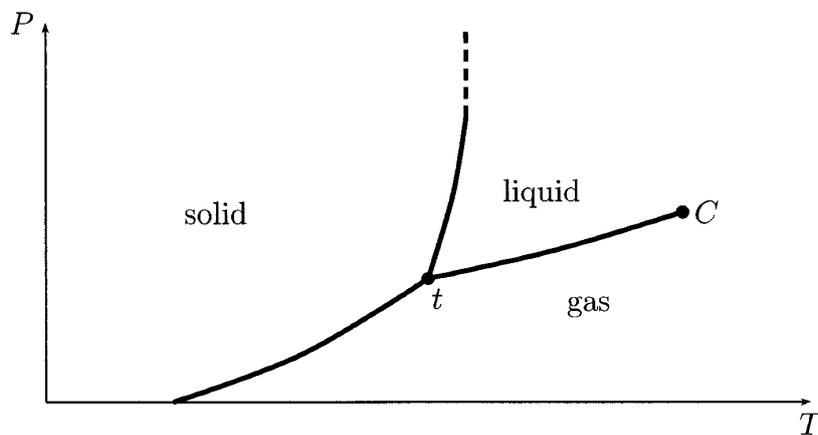


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der drei Phasen fest-flüssig-gasförmig. T : Temperatur, P : Druck, (t): Tripelpunkt, (C): kritischer Punkt.[3]

Beim Tripelpunkt (t) können die drei Phasen im Gleichgewicht bei einem definierten Wert für die Temperatur und den Druck koexistieren. Der im Zusammenhang mit dieser Arbeit besonders wichtige Punkt im Phasendiagramm ist der sogenannte kritische Punkt (C) mit Temperatur T_c und Druck P_c . Allgemein gilt im Phasendiagramm, dass diskrete Übergänge zwischen

¹F.P. Bundy: *Pressure-temperature phase diagram of elemental carbon*, Physica A 156, 169-178, 1989.

zwei Phasen durch Linien getrennt sind. Bei einem bestimmten Druck P ($P_t < P < P_c$) und der Temperatur T ($T_t < T < T_c$), findet deshalb ein diskreter Übergang zwischen den Phasen flüssig und gasförmig statt. Die beiden Phasen weisen eine unterschiedliche, charakteristische Dichte auf. Erhöht man den Druck P und die Temperatur T in Richtung (C) , so verschwinden diese unterschiedlichen Merkmale, bis im kritischen Punkt die Unterscheidung zwischen gasförmig und flüssig nicht mehr länger definiert ist. Ein kontinuierlicher Phasenübergang findet statt. Ein solches Verhalten lässt sich beispielsweise bei Wasser im Bereich des kritischen Punktes beobachten. In der Nähe von (C) ist das System charakterisiert durch langreichweitige Gebiete gleicher Dichte, welche dadurch entstehen, dass die Teilchen über grosse Regionen miteinander korreliert sind. Man spricht in diesem Fall von einer grossen Korrelationslänge. Die Grösse der Regionen korrelierender Teilchen und somit die Korrelationslänge entspricht der Grösse des mittleren Teilchenabstandes, wenn sich das System nicht in der Nähe des kritischen Punktes befindet. Nähert man sich (C) an, so nimmt die Korrelationslänge stetig zu und divergiert schlussendlich gegen unendlich, wenn der kritische Punkt erreicht ist. Dies trifft natürlich nur bei einem unendlich grossen System zu.

Solcherart kritische Phänomene sind nicht auf den Bereich der beiden Phasen flüssig und gasförmig beschränkt. Vielmehr handelt es sich hier um ein allgemeines Phänomen der statistischen Physik, welches sich als weiteres Beispiel auch in einem Magneten manifestiert. Es ist allgemein bekannt, dass ein Stück Eisen magnetisiert wird, wenn es sich in einem externen Magnetfeld befindet. Wird dieses entfernt, so bleibt ein Anteil der Magnetisierung im Magneten erhalten. Dieser Effekt tritt jedoch nur unterhalb einer bestimmten Temperatur, der sogenannten Curie Temperatur, auf. Für Temperaturen überhalb der Curie Temperatur verschwindet mit der Deaktivierung des externen Magnetfeldes auch die induzierte Magnetisierung. In einem Ferromagneten kann sich unterhalb dieser spezifischen Temperatur jedoch auch eine spontane Magnetisierung ohne äusseres \vec{B} -Feld einstellen. Das bekannteste Beispiel für einen Ferromagneten ist Eisen. Bei Temperaturen unterhalb T_{Curie} und $\vec{B} = 0$ stellt sich in endlichen Bereichen, den Weiss'schen Bezirken, eine spontane Magnetisierung ein. Die über mehrere solcher Bezirke gemittelte Magnetisierung ist aber gleichwohl null, und das Eisen erscheint trotz $T < T_{Curie}$ unmagnetisiert. Bemerkenswert ist nun, dass ein Ferromagnet in der Nähe der Curie Temperatur, oder allgemein der kritischen Temperatur T_c , ein analoges Verhalten aufweist, wie das diskutierte flüssig-gasförmig System. Verallgemeinert gilt, dass Systeme im Bereich ihrer jeweiligen kritischen Temperatur universelles Verhalten aufweisen und sich zu sogenannten Universalitätsklassen zusammenfassen lassen (siehe dazu Kapitel 2.1.2). Es hat sich gezeigt, dass sich das Ising-Modell im Bereich T_c im Wesentlichen gleich verhält, wie ein idealisierter Ferromagnet mit reduzierter Spinrotationssymmetrie, eine binäre Flüssigkeit oder Wasser am kritischen Punkt und somit in die gleiche Universalitätsklasse gehört. Ein vergleichsweise einfaches Modell vermag also kritisches Verhalten viel komplexerer System zu beschreiben. Dies ist motivierend genug, das Ising-Modell im Detail zu betrachten.²

²Die Ausführungen in diesem Kapitel basieren auf [3, 9].

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

2.1 Das Ising-Modell

Die nachfolgenden Ausführungen basieren auf [1, 2, 4, 5, 9].

2.1.1 Definition und Eigenschaften

Das Ising-Modell basiert auf einem d -dimensionalen räumlichen Gitter, welches im Allgemeinen eine beliebige Geometrie aufweisen darf. Den folgenden Ausführungen, wie auch der praktischen Realisierung des hier diskutierten Modells, liegt ein einfach-kubisches Gitter zugrunde, welches aus L^d periodisch angeordneten Gitterplätzen besteht. Dabei bezeichnet L die Länge einer Seite des Gitters. An jedem dieser Gitterplätze ist eine klassische, skalare Spinvariable s_x lokalisiert, welche im Ising-Modell ausschliesslich die Werte ± 1 annehmen kann. Entsprechend seinem Wert kann ein solcher Spin nur nach oben oder nach unten gerichtet sein und besitzt somit genau zwei Freiheitsgrade.¹ Jeder Spin ist umgeben von $q = 2d$ nächsten Nachbarn, welche entsprechend der periodischen Randbedingungen des Gitters definiert sind. Dies wird in Abbildung 2.1 illustriert.

Ein komplettes System von Spins mit einer gegebenen Ausrichtung derselben sei im folgenden als Spinkonfiguration oder allgemein als Konfiguration $[s]$ bezeichnet. Es ist offensichtlich, dass für ein Gitter mit gegebenen Werten für L und d im gesamten 2^{L^d} mögliche Spinkonfigurationen existieren. Die Energie einer Konfiguration $[s]$ ist bestimmt durch die folgende klassische Hamilton-Funktion, deren erste Summe, angegeben durch die Notation $\langle xy \rangle$, über alle nächsten Nachbarn ausgeführt wird

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y - \mu B \sum_x s_x. \quad (2.1)$$

Durch die summierten Produkte $s_x s_y$ berücksichtigt das Ising-Modell die Wechselwirkung benachbarter Spins, deren Stärke durch den Parameter J gegeben ist. Im einfachsten Fall ist J eine Konstante mit der Dimension einer Energie, so dass die Wechselwirkung unabhängig

¹Das Ising-Modell kann auf ein kontinuierliches Spin-Modell verallgemeinert werden, bei welchem die Spins einen kontinuierlichen Wertebereich durchlaufen können. Ein weit verbreiteter Repräsentant dieser Modellklasse ist das klassische Heisenberg-Modell, nach dem an jedem Gitterplatz ein dreidimensionaler Einheitsvektor $\vec{s} = (s^1, s^2, s^3)$ angebracht ist, der beliebig orientiert sein darf (siehe dazu [4]).

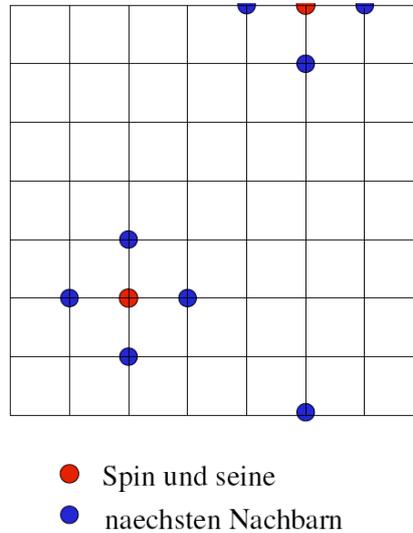


Abbildung 2.1: Illustration der periodischen Randbedingungen: Ein Spin am oberen Rand des Gitters besitzt einen benachbarten Spin am entsprechenden Gitterplatz am unteren Rand. Das gleiche gilt für den linken und den rechten Rand.[5]

der Gitterplätze ist. Die Hamilton-Funktion beinhaltet zusätzlich ein externes Magnetfeld B , an das die Spins gekoppelt werden können. Die Minuszeichen in (2.1) sind Konvention, bestimmen aber die Vorzeichen von J und B . Im ferromagnetischen Fall gilt $J > 0$, was eine vorzugweise parallele Ausrichtung benachbarter Spins zur Folge hat. Eine Aktivierung des Magnetfeldes führt weiter dazu, dass die Spins es vorziehen, in die Richtung des eingeschalteten Feldes zu zeigen. Das bedeutet: Für $B > 0$ richten sich die Spins vorzugweise nach oben und entsprechend für $B < 0$ nach unten aus.

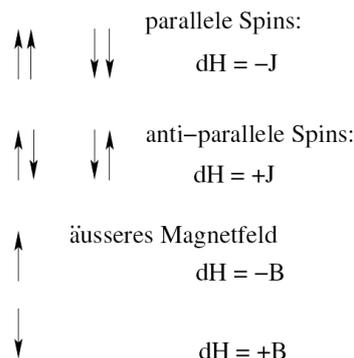


Abbildung 2.2: Wechselwirkung benachbarter Spins für $J > 0$ und $B > 0$. [5]

In der hier diskutierten praktischen Realisierung des Ising-Modells gilt $J = 1$ und $B = 0$. Das deaktivierte Magnetfeld führt dazu, dass (2.1) symmetrisch ist unter der Transformation $s_x \rightarrow -s_x \forall x$.

Das Ising-Modell kann als physikalisches System in einem Wärmebad mit gegebener Tempe-

ratur T betrachtet werden. Befindet sich ein solches System im Gleichgewichtszustand (siehe dazu Kapitel 4.1), so ist $p[s]$ die Wahrscheinlichkeit, dass es sich in der Konfiguration $[s]$ befindet. Diese ist gegeben durch die Boltzmannsche Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p[s] = \frac{1}{Z} \exp(-\beta\mathcal{H}[s]) \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (2.2)$$

Die klassische Zustandssumme lautet

$$Z = \sum_{[s]} \exp(-\beta\mathcal{H}[s]) = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_{L^d}=\pm 1} \exp(-\beta\mathcal{H}[s]) = \prod_x \sum_{s_x=\pm 1} \exp(-\beta\mathcal{H}[s]). \quad (2.3)$$

Dabei entspricht die Summe über alle möglichen Spinkonfigurationen in (2.3) dem Produkt der Summen der möglichen Richtungen aller individuellen Spins. Dieses Produkt beinhaltet somit L^d Faktoren, wobei L^d das Volumen oder gleichbedeutend die Anzahl Gitterplätze des betrachteten Gitters ist. Die totale Magnetisierung einer Konfiguration $[s]$ ergibt sich durch Summation über alle Werte der Spinvariablen s_x einer Konfiguration $[s]$

$$\mathcal{M}[s] = \sum_x s_x \quad (2.4)$$

mit dem entsprechenden thermischen Erwartungswert

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \sum_{[s]} p[s] \mathcal{M}[s] = \frac{1}{Z} \sum_{[s]} \mathcal{M}[s] \exp(-\beta\mathcal{H}[s]) = \frac{\partial \log Z}{\partial (\beta\mu B)}. \quad (2.5)$$

Die magnetische Suszeptibilität ist durch die Beziehung

$$\chi = \frac{1}{L^d} (\langle \mathcal{M}^2 \rangle - \langle \mathcal{M} \rangle^2) = \frac{1}{L^d} \frac{\partial^2 \log Z}{\partial (\beta\mu B)^2} \quad (2.6)$$

definiert. Die Spin-Korrelationsfunktion ist analog zu (2.5) gegeben durch

$$\langle s_x s_y \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{[s]} s_x s_y \exp(-\beta\mathcal{H}[s]). \quad (2.7)$$

Die für grosse Distanzen exponentiell abfallende zusammenhängende Spin-Korrelationsfunktion lautet

$$\langle s_x s_y \rangle_c = \langle s_x s_y \rangle - \langle s_x \rangle \langle s_y \rangle \sim \exp(-|x - y|/\xi) \quad (2.8)$$

wobei ξ die Korrelationslänge bezeichnet. Die Suszeptibilität kann ausgedrückt werden, indem (2.8) über alle Gitterpunkte x, y summiert wird:

$$\chi = \frac{1}{L^d} \sum_{x,y} \langle s_x s_y \rangle_c. \quad (2.9)$$

2.1.2 Kritische Exponenten und Universalität

Die Spins eines Ising-Modells im Gleichgewichtszustand formen sich zusammen zu Bezirken mit einer charakteristischen Grösse ξ , der Korrelationslänge, deren Wert für eine allgemeine Temperatur T einige Gitterabstände beträgt. Dies führt dazu, dass das Ising-Modell im Beschrieb realer Materialien in gewissen Temperaturbereichen eine zu grosse Vereinfachung darstellt, da diese in ihren physikalischen Wechselwirkungen innerhalb sehr kurzer Abstände (atomare Distanzeinheiten) durch das hier diskutierte Modell nicht vollständig erfasst werden. Es existiert jedoch eine kritische Temperatur T_c , bei welcher die Korrelationslänge divergiert

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}. \quad (2.10)$$

ξ erstreckt sich nun im Limes über das gesamte Volumen des entsprechenden Gitters. Somit werden kurzreichweitige physikalische Effekte irrelevant, und das Ising-Modell weist im Bereich der kritischen Temperatur T_c universelle Eigenschaften auf. Einhergehend mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung (siehe dazu Kapitel 2.6), der allerdings nur für $d > 1$ in Erscheinung tritt. Ein reales Material zeigt nun bei der ihm charakteristischen kritischen Temperatur T_c das gleiche Verhalten wie das vergleichsweise einfache Ising-Modell. Bei diesem handelt es sich um einen Repräsentanten einer grossen Universalitätsklasse von unterschiedlichen Modellen, die sich alle durch ein identisches Verhalten im Bereich der kritischen Temperatur auszeichnen. Eine solche Universalitätsklasse definiert sich dadurch, dass ihre Mitglieder dieselben kritischen Exponenten besitzen, welche jeweils den Verlauf einer bestimmten Grösse im Bereich von T_c determinieren. So nimmt der kritische Exponent ν in (2.10) für alle Vertreter einer Universalitätsklasse den gleichen Wert an. Dies gilt ebenso für die kritischen Exponenten β und γ , welche den Verlauf des Erwartungswertes der Magnetisierung

$$\langle \mathcal{M} \rangle \propto |T - T_c|^\beta, \quad T \leq T_c \quad (2.11)$$

sowie der magnetischen Suszeptibilität

$$\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma} \quad (2.12)$$

bestimmen. Der Wert eines jeden dieser Exponenten, weist nach [4] eine Abhängigkeit von der räumlichen Dimension des simulierten Gitters auf.

2.1.3 Analytische Resultate $d = 1$

Wie entsprechend in [1] gezeigt wird, lässt sich das Ising-Modell für $d = 1$ leicht analytisch lösen. In diesem Abschnitt werden deshalb ausschliesslich die wichtigsten Ergebnisse aufgeführt.

Die Zustandssumme für eine endliche Länge L des Gitters im 1-dimensionalen Fall ist gegeben durch

$$Z = \{[2 \cosh(\beta J)]^L + [2 \sinh(\beta J)]^L\}. \quad (2.13)$$

Die magnetische Suszeptibilität ergibt sich zu

$$\chi = \frac{1 - \tanh^L(\beta J)}{1 + \tanh^L(\beta J)} \exp(2\beta J). \quad (2.14)$$

Das 1-d analytische Resultat der Spin-Korrelationsfunktion lautet

$$\langle s_x s_y \rangle = \frac{1}{Z} \{ [2 \cosh(\beta J)]^{L-n} [2 \sinh(\beta J)]^n + [2 \sinh(\beta J)]^{L-n} [2 \cosh(\beta J)]^n \}, \quad (2.15)$$

wobei $n = |x - y|$ der Abstand zwischen den Gitterpunkten x und y ist.

2.1.4 Analytische Resultate $d = 2$

Onsager zeigte 1944 in [6], wie sich das 2-dimensionale Ising-Modell analytisch lösen lässt, wenn auch auf nicht triviale Art und Weise. Unter Berücksichtigung der Selbst-Dualität des Ising-Modells lässt sich eine Gleichung für die kritische Temperatur T_c ableiten, bei der im 2-d Fall erstmals ein Phasenübergang 2. Ordnung auftritt (siehe dazu Kapitel 2.6). Nach [1] gilt

$$\tanh(\beta_c J) = \exp(-2\beta_c J). \quad (2.16)$$

Die Lösung dieser Gleichung und somit die kritische Temperatur T_c ist in [4] gegeben durch

$$T_c = \frac{2J}{\log(1 + \sqrt{2})} \simeq 2.269J \quad , \quad T_c = \frac{1}{k_B \beta_c}. \quad (2.17)$$

2.2 Die Monte Carlo Methode

Die nachfolgenden Ausführungen basieren auf [1, 2, 4].

2.2.1 Importance Sampling

Es sei an dieser Stelle ausdrücklich darauf hingewiesen, dass sich die folgenden mathematischen Beziehungen in diesem Unterkapitel auf die Situation beziehen, in der sich das betrachtete System im thermischen Gleichgewicht mit dem Wärmebad befindet. Das übliche Ziel einer Monte Carlo Simulation ist dann die Bestimmung des Erwartungswertes einer physikalischen Observablen \mathcal{O}

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{[s]} p[s] \mathcal{O}[s] = \frac{1}{Z} \sum_{[s]} \exp(-\beta \mathcal{H}[s]) \mathcal{O}[s] = \frac{\sum_{[s]} \exp(-\beta \mathcal{H}[s]) \mathcal{O}[s]}{\sum_{[s]} \exp(-\beta \mathcal{H}[s])}. \quad (2.18)$$

Für ein sehr kleines Systems lässt sich (2.18) noch analytisch berechnen. Doch bereits bei einem 1-d Gitter mit 100 Spins muss über $2^{100} \approx 10^{30}$ Konfigurationen summiert werden, was eine sinnvolle numerische Behandlung des Problems aufgrund der extrem langen Rechenzeit verunmöglicht. Insbesondere, wenn man bedenkt, dass es in der Praxis durchaus üblich ist, Systeme von der Grösse 100^2 Spins in 2-d zu betrachten. Um diese Problematik zu umgehen, generiert eine Monte Carlo Simulation eine zufällige Untermenge $\{s^{(1)} \dots s^{(N)}\}$ an Spinkonfigurationen, in der jedes Element durch die noch zu spezifizierende Wahrscheinlichkeit $p[s^{(i)}]$ gewichtet ist. Eine entsprechende Abschätzung für (2.18) ist dann gegeben durch

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{\sum_{i=1}^N \exp(-\beta \mathcal{H}[s^{(i)}]) p[s^{(i)}]^{-1} \mathcal{O}[s^{(i)}]}{\sum_{j=1}^N p[s^{(j)}]^{-1} \exp(-\beta \mathcal{H}[s^{(j)}])}. \quad (2.19)$$

Bei (2.19) handelt es sich um einen erwartungstreuen Schätzer mit der Eigenschaft $\langle \bar{\mathcal{O}} \rangle = \langle \mathcal{O} \rangle$ und für $N \rightarrow \infty$ gilt $\bar{\mathcal{O}} = \langle \mathcal{O} \rangle$. In der Praxis durchläuft ein System während eines Messprozesses jedoch nur eine relativ kleine Anzahl unterschiedlicher Spinkonfigurationen, so dass die Summen in (2.18) durch eine entsprechend geringe Menge an Konfigurationen dominiert werden. Dieser Effekt tritt besonders deutlich in Kraft, wenn eine Messung an einem System mit tiefer Temperatur vorgenommen wird. Aufgrund der geringen thermischen Anregungsenergie wird sich ein solches System während des Messaktes vorwiegend in der Konfiguration niedrigster Energie aufhalten. Aus der grossen Anzahl an Möglichkeiten generiert nun das Importance Sampling Verfahren die erwähnte Untermenge bestehend aus den für das System bei gegebener Temperatur charakteristischen N Konfigurationen und ignoriert alle anderen. Bei den so erzeugten Spinkonfigurationen handelt es sich somit um diejenigen, welche die grössten Beiträge zu den Summen in (2.18) liefern. Dies garantiert, dass (2.19) ein guter Schätzer für (2.18) ist und somit gilt $\bar{\mathcal{O}} \approx \langle \mathcal{O} \rangle$. Die in dieser Arbeit verwendeten Algorithmen (siehe die Kapitel 2.3 und 2.4) erzeugen die Untermenge $\{s^{(1)} \dots s^{(N)}\}$ so, dass jeder in ihr enthaltene Zustand $[s^{(i)}]$ mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit

$$p[s^{(i)}] = \frac{1}{Z} \exp(-\beta \mathcal{H}[s^{(i)}]) \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (2.20)$$

vorkommt. Die Boltzmann Wahrscheinlichkeitsverteilung (2.20) eingesetzt in (2.19) führt zu

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}[s^{(i)}] \quad (2.21)$$

und somit zu einem einfachen Ausdruck für den erwartungstreuen Schätzer von (2.18), der sich in dieser Form in der Praxis leicht anwenden lässt. Aufgrund der Tatsache, dass für die Berechnung des Erwartungswertes (2.18) nicht alle Spinkonfigurationen berücksichtigt werden, treten statistische Fehler auf. Deren korrekte Abschätzung ist für eine sinnvolle Interpretation von Monte Carlo Simulationsdaten unerlässlich und wird in Kapitel 2.5 diskutiert.

2.2.2 Markov Prozess und Markov Kette

Das Importance Sampling Verfahren, genauer die Untermenge $\{s^{(1)} \dots s^{(N)}\}$ an Spinkonfigurationen mit den in Kapitel 2.2.1 erwähnten Eigenschaften, wird produziert durch die wiederholte Anwendung eines Markov Prozesses. Befindet sich das betrachtete System in der Konfiguration $[s]$, so generiert ein Markov Prozess zufällig eine neue Konfiguration $[s']$. Dabei ist die Übergangswahrscheinlichkeit von einer gegebenen Konfiguration $[s]$ zu $[s']$ gegeben durch $w[s, s']$. In einem Markov Prozess müssen alle $w[s, s']$ den folgenden zwei Bedingungen genügen:

1. Die Übergangswahrscheinlichkeiten $w[s, s']$ sind zeitunabhängig.
2. Die $w[s, s']$ hängen nur von $[s]$ und $[s']$ und nicht von den übrigen vom System durchlaufenen Spinkonfigurationen ab.

Zudem gelten die Bedingungen

$$0 \leq w[s, s'] \leq 1 \quad , \quad \sum_{s'} w[s, s'] = 1. \quad (2.22)$$

Es existiert eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit $w[s, s]$ und somit die Möglichkeit, dass die neu entstandene Konfiguration identisch der Alten ist. In einer Monte Carlo Simulation wird nun durch wiederholte Anwendung eines entsprechenden Algorithmus eine Sequenz von Spinkonfigurationen

$$[s^{(1)}] \rightarrow [s^{(2)}] \rightarrow \dots \rightarrow [s^{(N)}], \quad (2.23)$$

erzeugt, welche in ihrer Gesamtheit ein Markov Kette bilden. Dabei sind die einzelnen Markov Prozesse, bzw. deren $w[s, s']$, bestimmt durch den verwendeten Algorithmus. Nach einer genügend grossen Anzahl Wiederholungen M desjenigen, sollte nun eine Abfolge von Konfigurationen erzeugt werden, deren Auftreten mit der gewünschten Boltzmann Verteilung erscheint oder äquivalent: Das System befindet sich in seinem Gleichgewicht. Dies geschieht unabhängig von der Anfangskonfiguration $[s^{(1)}]$. Im konkreten Fall des Ising-Modells hat dies die Freiheit zur Folge, $[s^{(1)}]$ so zu wählen, dass die Richtung aller Spins parallel oder zufällig über das ganze Gitter verteilt ist. In der Berechnung des Erwartungswertes nach (2.21) werden nun nur die Spinkonfigurationen mit einbezogen, welche nach Erreichen des Gleichgewichts auftreten. Mathematisch kann dies durch die folgende kleine Modifikation von (2.21) dargestellt werden:

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N - M} \sum_{i=M+1}^N \mathcal{O}[s^{(i)}]. \quad (2.24)$$

Eine weitergehende Interpretation der Markov Kette (2.23) besteht darin, die einzelnen Glieder der Kette als Evolution des Systems in diskreten Zeitschritten zu betrachten. Die hochgestellten Indizes werden unter dieser Perspektive zu den Zeiteinheiten $t = 1, 2, \dots N$.

2.2.3 Ergodizität und Detailed Balance

Ergodizität und Detailed Balance stellen Bedingungen an einen Monte Carlo Algorithmus dar, damit ein System in die gewünschte Gleichgewichtsverteilung konvergiert. Ergodizität verlangt, dass von einer beliebigen Konfiguration $[s]$ jeder Zustand mit einer nicht verschwindenden Wahrscheinlichkeit $w[s, s']$ in einer endlichen Anzahl von Schritten erreicht werden kann. Dies lässt sich nach [2] formal wie folgt darstellen:

$$\exists n \text{ so dass } (w^n)_{s's} > 0 \quad \forall s, s' \quad \text{mit} \quad w_{s's} = w[s, s']. \quad (2.25)$$

Dabei wird hier die sogenannte Markov Matrix w mit den entsprechenden Elementen $w_{s's}$ (man beachte die Reihenfolge der Indizes) eingeführt, welche alle möglichen Übergangswahrscheinlichkeiten $w[s, s']$ enthält. Dass der verwendete Algorithmus ergodisch sein muss, wird bereits dadurch deutlich, dass die Berechnung des exakten Erwartungswertes (2.18) alle Spinkonfigurationen mit einbezieht.

Aus Ergodizität folgt für die Gleichgewichtsverteilung die:

- Existenz
- Eindeutigkeit
- Unabhängigkeit von $[s^{(1)}]$

Ein formaler Beweis für diese Aussage findet sich in [2]. Damit sichergestellt wird, dass nach Erreichen des Gleichgewichts Spinkonfigurationen $[s^{(i)}]$ ($i > M$) entsprechend der Boltzmannschen Wahrscheinlichkeitsverteilung erzeugt werden, ist es hinreichend (aber nicht unbedingt notwendig), wenn der Algorithmus Detailed Balance erfüllt. Diese Bedingung lautet in allgemeiner Form

$$p[s]w[s, s'] = p[s']w[s', s]. \quad (2.26)$$

Die linke Seite der Gleichung besteht aus einer Multiplikation zwischen der Wahrscheinlichkeit $p[s]$, dass sich das System in der Konfiguration $[s]$ befindet und der Wahrscheinlichkeit $w[s, s']$, dass das System in die Konfiguration $[s']$ übergeht. Mit anderen Worten zeigt die linke Seite von (2.26) die Übergangsrate $[s] \rightarrow [s']$ auf. Diese wird gleichgesetzt der Übergangsrate von $[s'] \rightarrow [s]$. Daraus folgt, dass im Durchschnitt die Anzahl der Übergänge $[s, s']$ gleich der Anzahl der Übergänge $[s', s]$ ist.

Wenn durch wiederholte Anwendung eines Monte Carlo Algorithmus das System in die Gleichgewichtsverteilung $p[s]$ konvergieren soll, so muss diese Eigenvektor von $w[s, s']$ mit Eigenwert 1 sein, d.h.

$$\sum_{[s]} p[s]w[s, s'] = p[s']. \quad (2.27)$$

Es gilt nun zu zeigen, dass die erwünschte Boltzmann Verteilung

$$p[s] = \frac{1}{Z} \exp(-\beta\mathcal{H}[s]) \quad (2.28)$$

tatsächlich Eigenvektor von $w[s, s']$ mit Eigenwert 1 ist, wobei (2.26) und (2.28) verwendet werden

$$\begin{aligned} \sum_{[s]} \exp(-\beta\mathcal{H}[s])w[s, s'] &= \sum_{[s]} \exp(-\beta\mathcal{H}[s'])w[s', s] \\ &= \exp(-\beta\mathcal{H}[s', s]) \sum_s w[s', s] \\ &= \exp(-\beta\mathcal{H}[s']). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Nach einer genügend langen Zeit oder gleichbedeutend nach genügend grosser Anzahl Wiederholungen des Algorithmus, werden nun Spinkonfigurationen annähernd (siehe Kapitel 2.5) nach (2.28) erzeugt und der Schätzer einer Observablen \mathcal{O} kann nach

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}[s^{(i)}] \quad (2.30)$$

berechnet werden. In den beiden folgenden Kapiteln werden nun zwei Algorithmen diskutiert, welche den eingangs erwähnten Bedingungen genügen.

2.3 Der Metropolis Algorithmus

Die nachfolgenden Ausführungen basieren auf [2].

Der Metropolis Algorithmus wurde 1953 durch [7] entwickelt und erfüllt sowohl Detailed Balance als auch Ergodizität. Um zu verdeutlichen, dass der hier besprochene Algorithmus in direktem Zusammenhang mit dem Konzept einer Markov Kette steht, sei diese hier noch einmal aufgeführt:

$$[s^{(1)}] \rightarrow [s^{(2)}] \rightarrow \dots \rightarrow [s^{(N)}]. \quad (2.31)$$

Der Algorithmus generiert nun aus einer gegebenen Spinkonfiguration $[s] = [s^{(i)}]$ eine neue Konfiguration $[s'] = [s^{(i+1)}]$ und somit ein neues Glied in (2.31). Dabei wählt er aus $[s]$ einen Spin s_x zufällig aus und klappt diesen um, d.h. $s_x \rightarrow -s_x$.² Dieses Verfahren hat jedoch noch nicht $[s']$ zur Folge, sondern die vorgeschlagene Konfiguration $[s'_{(p)}]$. Anschliessend wird die Energiedifferenz zwischen $[s]$ und $[s'_{(p)}]$ mit

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}[s'_{(p)}] - \mathcal{H}[s] \quad (2.32)$$

berechnet. Der Algorithmus verfährt nun folgendermassen:

- Wenn $\Delta\mathcal{H} \leq 0$, die Energie der vorgeschlagenen Konfiguration $[s'_{(p)}]$ also kleiner ist als diejenige der Konfiguration $[s]$, dann gilt $[s'_{(p)}] \rightarrow [s']$ mit der Annahmewahrscheinlichkeit $w_{acc}[s'_{(p)}, s'] = 1$.
- Wenn $\Delta\mathcal{H} > 0$, die Energie der vorgeschlagenen Konfiguration $[s'_{(p)}]$ grösser ist als diejenige von $[s]$, so gilt $w_{acc}[s'_{(p)}, s'] = \exp(-\beta(\mathcal{H}[s'_{(p)}] - \mathcal{H}[s])) = \exp(-\beta\Delta\mathcal{H})$.

Dies schliesst für $\Delta\mathcal{H} > 0$ auch die Möglichkeit mit ein, dass $[s'] = [s]$. Ein Algorithmus Schritt, oder äquivalent ein Markov Prozess, kreierte aber auch in diesem Fall ein neues Glied in der Markov Kette. Im Hinblick auf eine effiziente Implementierung des Metropolis Algorithmus ist die Eigenschaft der lokalen Wechselwirkung des Ising Modells von zentraler Bedeutung. Diese führt dazu, dass $\Delta\mathcal{H}$ nur von den nächsten Nachbarn des auserwählten Spins s_x abhängt, während gilt: $\mathcal{H} = \mathcal{H}[s]$.

Wie setzt sich nun ein Element $w[s, s']$ der Markov Matrix für den Metropolis Algorithmus im Detail zusammen? Es wurde aufgezeigt, dass ein Metropolis Schritt aus zwei Teilen besteht:

1. Aus einer Konfiguration $[s]$ wird durch Umklappen eines zufällig ausgewählten Spins eine Konfiguration $[s'_{(p)}]$ vorgeschlagen.
2. $[s'_{(p)}]$ wird akzeptiert und somit zu einer neuen Konfiguration $[s']$ oder aus $[s'_{(p)}]$ wird wieder $[s]$.

Diese beiden Schritte unterliegen je einer entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeit. Die Wahrscheinlichkeit, aus einer Konfiguration $[s]$ die vorgeschlagene Konfiguration $[s'_{(p)}]$ zu

²Als alternatives Verfahren kann dem Spin ein neuer Wert $s_x = \pm 1$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit vorgeschlagen werden.

erzeugen, ergibt sich zu $w_{prop}[s, s'_{(p)}] = \frac{1}{L^d}$, da jeder Spin mit der gleichen Wahrscheinlichkeit vom Algorithmus ausgewählt und umgeklappt wird. Die Wahrscheinlichkeit, dass $[s'_{(p)}]$ zu $[s']$ wird, ist wie bereits erklärt gegeben durch $w_{acc}[s'_{(p)}, s'] = \min\{1, \exp(-\beta\Delta\mathcal{H})\}$. Damit ergibt sich das Matrix Element $w[s, s']$ zu

$$w[s, s'] = w_{prop}[s, s'_{(p)}]w_{acc}[s'_{(p)}, s'] = \frac{1}{L^d} \min\{1, \exp(-\beta\Delta\mathcal{H})\}. \quad (2.33)$$

$w[s, s']$ ist stationär und hängt nur von $[s]$ resp. $[s']$ ab. Somit sind die in Kapitel 2.2.2 aufgeführten Eigenschaften eines Markov Prozesses erfüllt. Es bleibt zu beweisen, dass der Metropolis Algorithmus ergodisch ist und Detailed Balance erfüllt. Das Letztere lässt sich leicht zeigen:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta\mathcal{H}[s])w[s, s'] &= \frac{1}{L^d} \exp(-\beta\mathcal{H}[s]) \\ &= \frac{1}{L^d} \exp(-\beta\mathcal{H}[s'] - \beta\mathcal{H}[s] + \beta\mathcal{H}[s']) \\ &= \exp(-\beta\mathcal{H}[s']) \frac{1}{L^d} \exp(-\beta(\mathcal{H}[s] - \mathcal{H}[s'])) \\ &= \exp(-\beta\mathcal{H}[s'])w[s', s]. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Sind alle Spins eines Gitters vom Algorithmus ausgewählt worden, so ist ein Metropolis Sweep beendet. Es ist offensichtlich, dass mit diesem Verfahren jede beliebige Spinkonfiguration erzeugt werden kann und somit der Metropolis Algorithmus tatsächlich ergodisch ist.

Die Erzeugung eines neuen Gliedes in der Markov Kette kann entweder durch lokales Aufdatieren eines Spins oder durch einen gesamten Sweep geschehen. Letzteres führt zur Übereinstimmung der Anzahl Spinkonfigurationen im Gleichgewicht mit der Anzahl N Messdaten einer Observablen \mathcal{O} . Der in diesem Kapitel besprochene Algorithmus erweist sich aber als höchst ineffizient im Bereich unterhalb der kritischen Temperatur T_c , da hier die lokale Auswahl der Spins die Erzeugung neuer, unabhängiger Konfigurationen erschwert. Diese Problematik erhöht sich zusätzlich mit zunehmender Grösse des simulierten Gitters.

2.4 Der Swendsen-Wang Cluster Algorithmus

Die nachfolgenden Ausführungen basieren auf [1, 2, 4].

Die Ineffizienz des Metropolis Algorithmus im Bereich des zweiten Ordnung Phasenüberganges wird durch den von Swendsen und Wang in [8] eingeführten Multi-Cluster Algorithmus behoben. Die wesentliche Idee besteht darin, Cluster gleichgerichteter Spins zu bilden und diese mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit umzuklappen. Solche Cluster werden konstruiert, indem benachbarte Spins nach einem entsprechenden Verfahren durch sogenannte Bonds miteinander verbunden werden. Dieses lautet:

- Sind zwei benachbarte Spins antiparallel, so wird zwischen ihnen kein Bond gesetzt.
- Zeigen zwei Spins in die gleiche Richtung, so werden diese mit der Wahrscheinlichkeit $p_{bond} = 1 - \exp(-2\beta J)$ durch einen Bond verbunden und gehören somit in den gleichen Cluster.

Eine gegebene Spinkonfiguration $[s]$ wird dadurch in Cluster paralleler Spins unterteilt, die jeweils durch Bonds miteinander verbunden sind. Die Cluster untereinander jedoch sind unkorreliert. Ist ein Spin durch keinen Bond mit einem anderen verbunden, so bildet er für sich einen Cluster. Dies wird durch die Abbildung 2.3 illustriert.

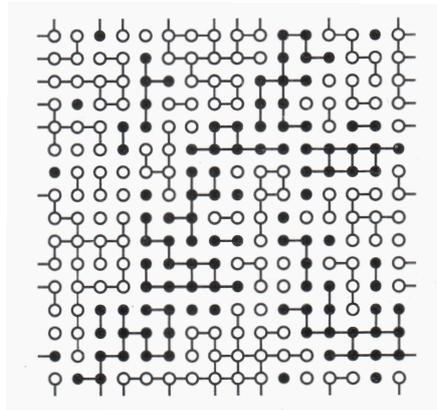


Abbildung 2.3: Eine Konfiguration $[s]$ unterteilt in Cluster gleichgerichteter Spins.[4]

Eine neue Konfiguration $[s']$ in der Markov Kette entsteht nun folgendermassen:

1. Jeder Cluster wird als solcher durch den Algorithmus identifiziert.
2. Alle Cluster werden unabhängig voneinander mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% umgeklappt.

Dies beendet einen Sweep des S.-W. Algorithmus. Für N_c Cluster sind entsprechend alle möglichen 2^{N_c} Konfigurationen für $[s']$ gleich wahrscheinlich.

Es ist durch p_{bond} gegeben, dass die Grösse C eines Cluster, d.h. die Anzahl der sich in ihm befindenden Spins, abhängig ist von der Temperatur. Im Bereich sehr hoher Temperaturen unterteilt der S.-W. Algorithmus das Gitter nur noch in sehr kleine Cluster und für $T \rightarrow \infty$ gilt sogar $C = 1$. In diesem Fall wird der Algorithmus dazu gezwungen, jeden *einzelnen* Spin mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% umzuklappen. Für sehr hohe Temperaturen nähert sich die Funktionsweise des Cluster Algorithmus also derjenigen des Metropolis Algorithmus an.

Die Ergodizität ist dadurch gewährleistet, dass immer eine von Null verschiedene, wenn auch sehr kleine Wahrscheinlichkeit existiert, dass kein Bond gesetzt wird und somit jeder Spin für sich einen Cluster bildet. Ausgehend von dieser Situation kann durch entsprechendes Umklappen jede beliebige neue Konfiguration erzeugt werden.

Um zu zeigen, dass der Swendsen-Wang Algorithmus Detailed Balance erfüllt, genügt es ein System zweier benachbarter Spins zu betrachten. Stehen diese antiparallel zueinander, so gehören sie notwendigerweise zu verschiedenen Clustern. Nach der Durchführung eines Sweeps beträgt die Wahrscheinlichkeit einer parallelen Ausrichtung 50%. Ausgehend von der neuen Konfiguration wird der Bond nun gemäss p_{bond} gesetzt oder mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit $(1 - p_{bond})$ nicht aktiviert. Die Wahrscheinlichkeit, dass nach einem Sweep die

Spins wieder in die alte, antiparallele Ausgangslage zurückversetzt werden, ist somit gegeben durch $\frac{1}{2}(1 - p_{bond})$. Die entsprechende Detailed Balance Beziehung lautet nun

$$p[s_{\uparrow\downarrow/\downarrow\uparrow}]w_{\uparrow\downarrow/\downarrow\uparrow \rightarrow \uparrow\uparrow/\downarrow\downarrow}[s, s'] = p[s_{\uparrow\uparrow/\downarrow\downarrow}]w_{\uparrow\uparrow/\downarrow\downarrow \rightarrow \uparrow\downarrow/\downarrow\uparrow}[s', s]. \quad (2.35)$$

Explizit folgt daraus

$$\exp(-\beta J)\frac{1}{2} = \exp(\beta J)\frac{1}{2}(1 - p_{bond}) = \exp(\beta J)\frac{1}{2}\exp(-2\beta J). \quad (2.36)$$

Mit den anderen 50% Wahrscheinlichkeit bleibt die Antiparallelität der Ausgangskonfiguration nach einem Sweep erhalten, d.h. $[s'] = \uparrow\downarrow / \downarrow\uparrow$. In diesem Fall wird kein Bond aktiviert, und das System kehrt mit 50% Wahrscheinlichkeit wieder in die Ausgangslage zurück. Detailed Balance ist somit trivial erfüllt. Es wird weiter in [1] gezeigt, dass Detailed Balance auch für die Situation gilt, in der beide Spins ursprünglich parallel zueinander sind. Eine mathematisch rigorose Darstellung hinsichtlich Detailed Balance für den Swendsen-Wang Algorithmus findet sich in [2].

Auf der Grundlage des S.-W. Cluster Algorithmus lässt sich eine Beziehung zwischen den Clustergrößen C und der Suszeptibilität χ herleiten. Die totale Magnetisierung \mathcal{M} einer Konfiguration $[s]$ ist dazu gegeben durch

$$\mathcal{M}[s] = \sum_x s_x = \sum_C \mathcal{M}_C, \quad (2.37)$$

wobei der Beitrag zur Gesamtmagnetisierung durch einen Cluster nach

$$\mathcal{M}_C = \sum_{x \in C} s_x \quad (2.38)$$

erfolgt. In einem endlichen Volumen verschwindet die mittlere Magnetisierung unterhalb der kritischen Temperatur T_c , d.h.

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \langle \sum_C \mathcal{M}_C \rangle = 0. \quad (2.39)$$

Daraus folgt für χ entsprechend der Definition nach (2.6)

$$\chi = \frac{1}{L^d} \langle \mathcal{M}^2 \rangle = \frac{1}{L^d} \langle (\sum_C \mathcal{M}_C)^2 \rangle = \frac{1}{L^d} \langle \sum_{C_1, C_2} \mathcal{M}_{C_1} \mathcal{M}_{C_2} \rangle = \frac{1}{L^d} \langle \sum_C \mathcal{M}_C^2 \rangle. \quad (2.40)$$

Da ein Cluster aufgrund seiner Konstruktion nur parallele Spins enthält, ist bis auf ein Vorzeichen die Magnetisierung eines Clusters gegeben durch

$$\mathcal{M}_C = \pm |C| = \pm \sum_{x \in C} 1. \quad (2.41)$$

Somit kann die Suszeptibilität ausgedrückt werden durch

$$\chi = \frac{1}{L^d} \langle \sum_C |C|^2 \rangle. \quad (2.42)$$

Die Observable χ steht nun in direktem Zusammenhang mit der Clustergrösse. Dies zeigt, dass es sich bei einem Cluster tatsächlich um ein physikalisches Objekt handelt. Anstatt die Magnetisierung $\mathcal{M}[s]$ durch blosses Addieren der einzelnen Spinvariablen s_x zu berechnen, werden nach (2.42) die quadrierten Clustergrössen $|C|$ zusammengezählt. Die Statistik wird damit um einen Faktor 2^{N_C} erhöht, wobei N_C die Anzahl Cluster in einer Konfiguration sind. Dies macht aus (2.42) einen sogenannten Improved Estimator.

Eine detaillierte Gegenüberstellung der beiden Algorithmen, insbesondere im Bereich des Phasenüberganges, wird im Kapitel 4 unter Berücksichtigung numerischer Resultate durchgeführt.

2.5 Die Fehleranalyse

Die nachfolgenden Ausführungen basieren auf [1, 2, 4].

Eine Monte Carlo Simulation muss in vielerlei Hinsicht wie ein real durchgeführtes Experiment behandelt werden. Auch in der Simulation des Ising-Modells müssen statistische und systematische Fehler berücksichtigt werden. Befindet sich das betrachtete System im Gleichgewicht, so wird der thermische Erwartungswert einer Observablen \mathcal{O} durch

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}[s^{(i)}] \quad (2.43)$$

abgeschätzt. Sind die Messwerte $\mathcal{O}[s^{(i)}]$ normalverteilt, so ergibt sich deren Standardabweichung (statistischer Fehler) vom Mittelwert durch

$$\Delta \mathcal{O} = \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (\mathcal{O} - \langle \mathcal{O} \rangle)^2}{N-1}} = \sqrt{\frac{1}{N-1} (\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2)}. \quad (2.44)$$

Damit der statistische Fehler halbiert werden kann, muss die Anzahl unabhängiger Konfigurationen um einen Faktor vier erhöht werden. Für $N \rightarrow \infty$ verschwindet (2.44) und (2.43) wird exakt. Die Berechnung des statistischen Fehlers nach (2.44) ergibt jedoch nur eine verlässliche Fehlerabschätzung, wenn die erzeugten Daten tatsächlich statistisch unabhängig voneinander sind. Dies ist im Allgemeinen in einer Monte Carlo Simulation nicht der Fall, da ein neues Glied $[s^{(i+1)}]$ in der Markov Kette abhängig ist von $[s^{(i)}]$. Dies wirkt sich nach (2.43) auch auf die Observable \mathcal{O} aus. Daraus folgt, dass der wahre statistische Fehler grösser ist als die Standardabweichung nach (2.44). Die Autokorrelationszeit bzw. die Anzahl Sweeps, die durchgeführt werden müssen, um eine unabhängige neue Konfiguration zu erzeugen, lässt sich mit der Autokorrelationsfunktion

$$\mathcal{C}_{\mathcal{O}}(t) = \langle \mathcal{O}^{(i)} \mathcal{O}^{(i+t)} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N - M - t} \sum_{i=M+1}^{N-t} \mathcal{O}[s^{(i)}] \mathcal{O}[s^{(i+t)}] \propto \exp(-t/\tau) \quad (2.45)$$

abschätzen. Hier bezeichnet τ die Autokorrelationszeit, d.h. die Konfigurationen $[s^{(i)}]$ und $[s^{(i+\tau)}]$ dürfen annähernd als unabhängig betrachtet werden. Dies führt zu $\frac{N}{\tau}$ unkorrelierten Konfigurationen aus N Monte Carlo Sweeps. Das Problem der Autokorrelation wird besonders schwerwiegend, wenn sich das System einem Phasenübergang zweiter Ordnung nähert. In

dieser Region divergiert die Korrelationslänge ξ und entsprechend die Autokorrelationszeit τ nach

$$\tau \propto \xi^z. \quad (2.46)$$

Dieser Effekt wird als Critical Slowing Down bezeichnet und durch den dynamischen kritischen Exponenten z bestimmt. Dabei ist z nicht ein kritischer Exponent im Sinne von ν, β, γ , sondern nimmt für unterschiedliche Algorithmen verschiedene Werte an. Grosse Werte von z haben ein rasches Anwachsen der Autokorrelationszeit in der Annäherung an den Phasenübergang zur Folge. Der Algorithmus braucht entsprechend viele Sweeps um eine statistisch unabhängige Konfiguration zu erzeugen. Das Phänomen Critical Slowing Down nimmt für kleine z ab, was gleichbedeutend ist mit einem Algorithmus, der im Bereich von T_c bereits nach wenigen Durchläufen eine neue Spinkonfiguration generiert. Somit wird der dynamisch kritische Exponent z zu einem Mass für die Effizienz des verwendeten Algorithmus. Die in dieser Arbeit implementierten Algorithmen besitzen nach [4] die folgenden empirisch ermittelten Werte für z :

dimension d	Metropolis	Swendsen Wang
2	2.167 ± 0.001	0.25 ± 0.01
3	2.02 ± 0.02	0.54 ± 0.02

Da in realen Monte Carlo Simulationen nur endliche Systeme betrachtet werden können, ist die Divergenz der Korrelationslänge ξ und somit auch diejenige von τ beschränkt durch die Länge L des Gitters. Somit ergibt sich (2.46) zu

$$\tau \propto L^z. \quad (2.47)$$

Eine Möglichkeit, den Fehler einer Observablen \mathcal{O} trotz korrelierter Daten verlässlich abzuschätzen, bietet das Binning Verfahren. Dabei wird ausgehend von den gemessenen Observablen $\mathcal{O}[s^{(i)}]$ eine neue, in der Anzahl um den Faktor N_b reduzierte, Datenmenge $\overline{\mathcal{O}}^{(j)}$ nach

$$\overline{\mathcal{O}}^{(j)} = \frac{1}{N_b} \sum_{k=(j-1)N_b+1}^{jN_b} \mathcal{O}[s^{(k)}] \quad (2.48)$$

erzeugt und als statistisch unabhängig betrachtet³. Für eine Biningrösse $N_b = 4$ ergibt sich als konkretes Beispiel:

$$\overline{\mathcal{O}}^{(1)} = \frac{1}{4}(\mathcal{O}^{(1)} + \mathcal{O}^{(2)} + \mathcal{O}^{(3)} + \mathcal{O}^{(4)}), \quad (2.49)$$

$$\overline{\mathcal{O}}^{(2)} = \frac{1}{4}(\mathcal{O}^{(5)} + \mathcal{O}^{(6)} + \mathcal{O}^{(7)} + \mathcal{O}^{(8)}), \quad (2.50)$$

$$\dots \quad (2.51)$$

Von den $\tilde{N} = \frac{N}{4}$ gemittelten Daten wird nun die Standardabweichung gemäss (2.44) berechnet. Ist die Biningrösse N_b zu klein, so sind die nach (2.48) erzeugten Daten immer noch

³Die Formel (2.48) wurde der Diplomarbeit *Cluster Algorithms for CP(N-1) Models in the Large N Limit* von Samuel Hertig (2007) entnommen.

korreliert, und entsprechend unterschätzt die berechnete Standardabweichung den wahren statistischen Fehler. Das Verfahren wird nun repetitiv auf die jeweils gebinneten Daten angewendet und somit N_b vergrößert, bis sich die zunehmende Standardabweichung auf einem Plateau stabilisiert. Die so erzeugte Menge an Daten darf nun als statistisch unabhängig betrachtet werden, und eine zuverlässige Abschätzung des Fehlers ist erreicht. Natürlich gibt es eine obere Grenze für N_b , denn ein korrekter Fehler erfordert immer noch eine genügend grosse Menge an Daten $\tilde{N} \gg 1$.⁴

Ein Ziel der in dieser Arbeit diskutierten Simulationen ist es, die magnetische Suszeptibilität χ nach (2.6) zu bestimmen. Um die korrekte Standardabweichung der Suszeptibilität bestimmen zu können, muss berücksichtigt werden, dass χ von den bereits fehlerbehafteten Grössen $\overline{\mathcal{M}}$ und $\overline{\mathcal{M}^2}$ abhängt. In einem ersten Schritt werden deshalb mit Hilfe des Binning Verfahrens erst die Standardabweichungen von $\overline{\mathcal{M}}$ und $\overline{\mathcal{M}^2}$ ermittelt. Diese fliessen nun in das Fehlerfortpflanzungsgesetz nach Gauss ein um die Standardabweichung von χ zu berechnen. Haben sich die Fehler von $\overline{\mathcal{M}}$ und $\overline{\mathcal{M}^2}$ auf einem Plateau stabilisiert, so folgt mit diesem Verfahren eine zuverlässige Berechnung des Fehlers für die Suszeptibilität. Abbildung 2.4 zeigt, wie sich die Standardabweichung für $\overline{\mathcal{M}}$ unter Verwendung des Binning Verfahrens stabilisiert. Dabei wird dieses abgebrochen, sobald eine entsprechend programmierte Abbruchbedingung erfüllt ist.

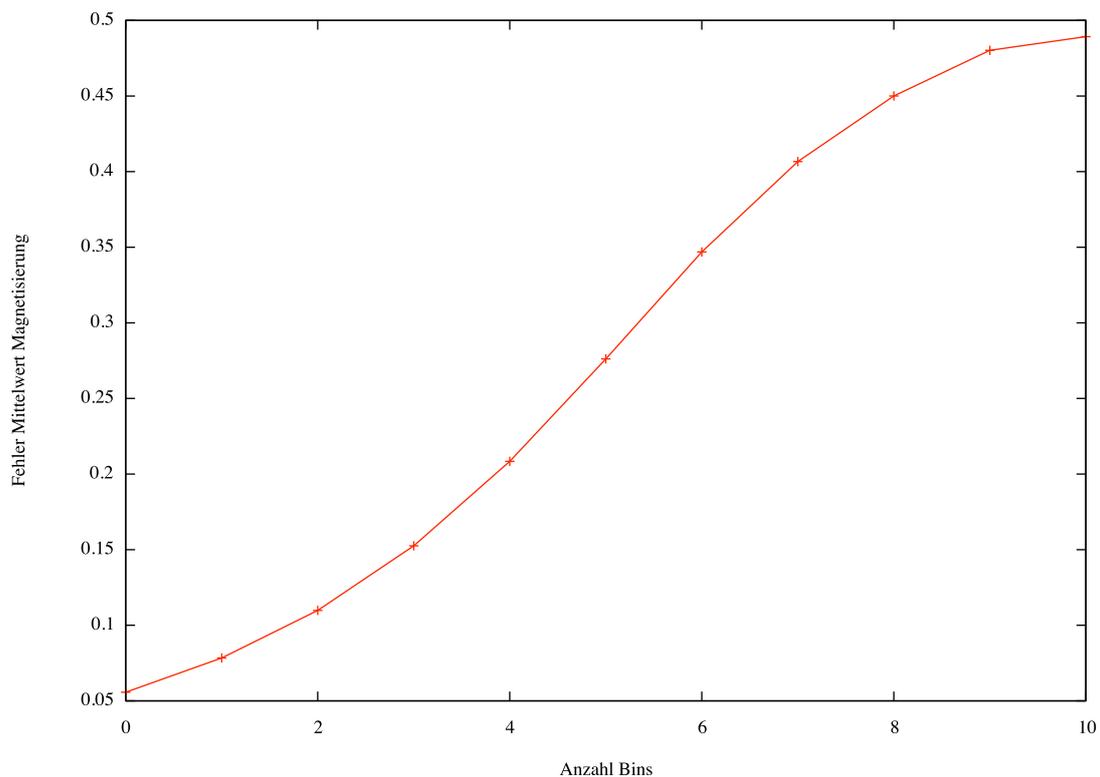


Abbildung 2.4: Stabilisierung des Fehlers von $\overline{\mathcal{M}}$ unter Verwendung des Binning Verfahrens.

⁴Es existieren neben dem Binning Verfahren noch weitere Möglichkeiten die Fehler von Monte Carlo Daten zu bestimmen (siehe dazu [4]).

Wie im realen Experiment sind systematische Fehler in ihrer Abschätzung weitaus schwieriger zu behandeln, als statistische. Die Hauptquelle systematischer Fehler in der Simulation des Ising-Modells liegt in der Tatsache, dass nur eine endliche Zeit und somit nur eine endliche Anzahl Glieder in der Markov Kette abgewartet wird, bevor man das System als equilibriert betrachtet. Dies hat einerseits zur Folge, dass die Unabhängigkeit des Gleichgewichtszustandes von $[s^{(1)}]$ zwar klein, aber doch nicht verschwindend ist und die anschliessend produzierten Spinkonfigurationen $\{s^{(1)} \dots s^{(N)}\}$ in ihrem Auftreten nicht exakt der erforderlichen Boltzmann Verteilung entsprechen.

2.6 Der Phasenübergang im Ising-Modell

Die nachfolgenden Ausführungen basieren auf [3, 9].

Wie im Kapitel 2.1.2 bereits erwähnt wurde, weist das Ising-Modell für $d > 1$ einen Phasenübergang auf. Diesen gilt es in diesem Kapitel genauer zu beschreiben. Ein Phasenübergang wird nach dem charakteristischen Verhalten einer makroskopischen Grösse am Übergang eingeteilt. Diese geeignet zu wählende Grösse wird Ordnungsparameter genannt und soll hier allgemein mit Ω bezeichnet werden. Die Klassifizierung lautet nun folgendermassen:

$$\langle \Omega \rangle = \begin{cases} \text{unstetig} & \text{Phasenübergang 1. Ordnung,} \\ \text{stetig} & \text{Phasenübergang 2. Ordnung.} \end{cases}$$

Während sich beim Phasenübergang 2. Ordnung die Grösse $\langle \Omega \rangle$ am Übergangspunkt T_c stetig ändert, macht deren Ableitung bei T_c einen Sprung. Der Ordnungsparameter wird weiter so definiert, dass sein Mittelwert bei der kritischen Temperatur verschwindet und somit $\langle \Omega(T_c) \rangle = 0$ gilt. Es ist naheliegend, dass im Ising-Modell für den Ordnungsparameter Ω die Magnetisierung \mathcal{M} gewählt wird. Da sich deren Mittelwert in der unmittelbaren Umgebung des kritischen Punktes stetig ändert, erfährt das Ising-Modell einen Phasenübergang 2. Ordnung. Für $T > T_c$ befindet sich das System in der symmetrischen (geordneten) oder paramagnetischen Phase in welcher $\langle \mathcal{M} \rangle = 0$ gilt. Im Bereich $T < T_c$ befindet sich das System in der gebrochenen (ungeordneten) oder ferromagnetischen Phase, in welcher das Ising-Modell eine spontane Magnetisierung ohne Aktivierung eines äusseren Magnetfeldes aufweist. Aus der Tatsache folgend, dass die Hamiltonfunktion (2.1) für $B = 0$ die Eigenschaft einer vollständigen Symmetrie unter der Transformation $s_x \rightarrow -s_x \forall x$ aufweist, kann nicht vorhergesagt werden, welche Richtung von den Spins und somit nach (2.4) der Magnetisierung im Bereich $T < T_c$ eingenommen wird. Durch diese plötzlich bevorzugte Ausrichtung der Magnetisierung \mathcal{M} unterhalb der kritischen Temperatur wird die Symmetrie der Hamiltonfunktion gebrochen. Diese Brechung erfolgt spontan, das heisst, ohne das durch ein externes Magnetfeld die Richtung von \mathcal{M} vorgegeben ist. Im Gegensatz dazu, würde die Anwesenheit eines solchen Magnetfeldes die Symmetrie explizit brechen. Abbildung 2.5 zeigt die beiden möglichen Magnetisierungszustände, die das System bei $T < T_c$ einnehmen kann.

Da man in der praktischen Realisierung des Ising-Modells an endliche Volumen gebunden ist, gilt es an dieser Stelle eine wichtige Einschränkung zu machen. Streng genommen gibt es in einem endlichen Volumen keinen Phasenübergang. Mittelt man die Magnetisierung über eine hinreichend grosse Periode, so resultiert trotz $T < T_c$ eine mittlere Magnetisierung $\overline{\mathcal{M}}$

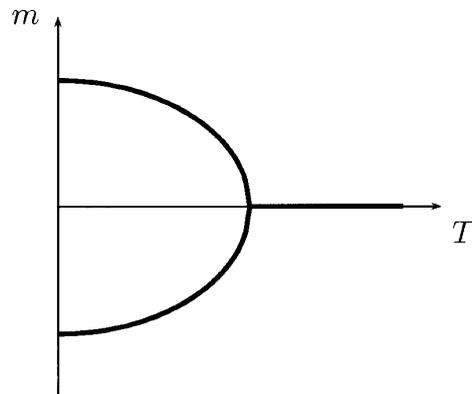


Abbildung 2.5: Qualitatives Bild der möglichen Magnetisierungszustände für $B = 0$. T : Temperatur, m : mittlere Magnetisierung eines Spins ($m = \frac{\langle \mathcal{M} \rangle}{L^d}$) oder mittlere Magnetisierung des Systems ($m = \langle \mathcal{M} \rangle$). Die kritische Temperatur T_c befindet sich am Scheidepunkt der beiden Magnetisierungszustände. [3]

von nahezu null. Das System vermag somit zwischen den positiven und den negativen Magnetisierungszuständen hin und her zu wechseln. Die Grösse dieser Periode hängt dabei vom entsprechenden Volumen ab. Dass in diesem Zusammenhang auch die Effizienz des verwendeten Algorithmus eine zentrale Rolle spielt, ist Gegenstand des Kapitels 4. Ein Phasenübergang kann sich also nur im unendlichen Volumen oder äquivalent im sogenannten thermodynamischen Limes ergeben. Dieser Grenzwert kann folgendermassen erzeugt werden: Man aktiviere erst ein kleines Magnetfeld h . Dies führt dazu, dass sich die Spins bevorzugt entlang der Richtung von h ausrichten. Anschliessend lässt man das Volumen gegen unendlich gehen und schaltet zuletzt das Magnetfeld wieder ab. In der Sprache der Mathematik bedeutet dies: $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty}$.

Kapitel 3

Implementierung

In diesem Kapitel werden einige ausgewählte Elemente der Programmcodes detaillierter diskutiert.

3.1 Verwendete Hardware und Simulationsdauer

Sämtliche Programme wurden in der Programmiersprache C verfasst. Dabei vermochte [12] grosse Hilfe zu leisten. Die Simulationen wurden schlussendlich durchgeführt auf einem Apple PowerBook G4 mit einer PowerPC G4 CPU, deren Geschwindigkeit 1.67 GHz beträgt. Zudem standen 1.5 GB RAM Arbeitsspeicher zur Verfügung. Tabelle 3.1 vergleicht die Simulationsdauer (Zeit [Std:Min]) der beiden implementierten Algorithmen für 1060000 Sweeps und einem Wert von $\beta = 0.8$.

	Anz. Sweeps	β	L	Zeit [Std:Min]	L^2	Zeit [Std:Min]
Metropolis	1060000	0.8	100	0:02	100^2	3:05
S.-W. Cluster	1060000	0.8	-	-	100^2	3:59

Tabelle 3.1: Simulationsdauer im Vergleich.

3.2 Zufallszahlengenerator

Die in den Simulationen verwendeten Zufallszahlen (Pseudozufallszahlen) werden mit dem Pseudozufallszahlengenerator RANLUX (Version 3.0, 6.5.2001) von M. Lüscher (1994) [10] erzeugt. Es handelt sich dabei um einen qualitativ hochwertigen, deterministischen Zufallszahlengenerator, welcher gleichverteilte Pseudozufallszahlen im Intervall $(0, 1)$ generiert. Deterministisch bedeutet in diesem Zusammenhang, dass RANLUX bei einer bestimmten Initialisierung jeweils eine identische Folge an Zahlen liefert. RANLUX wird durch Eingabe einer natürlichen Zahl initialisiert. Damit während der Simulation ein gleichbleibender Initialisierungswert vermieden werden kann, wird dieser mit dem C Befehl `time_t` jeweils neu erzeugt. Dieser ermittelt die Anzahl Sekunden, welche seit dem 1. Januar 1970, 00:00:00 Uhr, vergangen sind. Ein Pseudozufallszahlengenerator hat die Eigenschaft, dass sich eine Zufallszahlenfolge nach einer bestimmten Periode wiederholt. Ein guter Zufallszahlengenerator erzeugt deshalb

eine möglichst lange Folge von Zahlen, bevor die Wiederholung einsetzt. RANLUX weist eine Periodendauer von 10^{165} [11] auf!

3.3 Nächste Nachbarn und periodische Randbedingungen

Das Gitter wird durch das entsprechende Array *ising*[] der Länge L bzw. L^2 erzeugt. Bedingt durch die gewählte Programmiersprache, werden somit die einzelnen Gitterplätze von $0, 1, \dots, L-1$ und in zwei Dimensionen von $0, 1, \dots, L^2-1$ durchnummeriert. In einer separaten Routine mit der Bezeichnung *init_next_neighbours* werden nun die nächsten Nachbarn eines jeden Gitterpunktes i so definiert, dass die periodischen Randbedingungen erfüllt sind. Dies wird durch die etwas anspruchsvollere Verwendung einer Modulo-Operation realisiert. Dieser allgemein mit $x\%y$ bezeichnete Befehl, gibt den Divisionsrest von $\frac{x}{y}$ zurück. Die Methode erfordert jedoch eine Korrektur des zum nullten Gitterplatz linken Nachbarn, da diesem sonst eine falsche Nummer zugewiesen wird. Die Routine ist auf Abbildung 3.1 zu sehen.

```
void init_next_neighbours () {
    for (int i = 0; i < L_2; i++) {
        right[i] = (i+1)%L + (i/L)*L; //define next neighbours using
        left[i]   = (i-1)%L + (i/L)*L; //modulo function x%y, ((i/L))gives
        up[i]     = (i-L+L_2)%L_2;    //back integer)
        down[i]   = (i+L+L_2)%L_2;
    }
    left[0] = L-1; //define left neighbour for ising[0]
                //to avoid value of left[0] = -1
}
}
```

Abbildung 3.1: Implementierung der nächsten Nachbarn mit periodischen Randbedingungen für $d = 2$.

Durch eine manuelle Eingabe vor dem Simulationsstart kann den Gitterplätzen wahlweise eine parallele ("cold start") oder eine zufällig verteilte ("hot start") Anfangskonfiguration der Spins zugeteilt werden. Die Resultate werden jedoch wie bereits erwähnt durch die Wahl nicht beeinflusst.

3.4 Der Metropolis Algorithmus

Der Metropolis Algorithmus wurde für $d = 1$ und $d = 2$ implementiert und wird jeweils umschlossen von einer for-Schleife, welche über jeden Gitterplatz von 0 bis $L-1$ bzw. 0 bis L^2-1 verläuft. Als erstes wird ein Spin zufällig ausgewählt. Dies geschieht unter der Verwendung einer Zufallszahl u , die zwischen 0 und 1 liegt. Da die Nummer eines Gitterplatzes eine natürliche Zahl im Bereich der Gittergröße sein muss, erfordert dies zusätzlich den Befehl $\text{int}(uL)$. Anschliessend soll die Energiedifferenz zwischen der Konfiguration $[s]$ und der Konfiguration $[s'_{(p)}]$ berechnet werden. Es ist nun höchst ineffizient, die Hamiltonfunktion nach (2.1) für die beiden Konfigurationen, die sich ja nur durch den umgeklappten Spin am zufällig ausgewählten Gitterplatz unterscheiden, auszurechnen um anschliessend die Differenz zu nehmen. Vielmehr sollte die Lokalität des Ising-Modells und somit die Tatsache berücksichtigt werden, dass die Energiedifferenz nur von den nächsten Nachbarn des ausgewählten

Spins abhängt. Im Folgenden wird eine effiziente Methode zur Berechnung von $\Delta E (= \Delta \mathcal{H})$ dargestellt, die so auch im Algorithmus implementiert ist. Um die Notation übersichtlich zu halten gilt $[s] \rightarrow \mu$ und $[s'_{(p)}] \rightarrow \nu$. Der zufällig ausgewählte Spin wird mit s_k bezeichnet. Im Programm wird k mit *randomsite* bezeichnet und ist gleich $\text{int}(uL)$. ΔE für $B = 0$ ist nun durch

$$E_\nu - E_\mu = -J \sum_{\langle ij \rangle} s'_i s'_j + J \sum_{\langle ij \rangle} s_i^\mu s_j^\mu = -J \sum_{i, \langle ik \rangle} s_i^\mu (s'_k - s_k^\mu) \quad (3.1)$$

gegeben. Dabei verläuft die letzte Summe nur über die Spins i , welche nächste Nachbarn des umgeklappten Spins s_k sind. Die Orientierung dieser Spins bleibt erhalten, so dass gilt $s'_i = s_i^\mu$. Ist nun ursprünglich $s_k^\mu = +1$, so gilt für $[s'_{(p)}]$ $s'_k = -1$ und somit $s'_k - s_k^\mu = -2$. Für den Fall $s_k^\mu = -1$ gilt $s'_k - s_k^\mu = +2$. Dies führt zu

$$s'_k - s_k^\mu = -2s_k^\mu. \quad (3.2)$$

Beziehung (3.1) wird dadurch zu

$$E_\nu - E_\mu = 2J \sum_{i, \langle ik \rangle} s_i^\mu s_k^\mu = 2J s_k^\mu \sum_{i, \langle ik \rangle} s_i^\mu. \quad (3.3)$$

Ausdruck (3.3) bringt folgende zwei Vorteile:

1. Innerhalb der Summe müssen keine Multiplikationen ausgeführt werden. Dies führt zu einer kürzeren Simulationsdauer.
2. (3.3) beinhaltet nur Spins der Konfiguration $[s]$. Somit muss der Spin am Platz k gar nicht erst provisorisch umgeklappt werden.

Nachdem $\Delta \mathcal{H}$ berechnet wurde, folgt eine if-Anweisung, die nur dann ausgeführt wird, wenn $\Delta \mathcal{H} < 0$ oder die Zufallszahl q kleiner als $\exp(-\beta \Delta \mathcal{H})$ ist. Trifft die eine oder die andere Bedingung zu, so wird s_k umgeklappt und gleichzeitig die Magnetisierung aktualisiert. Die Magnetisierung der Anfangskonfiguration wird zu Beginn der Simulation einmal berechnet und dem Array *measmag*[N] an der Stelle [0] zugeordnet. Wird ein ausgewählter Spin umgeklappt, so ist der neue Magnetisierungswert gegeben durch

$$M_\nu = M_\mu + \Delta M = M_\mu + 2s'_k. \quad (3.4)$$

Dabei wird (3.4) nur verwendet, wenn s_k umgeklappt wird. Behält der Spin seine Orientierung, so ist der neue Wert der Magnetisierung natürlich gleich dem Alten. Mit diesem Verfahren kann die Magnetisierung effizient aktualisiert werden.

Dadurch, dass die Spins nicht sequentiell, sondern zufällig ausgewählt werden, kann es vorkommen, dass in einem Sweep ein bestimmter Spin vom Algorithmus gar nicht betroffen, wohingegen ein anderer mehrmals aufdatiert wird.

¹Die Herleitung der Energiedifferenz entstammt aus [4].

3.5 Der Swendsen-Wang Cluster Algorithmus

Der Swendsen-Wang Cluster Algorithmus wurde nur für den Fall $d = 2$ implementiert. Ausgangslage ist somit ein quadratisches Gitter der Grösse L^2 . Nachdem dieses durch Aufrufen der entsprechenden Routine mit einer anfänglichen Spinkonfiguration initialisiert wurde, werden parallele Spins mit der Wahrscheinlichkeit $p_{bond} = 1 - \exp(-2\beta J)$ durch einen Bond verbunden. Dies erfordert eine for-Schleife, welche über jeden Gitterplatz von 0 bis $L^2 - 1$ verläuft und zwei if-else Entscheidungen beinhaltet. In einer ersten if-else Entscheidung vergleicht das Programm die Richtung des Spins am Gitterplatz i mit derjenigen seines rechten Nachbarn. Wenn der Spin am i -ten Platz und sein rechter Nachbar den gleichen Wert aufweisen und somit parallel sind, wird eine Zufallszahl erzeugt. Ist diese kleiner als p_{bond} , so wird ein Bond gesetzt. Dieser wird im global definierten, zweidimensionalen Array `bond[L_2][d + 1]` an der Stelle `[i][1]` durch den Eintrag einer 1 gespeichert. Ist die Zufallszahl grösser als p_{bond} oder sind die beiden benachbarten Spins antiparallel, so wird im Array an der Stelle `[i][1]` eine 0 eingetragen und somit kein Bond gesetzt. Die zweite if-else Entscheidung vergleicht den Spin am Gitterplatz i mit seinem unteren Nachbarn. Wiederum wird nur ein Bond mit p_{bond} gesetzt, falls die beiden Spins gleichgerichtet sind. Ein solcher Bond wird mit dem Eintrag einer 1 an der Stelle `[i][2]` im Array vermerkt. Ist die for-Schleife durchlaufen und sind somit die Bonds gesetzt, geht es nun darum, die dadurch entstandenen Cluster zu identifizieren. Dies stellt den anspruchsvollen Teil des Algorithmus dar. Dazu wird zunächst jeder Gitterplatz mit einer 0 markiert, was bedeutet, dass er noch zu keinem Cluster dazugehört. Eine weitere for-Schleife läuft jetzt sequentiell über jeden Gitterplatz. Diesmal lautet die Zählvariable s . Innerhalb der Schleife wird als erstes eruiert, ob der Spin am Platz s noch zu keinem Cluster gehört und somit gilt `mark[s] == 0`. Ist diese Bedingung erfüllt, so wird dieser Gitterplatz auf einer Liste aufgeführt und mit einer Markierungszahl versehen, die nun der Nummer des Clusters entspricht, dem der Spin zugehört. Anschliessend wird durch eine do-while Schleife überprüft, welche nächsten Nachbarn mit diesem Spin durch einen Bond verbunden sind. All diejenigen, die es sind, werden ebenfalls auf der Liste eingetragen und mit der gleichen Clusternummer versehen. Jeder Spin, der so auf die Liste gelangt, wird nun zu einem neuen Ausgangspunkt der auf Bondverbindung mit seinen nächsten Nachbarn überprüft wird. Dieses Verfahren wird von der do-while Schleife solange wiederholt, bis die Liste vollständig abgearbeitet ist und kein weiterer Spin dazugefügt wird. Der Cluster ist nun vollständig identifiziert und all die dazugehörenden Spins mit der gleichen Clusternummer versehen. Mit einem entsprechenden Counter wird dabei laufend die Clustergrösse aktualisiert. Anschliessend wird nun wiederum mit Hilfe einer Zufallszahl der gesamte Cluster mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% umgeklappt. Die for-Schleife wechselt jetzt zum nächsten Gitterplatz $s + 1$. Ein Sweep ist beim Clusteralgorithmus durchgeführt, wenn die for-Schleife beendet ist. Da in diesem Algorithmus die Suszeptibilität mit der quadrierten Clustergrösse berechnet wird, wird diese jeweils als Datenpunkt in ein entsprechendes Array geschrieben und in einem .txt File ausgegeben, welches im separaten Fehleranalyseprogramm ausgewertet werden kann.

3.6 Die Fehleranalyse

Es wurde für den Metropolis Algorithmus und den Cluster Algorithmus je ein Fehleranalyseprogramm geschrieben. In beiden Fällen berechnet dieses die Standardabweichung $\Delta\chi$ der magnetischen Suszeptibilität und die Autokorrelationsfunktion nach (2.45). Um das Bin-

ning Verfahren korrekt anwenden zu können, ermittelt das Fehleranalyseprogramm als ersten Schritt die grösstmögliche Potenz K von 2, welche kleiner oder gleich der Anzahl Messdaten im Gleichgewicht sein muss. K erfüllt also die Bedingung

$$K \leq N - M, \quad (3.5)$$

wobei mit N die gesamte Anzahl Messdaten und mit M die Anzahl der Datenpunkte bezeichnet wird, welche das System vor Erreichen seines Gleichgewichts erzeugt. Da nach jedem Sweep eine Messung gemacht wird, ist N somit gleich der Anzahl durchgeführter Sweeps. Für die nachfolgende Analyse werden anschliessend die $N - K$ ersten Datenpunkte weggeworfen. Die in dieser Arbeit dokumentierten Messresultate entstanden durch $N = 1060000$ Sweeps mit anschliessendem Wegschneiden von $M = 11000$ Datenpunkten. Entsprechend der Bedingung (3.5) und der Anforderung an K grösstmöglich zu sein, resultiert ein Wert von $K = 1048576$. Dies bedeutet, dass von der ursprünglichen Messreihe die ersten 11424 Datenpunkte weggeschnitten werden. (Es kann also auch $M = 0$ gewählt werden.) Die restlichen Daten werden nun für das Binning von $\overline{\mathcal{M}}$ und $\overline{\mathcal{M}^2}$ verwendet, welches getrennt durchgeführt wird. Das Binning Verfahren wird jeweils so oft repetiert, wie der zuvor berechnete Fehler kleiner ist, als der aktuelle Fehler multipliziert mit dem Faktor 0.95. Die Berechnung des Fehlers wird so abgebrochen, wenn dieser das Plateau erreicht hat. Es empfiehlt sich aber sehr, die Entwicklung der auf diese Art berechneten Fehler anhand einer Graphik noch einmal von Auge zu überprüfen (siehe dazu auch Kapitel 4.3). Anschliessend wird unter Verwendung des Gauss'schen Fehlerfortpflanzungsgesetzes die Standardabweichung $\Delta\chi$ berechnet.

Kapitel 4

Diskussion der Messresultate

Es sei an dieser Stelle noch einmal ausdrücklich darauf hingewiesen, dass die hier diskutierten Messresultate mit $J = 1$ und deaktiviertem Magnetfeld $B = 0$ erzeugt wurden. Das wesentliche Ziel der Simulationen ist es, die magnetische Suszeptibilität χ zu bestimmen. In diesem Kapitel werden die Messergebnisse anhand ihrer graphischen Darstellung diskutiert. Die entsprechenden numerischen Resultate sind im Anhang aufgeführt.

4.1 Der Gleichgewichtszustand

Der Erwartungswert einer Observablen \mathcal{O} darf mit (2.43) nur dann berechnet werden, wenn sich das betrachtete System in seinem Gleichgewichtszustand befindet. Konfigurationen, welche vor Erreichen des Gleichgewichts erzeugt werden, dürfen somit für die Berechnung von $\overline{\mathcal{O}}$ nicht verwendet werden. Es gilt daher die Anzahl Sweeps zu bestimmen, welche das System benötigt, um in sein Gleichgewicht zu kommen. Eine graphische Darstellung der Magnetisierung \mathcal{M} als Funktion der Anzahl Sweeps (Abbildung 4.1) stellt eine vernünftige Methode dar, um die für die Equilibrierung des Systems erforderliche Mindestanzahl Sweeps abschätzen zu können.

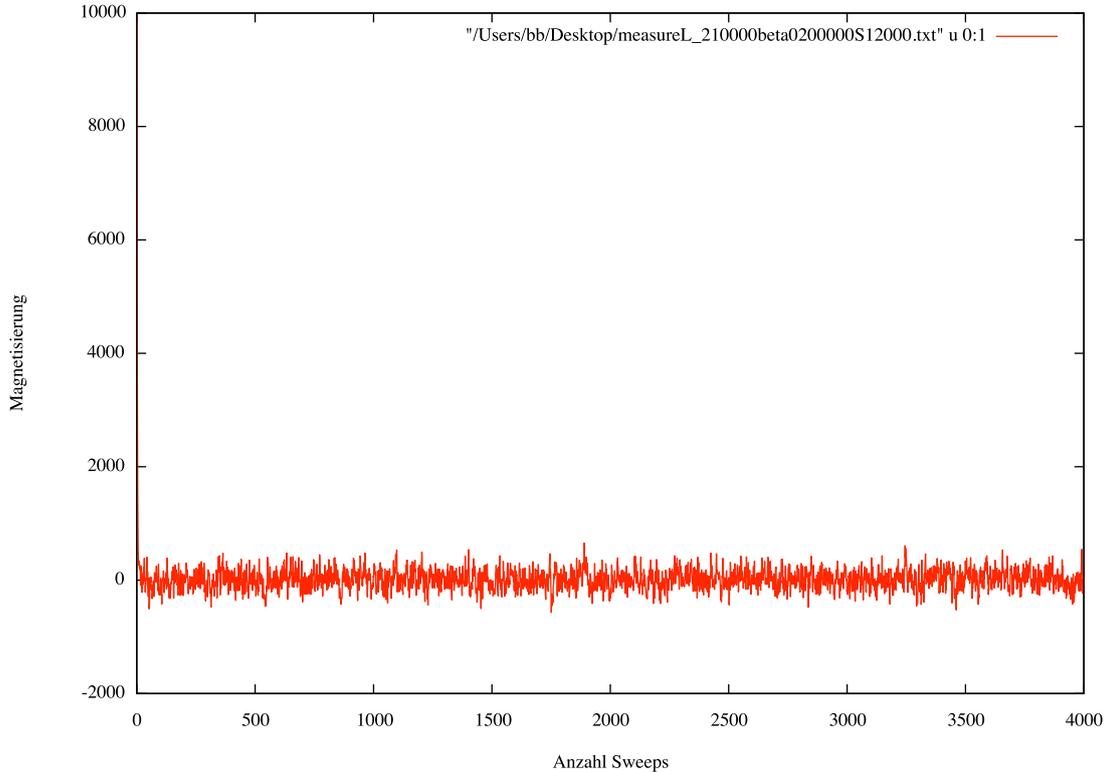


Abbildung 4.1: Magnetisierung \mathcal{M} eines $L^2 = 100^2$ Gitters als Funktion der Anzahl Sweeps bei einem Wert von $\beta = 0.2$. Die in dieser Simulation generierte Anfangskonfiguration $[s^{(1)}]$ besteht aus einer parallelen Ausrichtung aller Spins nach oben.

Es ist auf Abb. 4.2 zu erkennen, dass die Magnetisierung, ausgehend von ihrem durch $[s^{(1)}]$ gegebenen Anfangswert $\mathcal{M} = 10000$, stetig abnimmt, um anschliessend nach einer gewissen Anzahl Sweeps um den Wert $\mathcal{M} = 0$ zu fluktuieren. In der hier visualisierten Simulation ist dies schon nach ungefähr 20-25 Sweeps der Fall. Es wurde bereits im Kapitel 2.5 darauf hingewiesen, dass die Hauptquelle systematischer Fehler in der Simulation des Ising-Modells darin liegt, dass in der Praxis nur eine endliche Anzahl Sweeps abgewartet werden kann, bevor das System als equilibriert betrachtet wird. Um diese Fehlerquelle möglichst klein zu halten oder gleichbedeutend eine möglichst gute Approximation an einen idealen Gleichgewichtszustand zu erreichen, sollte ein Vielfaches der hier bestimmten 20-25 Sweeps für die Bestimmung von $\overline{\mathcal{O}}$ weggeschnitten werden (siehe dazu Kapitel 3.6).

4.2 Messresultate $d = 1$ mit Metropolis Algorithmus

Für $d = 1$ erfährt das Ising-Modell keinen Phasenübergang. Es lassen sich jedoch die gemessenen Resultate für χ mit dem analytischen Ergebnis nach (2.14) vergleichen. Dieses prognostiziert bereits, was in den folgenden Abbildungen 4.3 und 4.4 deutlich wird, nämlich einen von der Systemgrösse L abhängenden, unterschiedlichen Verlauf der magnetischen Suszeptibilität. Der gemessene Wert für χ wird mit (2.6) ermittelt, wobei an der Stelle der exakten Erwartungswerte $\langle \mathcal{M} \rangle$ resp. $\langle \mathcal{M}^2 \rangle$ nun die mit (2.43) ermittelten Erwartungswerte $\overline{\mathcal{M}}$ und

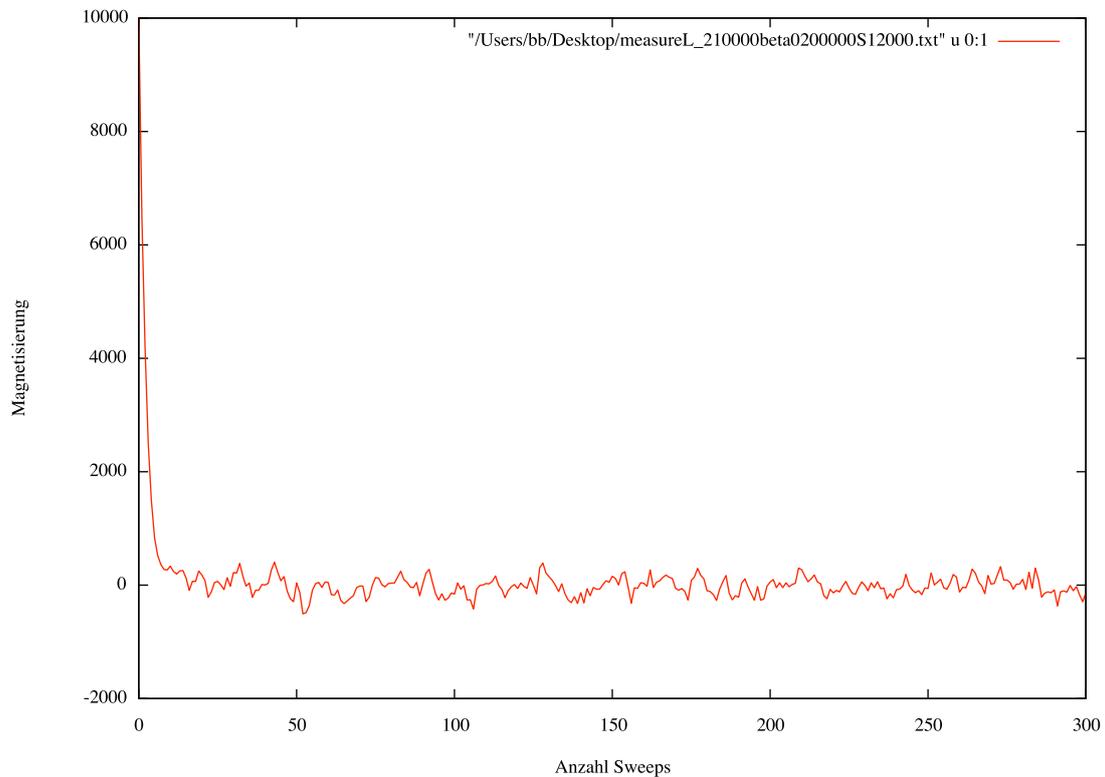


Abbildung 4.2: Abb. 4.1 mit vergrößerter Auflösung im Bereich bis 0-300 Sweeps.

$\overline{\mathcal{M}^2}$ eingesetzt werden. Abbildung 4.3 und 4.4 zeigen den Verlauf der Suszeptibilität für zwei unterschiedliche Systemgrößen $L = 4$ und $L = 100$. Beide Messreihen weisen eine sehr gute Übereinstimmung der numerischen Resultate mit dem jeweils analytischen Ergebnis auf. Entsprechend klein, und somit in den meisten Fällen nicht sichtbar, sind die Fehlerbalken. Für $L = 100$ zeigt sich, dass der Fehler für tiefer werdende Temperaturen grösser wird, was ein Zeichen dafür ist, dass die Messdaten (Magnetisierung) über eine zunehmend grösser werdende Anzahl Sweeps miteinander korreliert sind. Die verschiedenartige Form der beiden Messkurven resultiert, wie bereits erwähnt, durch die Wahl unterschiedlicher Systemgrößen.

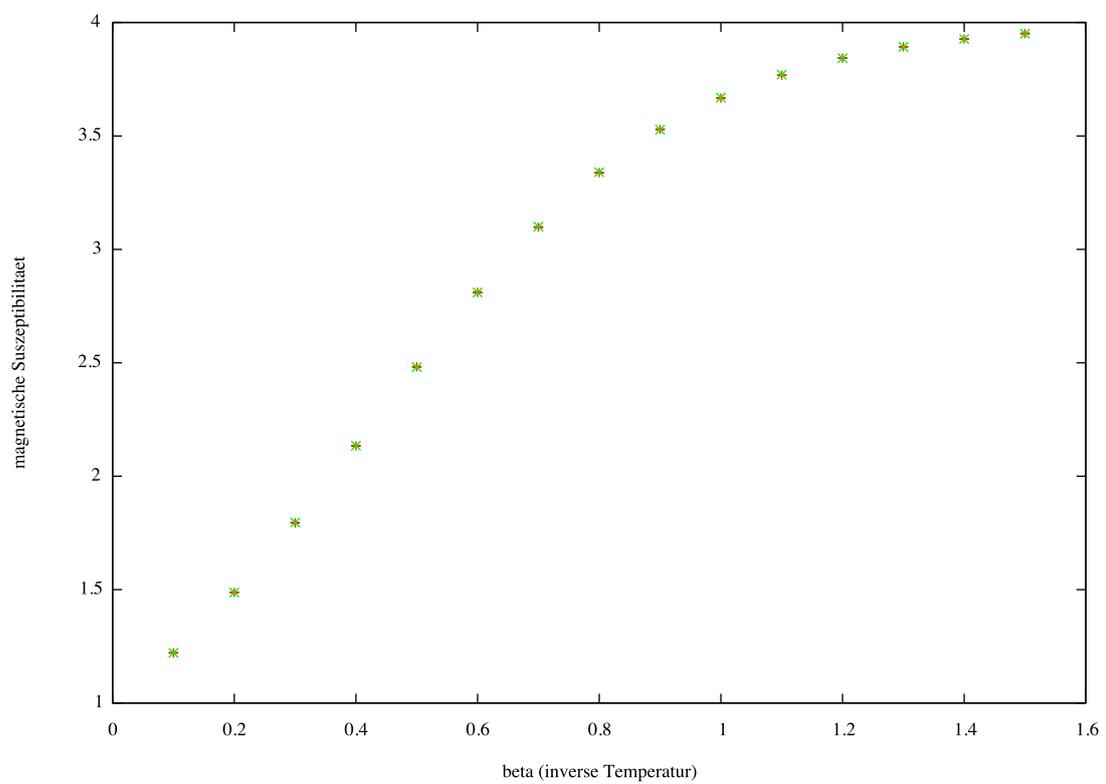


Abbildung 4.3: Messreihe Ising-Modell $d = 1$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L = 4$. rot: χ gemessen, grün: χ analytisch.

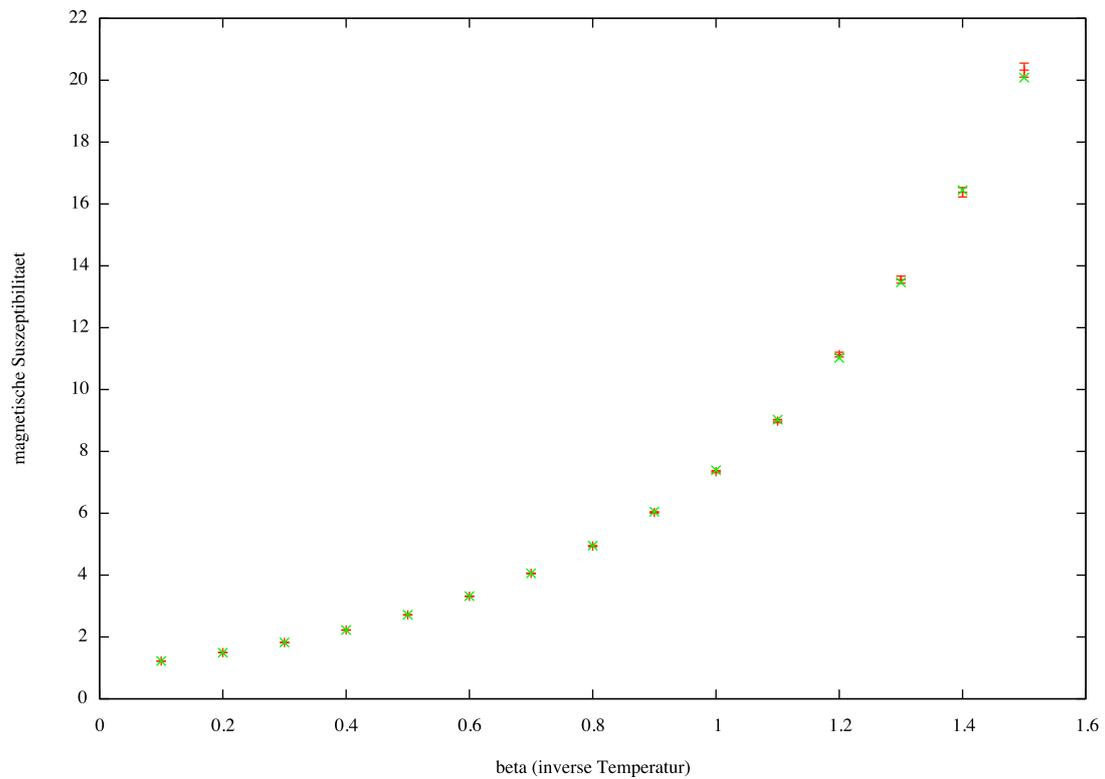


Abbildung 4.4: Messreihe Ising-Modell $d = 1$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L = 100$. rot: χ gemessen, grün: χ analytisch.

4.3 Messresultate $d = 2$ mit Metropolis Algorithmus

Das zweidimensionale Ising Modell erfährt, wie in Kapitel 2.6 bereits theoretisch diskutiert wurde, einen Phasenübergang 2. Ordnung bei einem analytischen Wert von $T_c = 2.269$ ($J = 1$) oder entsprechend $\beta_c = \frac{1}{k_B T_c} \approx 0.441$ ($k_B = 1$). Im thermodynamischen Limes würde χ , wie in Kapitel 2.1.2 erwähnt, bei Annäherung an T_c nach unendlich divergieren. In der praktischen Realisierung kann die Suszeptibilität jedoch höchstens gleich L^d werden und dies nur unter der Voraussetzung $\overline{\mathcal{M}} \approx 0$. Die Abbildungen 4.5, 4.6 und 4.7 zeigen den Verlauf der Suszeptibilität für drei verschiedene L^2 .

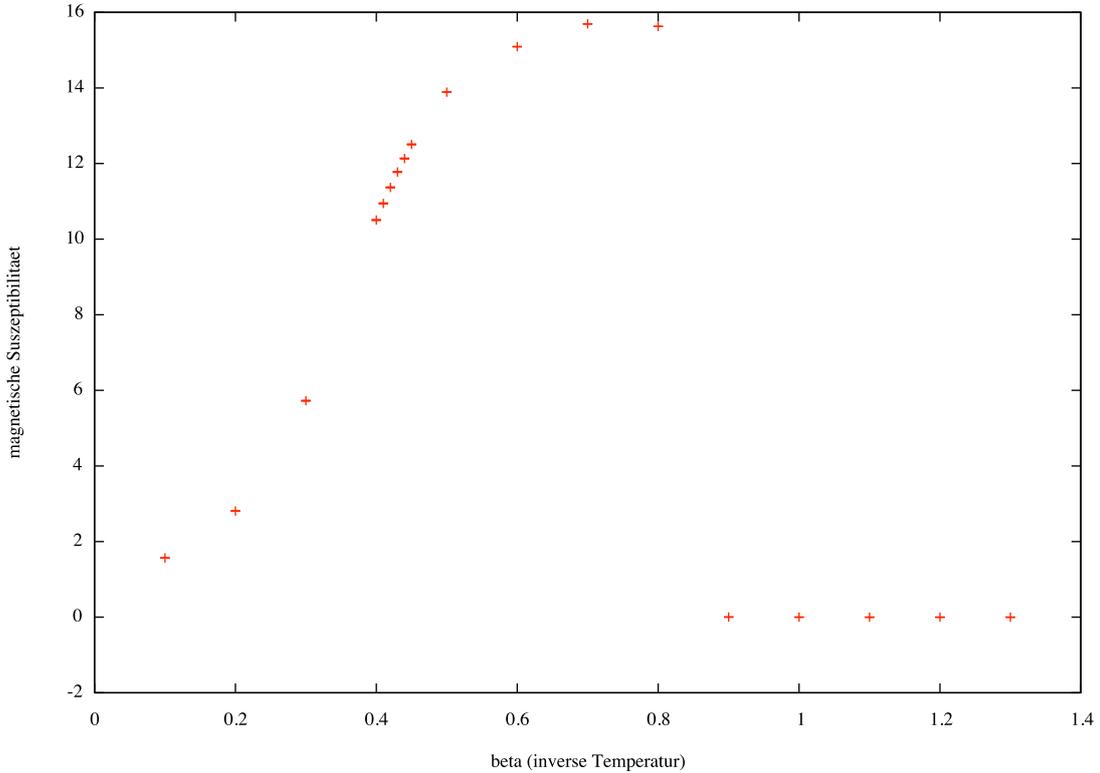


Abbildung 4.5: Messreihe Ising-Modell $d = 2$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L^2 = 4^2$. Da die Fehler im Bereich der kritischen Temperatur nicht mehr korrekt berechnet werden können, sind diese manuell auf null gesetzt worden (näheres siehe Text).

Betrachtet man auf den Abbildungen 4.5 - 4.7 jeweils die linke Flanke des Peaks, so zeigt sich, dass mit zunehmender Systemgrösse die Suszeptibilität im Bereich T_c steiler ansteigt. Der abrupte Abfall der Suszeptibilität liegt in der, im Bereich der kritischen Temperatur beginnenden und für $T < T_c$ noch stärker werdenden, Ineffizienz des Metropolis Algorithmus begründet. Diese entsteht aus der Eigenschaft des Letzteren, die Spins ausschliesslich lokal aufzudatieren. Man stelle sich die Situation vor, in der ein ausgewählter Spin und seine nächsten Nachbarn parallel ausgerichtet sind. Das Umklappen des Spins führt zu einer positiven Energiedifferenz $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}[s'_{(p)}] - \mathcal{H}[s] > 0$ und für eine tiefe Temperatur resultiert eine kleine Wahrscheinlichkeit, dass der Spin umgeklappt wird. Dies hat zur Folge, dass die

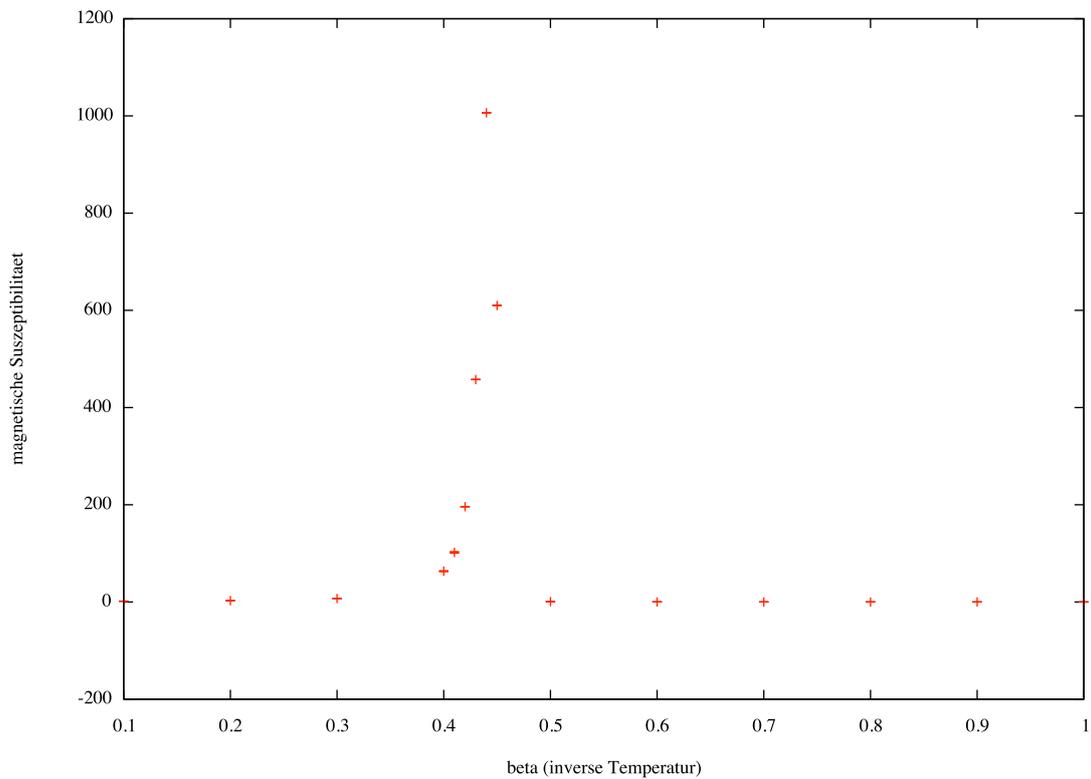


Abbildung 4.6: Messreihe Ising-Modell $d = 2$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L^2 = 50^2$. Da die Fehler im Bereich der kritischen Temperatur nicht mehr korrekt berechnet werden können, sind diese manuell auf null gesetzt worden (näheres siehe Text).

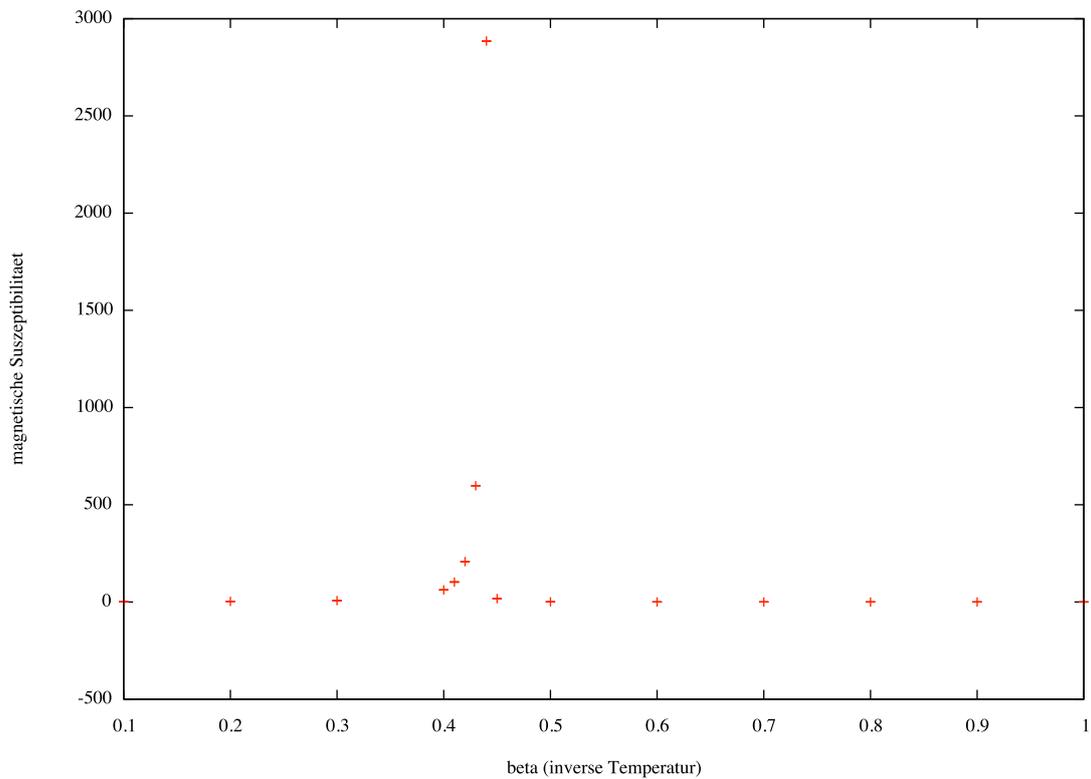


Abbildung 4.7: Messreihe Ising-Modell $d = 2$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L^2 = 100^2$. Da die Fehler im Bereich der kritischen Temperatur nicht mehr korrekt berechnet werden können, sind diese manuell auf null gesetzt worden (näheres siehe Text).

parallel ausgerichtete Konfiguration bevorzugt beibehalten wird. Ändert der Spin in Folge einer Aufdatierung doch seine Richtung, so ist die Wahrscheinlichkeit hoch, dass er bei erneuter Auswahl wieder zurückgeklappt wird, da jetzt $\Delta\mathcal{H} < 0$ gilt. Abbildung 4.8 zeigt einen Ausschnitt der Magnetisierungswerte für ein $L^2 = 50^2$ System bei einem Wert von $\beta = 0.44$. Der Algorithmus ist in diesem Bereich gerade noch genügend effizient, dass eine mittlere Magnetisierung $\overline{\mathcal{M}}$ von ungefähr null resultiert. Das heisst, der Algorithmus ist noch in der Lage zwischen den beiden Magnetisierungszuständen (siehe dazu auch Abbildung 2.5) zu wechseln, auch wenn diese jeweils bereits über eine recht grosse Anzahl Sweeps erhalten bleiben. Im Gegensatz dazu zeigt Abbildung 4.9 denselben Ausschnitt bei einem Wert $\beta = 0.8$, bei welcher der Algorithmus zumindest in der dargestellten Anzahl Sweeps nicht mehr fähig ist, den Magnetisierungszustand von $\mathcal{M} \approx -(50^2)$ zu ändern. Offensichtlich resultiert durch dieses Verhalten eine mittlere Magnetisierung von $\overline{\mathcal{M}} \approx -(50^2)$. Dass gerade dieser Magnetisierungszustand eingenommen wird, ist eine spontane Entscheidung des Systems. Der Wert der Magnetisierung hätte sich gerade so gut bei $\mathcal{M} = +50^2$ stabilisieren können. In jedem Fall resultiert aber nach einer genügend grossen Anzahl Sweeps trotzdem eine mittlere Magnetisierung $\overline{\mathcal{M}} \approx 0$. Die benötigte Anzahl kann aber sehr hoch sein.

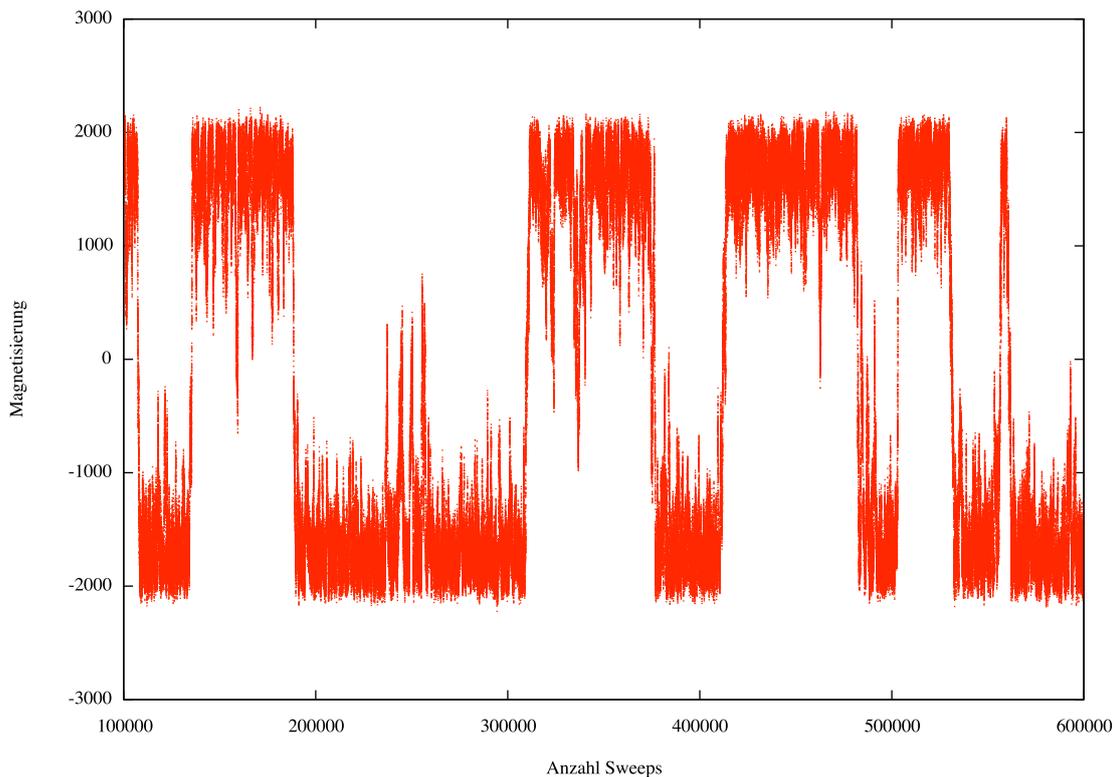


Abbildung 4.8: Ausschnitt der Magnetisierung bei $\beta = 0.44$ eines $L^2 = 50^2$ Systems erzeugt mit dem Metropolis Algorithmus.

Welche Konsequenzen hat dies nun für die Berechnung der Suszeptibilität? Dazu rufe man sich noch einmal deren Definition nach (2.6) in Erinnerung. Stabilisiert sich das System nun über den gesamten Messbereich in einem bestimmten Magnetisierungszustand, so dass gilt $\overline{\mathcal{M}} \approx \pm L^d$, summieren sich beiden Terme in (2.6) zu einer Suszeptibilität von ungefähr null.

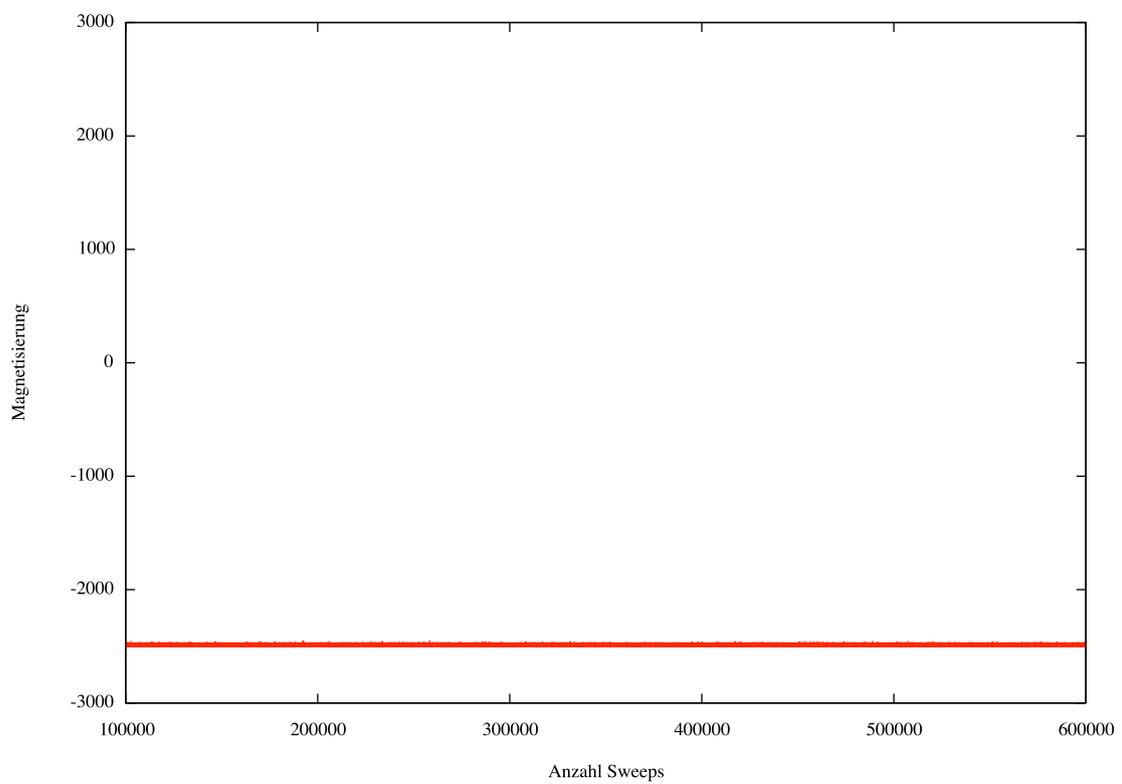


Abbildung 4.9: Ausschnitt der Magnetisierung bei $\beta = 0.8$ eines $L^2 = 50^2$ Systems erzeugt mit dem Metropolis Algorithmus.

Für $d = 2$ gilt es, die Fehleranalyse besonders sorgfältig durchzuführen. Nähert sich das System mit zunehmendem Wert von β dem Phasenübergang, so sind die Daten über eine immer grösser werdende Anzahl von Sweeps miteinander korreliert. In dieser Region divergiert die Korrelationslänge ξ und nach (2.46) entsprechend die Autokorrelationszeit τ . Die Divergenz der Korrelationslänge erstreckt sich bei endlichem Volumen jedoch nur über die Länge L des Gitters. Das Phänomen Critical Slowing Down wirkt sich zudem für den Metropolis Algorithmus besonders gravierend aus, da dieser einen hohen Wert für den dynamisch kritischen Exponenten z aufweist (vgl. Kapitel 2.5). Als Folge davon wachsen die Fehler in der Annäherung an den kritischen Bereich immer mehr an. Dies geschieht in solchem Masse, dass das entsprechende Programm den zu bestimmenden Fehler nicht mehr korrekt berechnen kann. Dieser fällt plötzlich, bevor er sich auf einem Plateau stabilisieren konnte, aufgrund einer durch das Binning Verfahren entstandenen zu kleinen Restmenge an Datenpunkten, stark ab. Da ein solch berechneter Fehler keine korrekte Aussage mehr macht, wird er manuell auf null gesetzt. Die korrekt berechneten Fehler sind wiederum so klein, dass sie auf der Abbildung nicht sichtbar sind.

Abbildung 4.10 zeigt die Autokorrelationsfunktion $\mathcal{C}_O(t) \propto \exp(-t/\tau)$ für ein 4^2 Gitter. Deutlich ist zu erkennen, wie die Autokorrelationszeit τ mit zunehmendem β ansteigt. Für $\beta = 0.5$ und $\beta = 0.6$ befindet sich das System in der gebrochenen Phase, d.h. $T < T_c$.

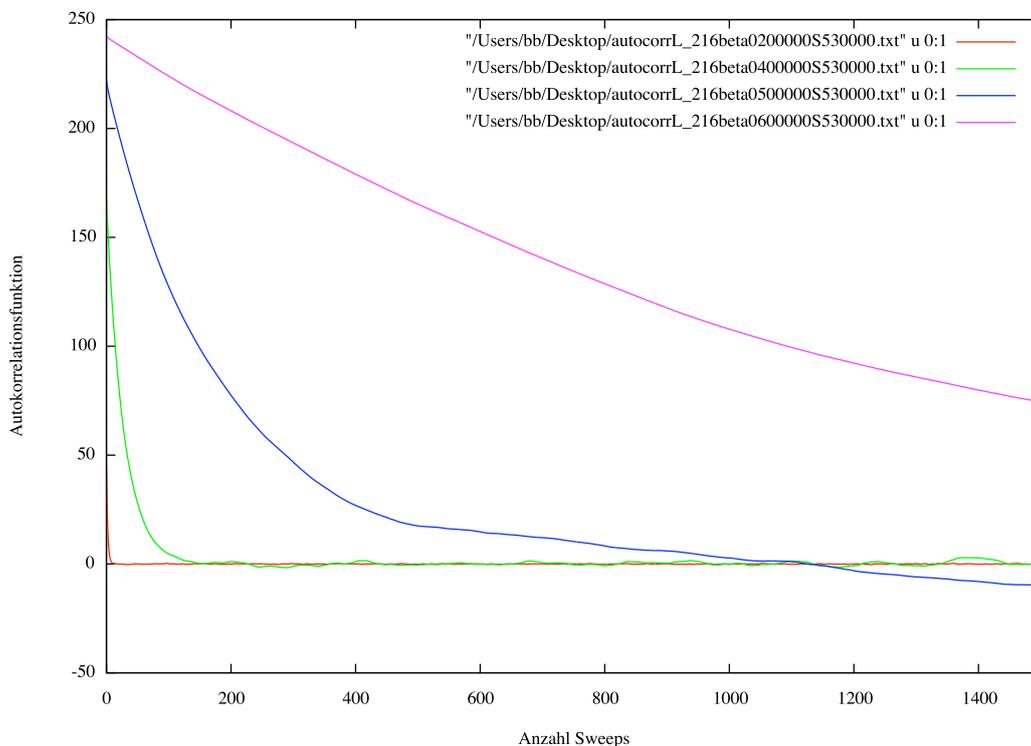


Abbildung 4.10: Autokorrelationsfunktion für ein 4^2 Gitter: rot: $\beta = 0.2$, grün: $\beta = 0.4$, blau: $\beta = 0.5$, violett: $\beta = 0.6$.

4.4 Messresultate $d = 2$ mit Swendsen-Wang Cluster Algorithmus

Die Diskussion der Messresultate soll hier eingeführt werden durch die Abbildung 4.11 (a - e).¹ Die einzelnen Bilder zeigen die Spinkonfigurationen eines $L^2 = 100^2$ Systems im Gleichgewicht, erzeugt mit dem hier diskutierten Algorithmus für verschiedene Werte von β . Die nach oben gerichteten Spins mit Wert $s_x = +1$ sind jeweils durch schwarze Quadrate dargestellt. Entsprechend repräsentieren weisse Flächen Spins, die nach unten ausgerichtet sind ($s_x = -1$). Der Leser sei hier ausdrücklich darauf hingewiesen, dass die auf den Bildern zu sehenden Bezirke gleichgerichteter Spins im Allgemeinen nicht identisch sind mit den vom Algorithmus erzeugten Clustern. Diese Unterscheidung ist deshalb zu treffen, weil der Algorithmus gleichgerichtete Spins nur mit der Wahrscheinlichkeit p_{bond} durch einen Bond verbindet. Abbildung (a) zeigt eine Konfiguration für $T > T_c$ (oder $\beta < \beta_c$). Es ist deutlich zu erkennen, dass ungefähr gleich viele Spins nach oben wie nach unten zeigen und somit gilt $\mathcal{M} \approx 0$. Dabei sind die Regionen paralleler Spins klein. Klein ist in diesem Temperaturbereich auch $p_{bond} = 1 - \exp(-2\beta J)$ und somit die Wahrscheinlichkeit, dass gleichgerichtete Spins in denselben Cluster gehören. Der Cluster Algorithmus berücksichtigt hiermit die physikalische Eigenschaft einer kurzen Korrelationslänge. Somit werden nur kleine Bezirke paralleler Spins umgeklappt. Die Abbildung (b) zeigt eine Spinkonfiguration nahe bei T_c . Die Bezirke gleichgerichteter Spins sind nun erheblich grösser geworden. Der ebenfalls zugenommenen Korrelationslänge, trägt der Algorithmus durch Bildung grösserer Cluster wiederum Rechnung. Die Konfiguration erzeugt aber immer noch eine Magnetisierung $\mathcal{M} \approx 0$, was ein Zeichen dafür ist, dass sich das System noch in der symmetrischen Phase befindet. Abbildung (c) hingegen zeigt eine klare Dominanz eines Magnetisierungszustandes. In diesem Bild zeigt der grösste Anteil an Spins nach unten und somit resultiert eine Magnetisierung $\mathcal{M} \neq 0$. Das System befindet sich jetzt in der gebrochenen Phase. Noch deutlicher wird dies in der Abbildung (d) für einen Wert von $\beta = 0.5$. Hier ist die Magnetisierung $\mathcal{M} \approx 100^2$. Die Korrelationslänge erstreckt sich nun annähernd über das gesamte Gitter. Entsprechend umfasst ein Cluster beinahe alle Spins. Genau in diesem Bereich zeigt sich der Cluster Algorithmus aufgrund seiner Konstruktionsweise klar effizienter als der Metropolis Algorithmus. Durch die jetzt vorherrschende Clustergrösse kann der S.-W. Algorithmus bereits nach einem Sweep das System mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% in den entgegengesetzten Magnetisierungszustand ($\mathcal{M} \approx -100^2$) führen. Ein solcher Magnetisierungszustand ist auf Abbildung (e) zu sehen. Dies erreicht der Metropolis Algorithmus wie gezeigt erst nach einer entsprechend grossen Anzahl Sweeps. Abbildung 4.12 zeigt einen Ausschnitt der Magnetisierungswerte für ein $L = 100^2$ System bei einem Wert $\beta = 0.8$. Es ist klar zu erkennen, wie leicht es dem Cluster Algorithmus fällt, auch bei einer Temperatur deutlich unterhalb T_c zwischen den beiden Magnetisierungszuständen zu wechseln. Die Effizienz des Cluster Algorithmus verursacht also in der gebrochenen Phase über den gesamten Messbereich (Anzahl Sweeps) eine mittlere Magnetisierung $\overline{\mathcal{M}}$ von annähernd null.

¹Die Bilder wurden erstellt mit MATLAB Version 7.4.0.287.

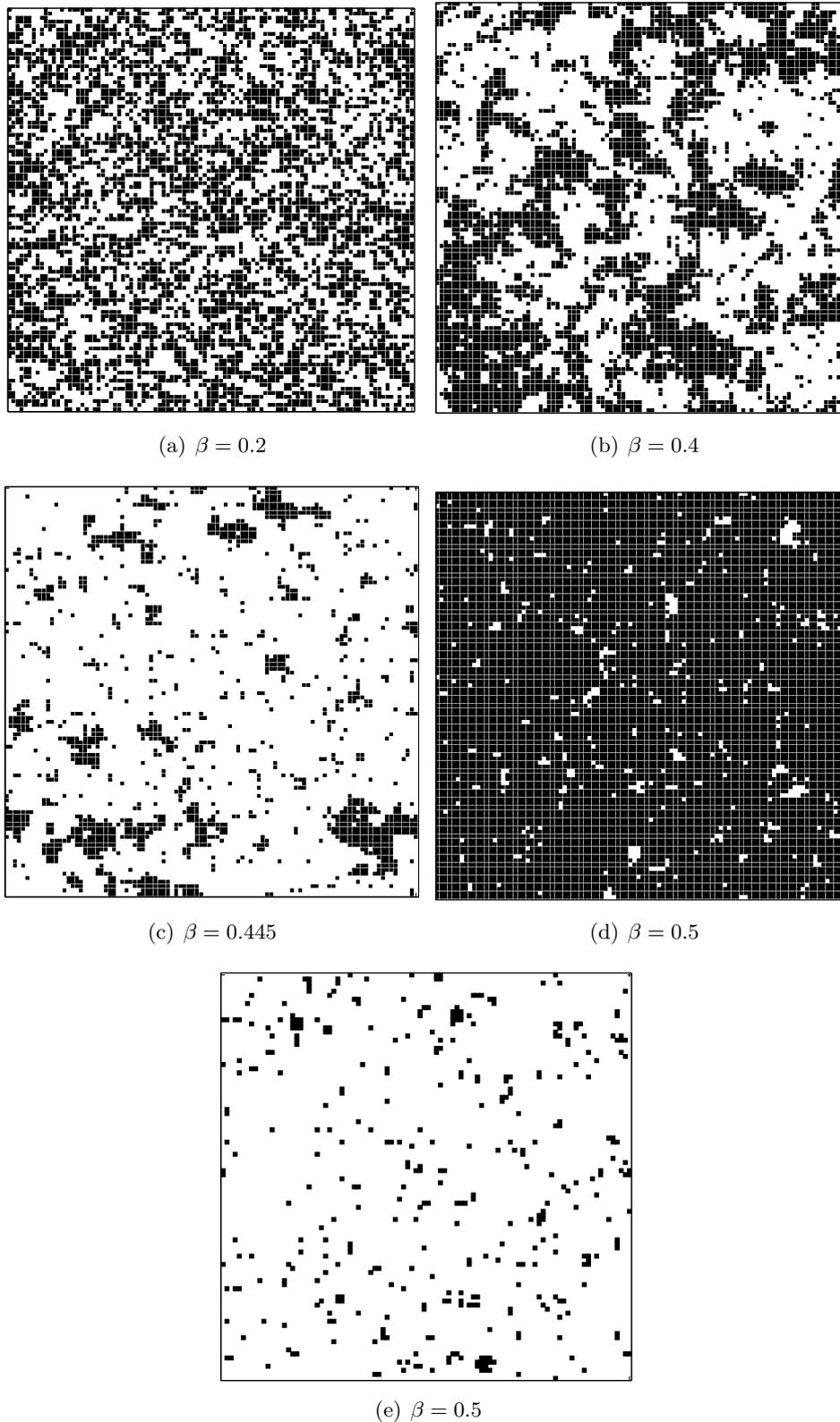


Abbildung 4.11: Spinkonfigurationen im Gleichgewicht für ein System mit 100^2 Spins, erzeugt mit dem Swendsen-Wang Cluster Algorithmus.

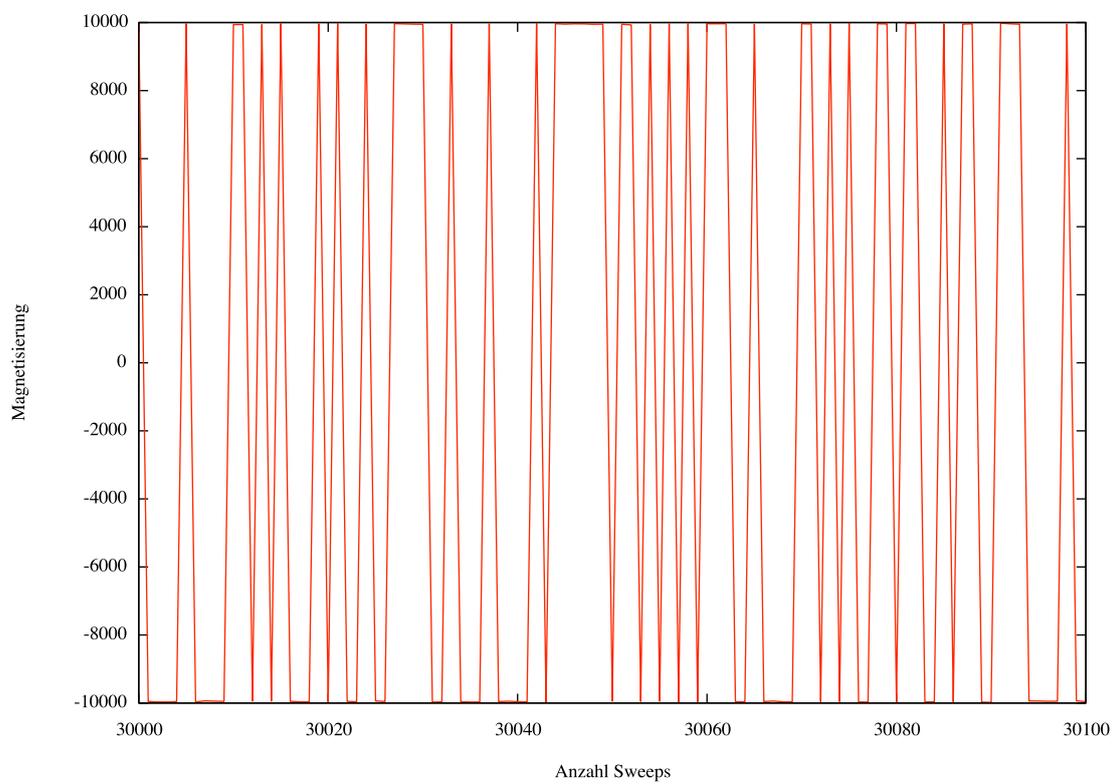


Abbildung 4.12: Ausschnitt der Magnetisierung bei $\beta = 0.8$ eines $L^2 = 100^2$ Systems, erzeugt mit dem S.-W. Cluster Algorithmus.

Die Abbildung 4.13 zeigt den Verlauf der Suszeptibilität für ein System der Grösse $L^2 = 100^2$. Im Vergleich mit Abbildung 4.7 fällt auf, dass die Suszeptibilität nicht mehr plötzlich auf null abfällt. Dies aufgrund der bereits erwähnten Tatsache, dass der Cluster Algorithmus über den gesamten Messbereich eine mittlere Magnetisierung $\overline{\mathcal{M}}$ von annähernd null erzeugt. Vielmehr approximiert χ mit zunehmendem β -Wert die Systemgrösse. Der Vergleich der Abbildungen und der entsprechenden numerischen Resultate zeigt aber auch, dass die Kurve auf Abbildung 4.7 mit derjenigen auf Abbildung 4.13 für grosse Temperaturen gut übereinstimmt. Im Bereich kleiner β -Werte ist der Metropolis Algorithmus, auch aufgrund seiner einfachen Implementierung, also ein sehr guter Algorithmus.

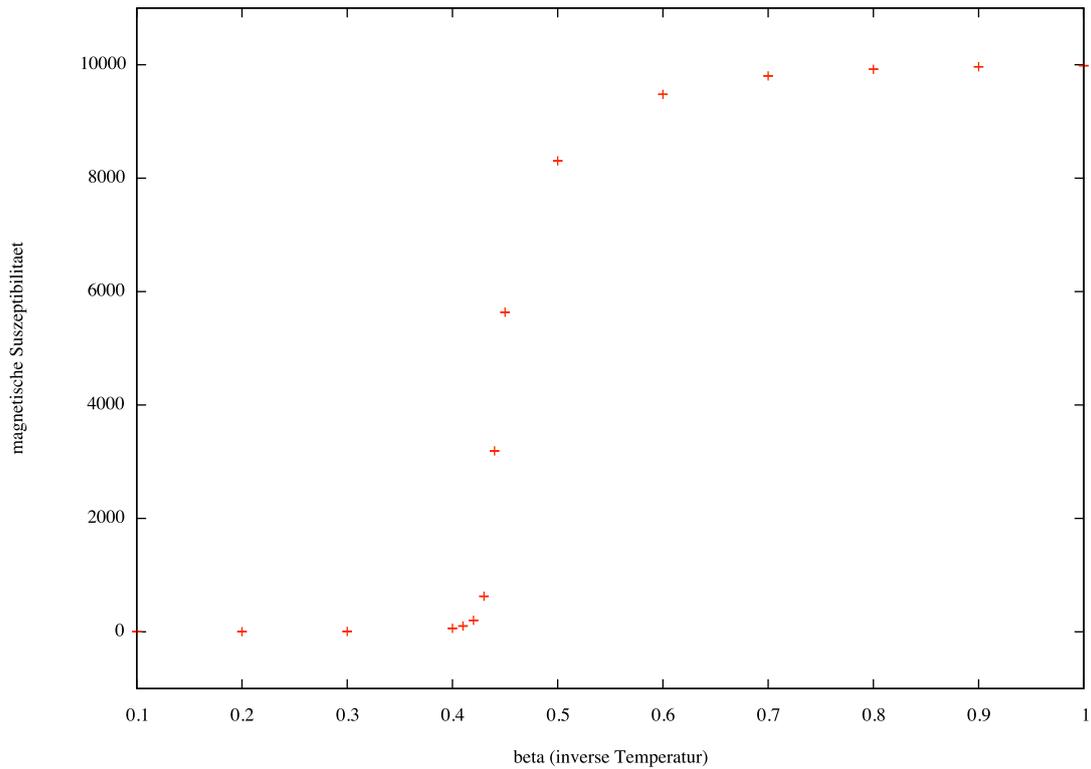


Abbildung 4.13: Messreihe Ising-Modell $d = 2$ mit S.-W. Cluster Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L^2 = 100^2$.

Der kleine Wert $z = 0.25 \pm 0.01$ des dynamisch kritischen Exponenten für den S.-W. Cluster Algorithmus in zwei Dimensionen, hat eine entsprechend kurze Autokorrelationszeit τ zur Folge. Der Bereich korrelierter Daten ist also sehr klein, und entsprechend lassen sich auch die Fehler im Bereich des Phasenüberganges problemlos berechnen. Aufgrund ihrer geringen Grösse sind sie auf Abbildung 4.13 nicht zu sehen.

Danksagung

Mein ganz herzlicher Dank geht an Prof. Uwe-Jens Wiese für eine optimale Betreuung dieser Arbeit. Seine flexible Bereitschaft und seine Geduld mit der er Fragen zu beantworten vermag, haben mich sehr beeindruckt. Ein weiterer Dank geht an den Assistenten Matthias Nyfeler, der jeder frustrierenden Fehlersuche mit seinem scharfen Blick ein jähes Ende bereiten konnte. Bei meinem Studienkollegen Marcel Wirz möchte ich mich für seine hartnäckigen Fragen und die intensiven Diskussionen bedanken. Es war eine sehr gute Zusammenarbeit. Es bleibt noch allen Anderen zu danken, die in irgendeiner Form dazu beigetragen haben, dass diese Arbeit entstehen konnte. Ich denke da an Manuel Weber, dessen Matlab Kenntnisse mir geholfen haben, die schönen Konfigurationsbilder zu erstellen. Ein besonders grosser Dank geht an meine Eltern und insbesondere an meine Mutter. Ihr Vertrauen und ihre Unterstützung haben mich als ständige Begleiter schlussendlich dahin gebracht, wo ich jetzt bin.

Ein unaussprechlicher Dank geht an meine liebe Eva, die den Physiker in mir immer und immer wieder ertragen muss.

Anhang A

Messresultate

β	χ	$\Delta\chi$	$\chi_{analytic}$	$\overline{\mathcal{M}}$	$\Delta\overline{\mathcal{M}}$
0.1	1.221432	0.001358	1.221162	-0.001078	0.002427
0.2	1.487667	0.001530	1.487303	-0.002651	0.003098
0.3	1.794420	0.001744	1.796062	-0.006138	0.004050
0.4	2.134003	0.001971	2.134673	-0.005026	0.005333
0.5	2.482476	0.002106	2.481163	0.000574	0.006900
0.6	2.810332	0.002197	2.810156	-0.005310	0.009121
0.7	3.097927	0.002135	3.100519	0.011194	0.011646
0.8	3.338010	0.002005	3.340501	0.011467	0.014547
0.9	3.529010	0.001794	3.528234	-0.000738	0.018722
1.0	3.667023	0.001571	3.668848	0.001417	0.023769
1.1	3.768087	0.001374	3.770771	-0.013927	0.028947
1.2	3.843374	0.001141	3.842902	-0.002157	0.034085
1.3	3.893024	0.001034	3.893089	0.018633	0.042600
1.4	3.927437	0.001699	3.927595	-0.055681	0.054171
1.5	3.951651	0.001445	3.951128	0.040207	0.064349

Tabelle A.1: Messreihe Ising-Modell $d = 1$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L = 4$.

β	χ	$\Delta\chi$	$\chi_{analytic}$	$\overline{\mathcal{M}}$	$\Delta\overline{\mathcal{M}}$
0.1	1.221361	0.001719	1.221403	0.000149	0.013231
0.2	1.493722	0.002226	1.491825	0.013369	0.016645
0.3	1.821195	0.002985	1.822119	-0.009161	0.020956
0.4	2.225623	0.004183	2.225541	0.013968	0.027410
0.5	2.713555	0.005826	2.718282	0.008591	0.035435
0.6	3.316045	0.008396	3.320117	-0.019567	0.047641
0.7	4.055106	0.012012	4.055200	-0.170847	0.060929
0.8	4.936939	0.017730	4.953032	0.080410	0.082517
0.9	6.026180	0.024744	6.049647	0.119871	0.111819
1.0	7.345994	0.037179	7.389056	-0.260889	0.142451
1.1	8.979362	0.052088	9.025013	0.242540	0.189493
1.2	11.128059	0.076777	11.023176	-0.084665	0.262320
1.3	13.552646	0.113532	13.463729	-0.071672	0.355003
1.4	16.378711	0.152938	16.444477	1.061628	0.489254
1.5	20.326195	0.226811	20.083650	-0.628220	0.639209

Tabelle A.2: Messreihe Ising-Modell $d = 1$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L = 100$.

β	χ	$\Delta\chi$	$\overline{\mathcal{M}}$	$\Delta\overline{\mathcal{M}}$
0.1	1.567068	0.002106	-0.007114	0.006715
0.2	2.808190	0.004483	-0.008078	0.013021
0.3	5.725567	0.009380	0.010750	0.032336
0.4	10.504318	0.011735	-0.042341	0.091915
0.41	10.945423	0.011811	0.062586	0.102170
0.42	11.367536	0.011321	-0.090883	0.108253
0.43	11.775050	0.010930	-0.077105	0.126127
0.44	12.131896	0.010748	0.140917	0.137229
0.45	12.505303	0.010717	0.147919	0.152871
0.5	13.889049	0.000000	0.097281	0.000000
0.6	15.091980	0.000000	-1.584406	0.000000
0.7	15.693938	0.000000	-0.482227	0.000000
0.8	15.624729	0.000000	2.031437	0.000000
0.9	0.003760	0.000969	15.973543	0.000358
1.0	0.001558	0.000607	-15.988436	0.000223
1.1	0.000641	0.000384	15.995079	0.000140
1.2	0.000277	0.000247	-15.997850	0.000090
1.3	0.000135	0.000169	-15.998938	0.000062

Tabelle A.3: Messreihe Ising-Modell $d = 2$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L^2 = 4^2$.

β	χ	$\Delta\chi$	$\overline{\mathcal{M}}$	$\Delta\overline{\mathcal{M}}$
0.1	1.563324	0.002341	-0.034328	0.084596
0.2	2.859001	0.005727	0.050463	0.166064
0.3	7.193838	0.025498	-0.648682	0.475819
0.4	63.243859	0.851132	-4.225435	5.382911
0.41	101.922873	1.565439	12.157854	8.786439
0.42	195.983840	0.000000	0.318281	0.000000
0.43	457.541938	0.000000	-49.713221	0.000000
0.44	1006.558261	0.000000	-6.362402	0.000000
0.45	609.858286	0.000000	-1425.998173	0.000000
0.5	0.774912	0.466120	2278.215040	0.182233
0.6	0.098035	0.084937	-2434.020821	0.030875
0.7	0.027538	0.037811	2475.425716	0.013507
0.8	0.009748	0.021185	-2490.057407	0.007522
0.9	0.003802	0.012791	-2495.808075	0.004531
1.0	0.001571	0.008062	2498.188023	0.002853

Tabelle A.4: Messreihe Ising-Modell $d = 2$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L^2 = 50^2$.

β	χ	$\Delta\chi$	$\overline{\mathcal{M}}$	$\Delta\overline{\mathcal{M}}$
0.1	1.565603	0.002353	0.019501	0.169101
0.2	2.853365	0.005713	-0.465734	0.328993
0.3	7.200611	0.025512	-0.830059	0.955257
0.4	62.10103	0.836881	17.834568	10.939211
0.41	102.484294	1.518069	19.867741	19.445802
0.42	207.599095	0.000000	-28.023094	0.000000
0.43	597.740951	0.000000	-285.020298	0.000000
0.44	2885.035506	0.000000	-1902.298334	0.000000
0.45	17.277660	0.000000	7508.835844	0.000000
0.5	0.764113	0.898328	-9113.402138	0.349069
0.6	0.098247	0.170082	9736.031471	0.061780
0.7	0.027593	0.075537	9901.639191	0.026975
0.8	0.009744	0.042339	-9960.175720	0.015030
0.9	0.003810	0.025768	-9983.222372	0.009126
1.0	0.001571	0.016226	9992.752781	0.005741

Tabelle A.5: Messreihe Ising-Modell $d = 2$ mit Metropolis Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L^2 = 100^2$.

β	χ	$\Delta\chi$	$\overline{\sum_C C ^2}$	$\Delta\overline{\sum_C C ^2}$
0.1	1.567059	0.000020	15670.59	0.203952
0.2	2.859483	0.000085	28594.83	0.853731
0.3	7.242585	0.000541	72425.85	5.412001
0.4	62.664943	0.024683	626649.43	246.830834
0.41	102.470542	0.056129	1024705.42	561.285247
0.42	203.832296	0.176896	2038322.96	1768.964376
0.43	628.186730	1.012076	6281867.30	10120.755289
0.44	3190.794125	3.861795	31907941.25	38617.949631
0.45	5636.445597	1.390795	56364455.97	13907.945905
0.5	8305.803215	0.250033	83058032.15	2500.325192
0.6	9479.129980	0.081042	94791299.80	810.421130
0.7	9804.287108	0.040108	98042871.08	401.075551
0.8	9920.608081	0.023169	99206080.81	231.691511
0.9	9966.461539	0.014396	99664615.39	143.962349
1.0	9985.511486	0.009163	99855114.86	91.625325

Tabelle A.6: Messreihe Ising-Modell $d = 2$ mit S.-W. Cluster Algorithmus und 1048576 Sweeps im Gleichgewicht. Die Grösse des Systems beträgt $L^2 = 100^2$.

Literaturverzeichnis

- [1] U.-J. Wiese: *Physics with the Computer: The Ising Model with Monte Carlo Methods*, Institut für theoretische Physik, Universität Bern, September, 2005.
- [2] F. Niedermayer: *Notes on Monte Carlo Simulations of Systems in Thermal Equilibrium*, Institut für theoretische Physik, Universität Bern, September, 2005.
- [3] F. Niedermayer: *Statistical Physics II*, 2005.
- [4] M. E. J. Newman und G. T. Barkema: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Clarendon Press, Oxford, 2006.
- [5] K. Langfeld: *Ising Modell: Monte Carlo Sampling auf dem Gitter, Phasenübergänge*, www.tat.physik.uni-tuebingen.de/~kley/lehre/cp-prakt/projekte/projekt2.pdf, Stand: 6.7.2007.
- [6] L. Onsager: *Crystal statistics. 1. a two-dimensional model with an order disorder transition*, Phys. Rev. Lett., 65:117-149, 1944.
- [7] 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., 21:1087-1092, 1953.
- [8] R. H. Swendsen und J.-S. Wang: *Nonuniversal critical dynamics in monte carlo simulations*, Phys. Rev. Lett., 58:86-88, 1987.
- [9] T. Fliessbach: *Statistische Physik*, Lehrbuch zur Theoretischen Physik IV, 3. Auflage, Spektrum Akademischer Verlag GmbH, Heidelberg, 1999.
- [10] M. Lüscher: *A portable high-quality random number generator for lattice field theory simulations*, Computer Phys. Commun. 79 100-110, 1994.
- [11] <http://wwwasdoc.web.cern.ch/wwwasdoc/shortwrupsdir/v115/top.html>, Stand: 2.8.2007.
- [12] H. Erlenkötter: *C Programmieren von Anfang an*, 12. Auflage, Rowohlt Taschenbuch Verlag, Hamburg, 2006.