

Vorlesung

Monte-Carlo-Simulationen

Prof. Karsten Held

IFP – AG Computational Materials Science

Idee

Modellbildung in der Theoretischen Physik:

*Physikalisches Phänomen → Modell → exakte Lösung?
numerische Simulation*

Hier:

*Ferromagnetismus → Ising-Modell → exakt in $d = 1, 2, \infty$
Monte-Carlo-Simulation*

Diplom-/Projektarbeiten 23.06. 10:30 Raum 138C

Dank an N. Blümer für Bilder ...

1) Ising-Modell

Idee

Modell *wechselwirkender Spins* von
Lenz und Ising (1925)
 zur Beschreibung von *Ferromagneten*

Hamiltonian (Ising-Modell)

Klassische Spins $\sigma_i \in \{+1, -1\} = \{\uparrow, \downarrow\}$
 auf N Gitterplätzen i, j mit Magnetfeld \mathbf{B} ($\mu_B \equiv 1$; $g \equiv 2$):

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i$$

$\langle ij \rangle$: Summe über NN Paare, jedes Paar 1-fach gezählt

Allgemeiner: Heisenberg-Modell (Quanten-Spins)

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - \mu_B B \sum_i \vec{S}_i^z$$

Verallgemeinerung auf beliebige Wechselwirkung:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

- ferro- (antiferromagnetische) Kopplung: $J > 0$ ($J < 0$)
- $J = 0$ trivial (unabhängige Spins)
- wichtiger Fall: $B = 0$
- Eigenschaften hängen vom Gitter (insb. Dimension) ab

Ising- und Heisenberg-Modell beschreiben

Elektronen als lokalisierte Spins.

O.K. für einige Isolatoren, aber sicherlich nicht für Metalle.

Drosophila der klassischen statistischen Physik.

Kopplungskonstante J kann mit LDA berechnet werden.

Statistische Physik

Observable \mathcal{O} (klassisch):

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^3 x_1 \int d^3 p_1 \dots \int d^3 x_N \int d^3 p_N \mathcal{O}(x_1, p_1 \dots x_N, p_N) e^{-\beta E(x_1, p_1 \dots x_N, p_N)}$$

mit $\beta = 1/k_B T$ und Zustandssumme

$$Z = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^3 x_1 \int d^3 p_1 \dots \int d^3 x_N \int d^3 p_N e^{-\beta E(x_1, p_1 \dots x_N, p_N)}$$

z.B. Magnetisierung M im Ising-Modell

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sigma_i}_{\mathcal{O}(\sigma_1 \dots \sigma_N)} e^{-\beta H(\sigma_1 \dots \sigma_N)}$$

Observable \mathcal{O} (quantenmechanisch):

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Spur } \mathcal{O} e^{-\beta \mathcal{H}}$$

Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

Spezifische Wärme:

$$C = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

Freie Energie:

$$F = -k_B T \ln Z = E - TS$$

Suszeptibilität:

$$\chi = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = \frac{\partial M}{\partial B}$$

Weissche Molekularfeldtheorie des Ising-Modells

Mean-field (MF) Approximation: keine Korrelationen

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \stackrel{MF}{\approx} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle,$$

ähnlich wie Hartree-Approximation

Homogenes System: $(\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle \equiv \langle \sigma \rangle = m \text{ mit } m = M/N)$

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \\ &\stackrel{MF}{\approx} -J \sum_i \sigma_i \sum_{j \text{ NN. of } i} \langle \sigma \rangle - B \sum_i \sigma_i \\ &= -\underbrace{(B + qJ\langle \sigma \rangle)}_{B_{\text{eff}}} \sum_i \sigma_i \end{aligned}$$

q : Koordinationszahl (# nächster Nachbarn)

effektiver Einspin-Hamiltonian mit Selbstkonsistenzbedingung

Mean-field Zustandssumme

⇒ Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left(\sum_i \sigma_i \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right) \\ &= \left(\sum_{\sigma_i=\pm 1} \exp \left(\sigma_i \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right) \right)^N \\ &= \left(2 \cosh \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right)^N \end{aligned}$$

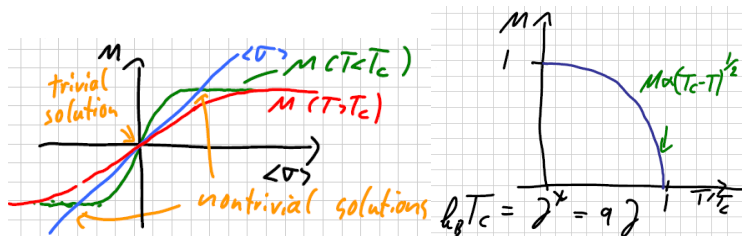
⇒ Magnetisierung:

$$m = \langle\sigma_i\rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \sigma_i \exp \left(\sum_i \sigma_i \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right) = \tanh \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T}$$

Mean-field Lösung (exakt für $d \rightarrow \infty$)

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \tanh \frac{B + qJ \langle \sigma \rangle}{k_B T}$$

Graphische Lösung (Bilder: N. Blümer) $k_B T_c = qJ$:



Anmerkung

Für $q \rightarrow \infty$ ($d \rightarrow \infty$) wird MF Lösung exakt.

Zentraler Grenzwertsatz:

Korrekturen zur MF Lösung $\sim 1/\sqrt{q} \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$.

Kritische Exponenten

Kritische Exponenten bei einem Phasenübergang 2. Ordnung
universell! (hängen nur von **d** und **Symmetrie und Dimension**
des Ordnungsparameters ab)

$$\left. \begin{array}{ll} \text{Magnetisierung} & m = m_0 \epsilon^\beta \\ \text{Suszeptibilität} & \chi = \chi_0 \epsilon^{-\gamma} \\ \text{Spezifische Wärme} & C = C_0 \epsilon^{-\alpha} \\ \text{Korrelationslänge} & \xi = \xi_0 \epsilon^{-\nu} \\ \text{Magnetisierung bei } T_c & m \propto B^{\frac{1}{\delta}} \end{array} \right\} \epsilon = \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

Mean-Field: $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0$, $\xi_0 = 0$, $\delta = 3$

Exakte Lösung in $d = 1, 2$

Ising-Modell: Lösung in $d = 1$

Kein Ferromagnetismus für $T > 0$ (Rechnung im Anschluss)

Ising-Modell: Lösung in $d = 2$ (Quadratgitter)

Kombination von Hoch- und Tief-Temperatur-Entwicklung

(Kramers, Wannier, 1941) Konzept der Dualität

$$k_B T_c = \frac{2}{\ln(\sqrt{2} + 1)} J \approx 2.2692 J$$

Onsager (1944) berechnete Zustandssumme Z

Kritische Exponenten: $\beta = \frac{1}{8}$, $\gamma = \frac{7}{4}$, $\alpha = 0$, $\nu = 1$, $\delta = 15$.

Exakte Lösung in $d = 1$

Ising-Modell $d = 1$, offene Kette, $B = 0$

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} = -J \sum_{i=2}^N \sigma_{i-1} \sigma_i$$

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta H(\sigma_1 \dots \sigma_N)}$$

Trick: definiere neue Variablen $\mathbf{s}_1 = \sigma_1$; $\mathbf{s}_i = \sigma_{i-1} \sigma_i$ für $i \geq 2$

$$\Rightarrow \sigma_i = \prod_{j=1}^i s_j$$

$$\Rightarrow H = -J \sum_{i=2}^N s_i$$

$$\begin{aligned} Z &= \left(\sum_{s_1=\pm 1} \right) \left(\sum_{s_2=\pm 1} e^{-\beta J s_2} \right) \dots \left(\sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta J s_N} \right) \\ &= 2(2 \cosh(\beta J))^{N-1} = 2^N [\cosh(\beta J)]^{N-1} \end{aligned}$$

Exakte Lösung in $d = 1$

$$Z = 2(2 \cosh(\beta J))^{N-1} = 2^N [\cosh(\beta J)]^{N-1}$$

$$\Rightarrow E(\beta) = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -(N-1) \tanh(\beta J)$$

∞ oft differenzierbar \Rightarrow kein Phasenübergang ($0 < T < \infty$)

Klassifikation nach Ehrenfest

- 1. Ordnung: 1. Ableitung von $F = -k_B T \ln Z$ nicht stetig
- 2. Ordnung: 1. Ableitung von F stetig, 2. Ableitung nicht stetig
(evt. divergent)

Monte-Carlo-Integration

Generisches Problem: Integral (oder Summe) über Volume V

$$I = \int_V d^d x f(\vec{x}); \quad V \subset \mathbb{R}^d \quad (1)$$

Wiederholung

Deterministischer Ansatz reguläres Gitter von Stützpunkten
(mit Abstand h):

$$\vec{x}_{\vec{n}} = h\vec{n} \quad (\vec{n} \in \mathbb{Z}^d) \quad (2)$$

Approximiere I durch diskrete Summe (*numerische Integration*):

$$I \approx h^d \sum_{\substack{\vec{n} \\ \vec{x}_{\vec{n}} \in V}} f(\vec{x}_{\vec{n}}) \alpha_{\vec{n}} \quad (3)$$

Problem

Fehler $\Delta I \sim h^s$ (z.B. h^2 für Trapez-Regel).

Rechenaufwand (zeit) $t \sim \#f(\vec{x}_n)$ Berechnungen

$$t \approx \frac{V}{h^d} \propto h^{-d} \Rightarrow \Delta I \propto h^s \propto t^{-\frac{s}{d}} \quad (4)$$

für großes d : sehr langsame Konvergenz

Beispiel

Integrationsmethode 2. Ordnung (h^2) in $d = 200$ Dimensionen.
Halbierung des Fehlers: Computer-Zeit muss erhöht werden
um $2^{100} \approx 10^{30}$.

Integration nicht mehr möglich!

Monte-Carlo-Integration

Alternative: *stochastischer Ansatz*

(i) Monte Carlo (MC) ohne Gewichtung (simple MC)

$$I_N = V \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{x}_i) \quad (5)$$

mit *Zufalls*koordinaten gemäß Gleichverteilung $p(\vec{x}_i) = \frac{1}{V}$

Merke

Zentraler Grenzwertsatz: (σ_f^2 : Varianz von f über V):

$$\Delta I_N = \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \quad (6)$$

d.h. Fehler $\Delta I_N \sim t^{-\frac{1}{2}}$

Bereits für $d \geq 5$, konvergiert das MC Verfahren schneller als die h^2 Trapezregel (mit $\Delta I_N \sim t^{-2/5}$)

Monte-Carlo-Integration

Beispiel $d = 200$: 1/2 Fehler durch 4mal längeres t (statt 10^{30}).

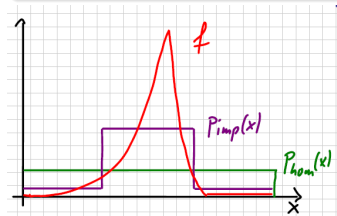
Problem

Oft ist die Varianz σ_f^2 groß, z.B. in der Statistischen Physik wegen des Boltzmann Faktors $\exp(-\beta E(\vec{x}))$

(ii) Monte-Carlo mit Gewichtung ("importance sampling")

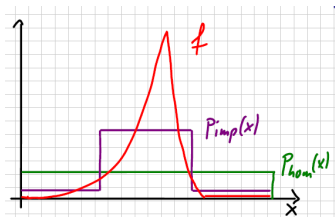
Idee

Konzentriere \vec{x}_i auf Regionen von V mit großem Beitrag zu I



Formal: Teile $f(\vec{x}) = p(\vec{x}) o(\vec{x})$
 in $p(\vec{x}) > 0$, $\int_V d^d x p(\vec{x}) = 1$
 und Observable $o(\vec{x})$.

Monte-Carlo-Integration



Formal: Teile $f(\vec{x}) = p(\vec{x}) o(\vec{x})$
 in $p(\vec{x}) > 0$, $\int_V d^d x p(\vec{x}) = 1$
 und Observable $o(\vec{x})$.

$$I = \int_V d^d x f(\vec{x}) = \int_V d^d x p(\vec{x}) o(\vec{x}) \quad (7)$$

$$\approx V \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N o(\vec{x}_i) \quad \text{mit Zufalls } \vec{x}_i \text{ gemäß } p(\vec{x}) \quad (8)$$

$$\Delta I_N = \frac{\sigma_o}{\sqrt{N}}; \quad \text{mit } \sigma_o \ll \sigma_f \text{ bei guter Wahl} \quad (9)$$

Monte-Carlo-Integration

Problem

Wie erzeuge ich Zufallszahlen gemäß $p(x)$?

Idee

(iii) Markov-Kette, Metropolis-Algorithmus

Generiere Konfigurationen x_1, x_2, \dots, x_n gemäß $p(x)$.

Markov-Kette: Jede Konfiguration \vec{x}_n hängt *nur* vom Vorgänger \vec{x}_{n-1} ab (kein Memory).

Sei $W(x'|x)$ Wahrscheinlichkeit für $x_n = x'$ in Schritt n wenn $x_{n-1} = x$.

Dann gilt die **Master-Gleichung**

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + \int_{x'} W(x|x') p_{n-1}(x') - \int_{x'} W(x'|x) p_{n-1}(x) \quad (10)$$

Monte-Carlo-Integration

Eine hinreichende Bedingung für die Stationarität

$p_n(x) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} p_{eq}(x)$ ist die **detaillierte Balance** der W 's:

$$W(x|x')p_{eq}(x') = W(x'|x)p_{eq}(x) \quad \forall x, x' \quad (11)$$

Markov-Ketten Monte-Carlo-Algorithmus: Markov-Kette mit
(i) detaillierter Balance und (ii) Ergodizität (alle Konfigurationen vom Startpunkt erreichbar)

\Rightarrow Konfigurationen x_i gemäß Wahrscheinlichkeit $p_{eq}(x)$

Metropolis-Algorithmus:

$$W(x'|x) = \min\{1, r\}; \text{ mit } r = \frac{p_{eq}(x')}{p_{eq}(x)} \quad (12)$$

Metropolis-Algorithmus hat höchst mögliche Akzeptanzrate

In Statistischer Physik: Boltzmann Gewicht $p_{eq}(x) = e^{-\beta E(x)} / Z$

Monte-Carlo-Integration

Algorithmus:

Wähle Anfangskonfiguration x

- ① Wähle neue Konfiguration x'
- ② Berechne $r = e^{-\beta[E(x')-E(x)]}$
- ③ Erzeuge Zufallszahl $rand \in [0, 1)$
- ④ Wenn $rand \leq \min(1, r)$ akzeptiere neue Konfiguration $x \equiv x_{n+1} = x'$, sonst behalte x .
- ⑤ Berechne Observablen
- ⑥ Mache bei 1.) N_{mal} weiter
- ⑦ Berechne Mittelwerte, Standardabweichungen ...

Beachte (i): Die ersten Werte können nicht genommen werden, da vom Startpunkt abhängig ($p_n(x)$ noch nicht stationär).

Typische Wahl: 1%-10% warm-up runs.

Beachte (ii): in 2.) z.B. $x' = x + (rand_2 - 0.5) \times \text{stepsize}$

Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

Idee

Modell *wechselwirkender Spins* von
Lenz und Ising (1925)
zur Beschreibung von *Ferromagneten*

Hamiltonian (Ising-Modell)

Klassische Spins $\sigma_i \in \{+1, -1\} = \{\uparrow, \downarrow\}$
auf N Gitterplätzen i, j mit Magnetfeld \mathbf{B} ($\mu_B \equiv 1$; $g \equiv 2$):

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i$$

$\langle ij \rangle$: Summe über NN Paare, jedes Paar *1-fach* gezählt

Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

Numerische Simulation \rightarrow endliches System

Problem

Kein Phasenübergang da

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta H(\sigma_1 \dots \sigma_N)} \quad (13)$$

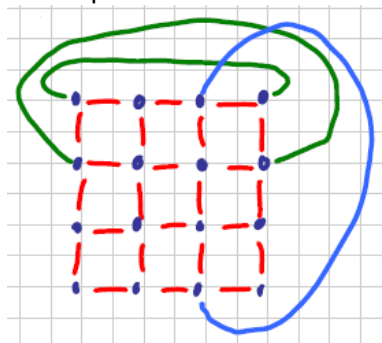
∞ -oft differenzierbar (analytische Funktion)

\Rightarrow "finite size scaling" wichtig und schwierig

Randbedingungen

endliches System \rightarrow Randbedingungen wichtig

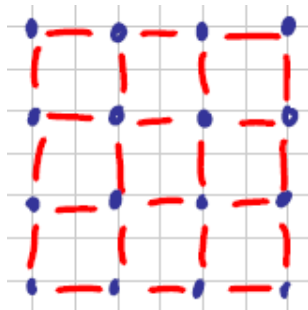
- periodische Randbedingungen
 \Rightarrow alle Gitterplätze equivalent



Randbedingungen

endliches System \rightarrow Randbedingungen wichtig

- offene Randbedingungen
 \Rightarrow Innen \neq Oberfläche

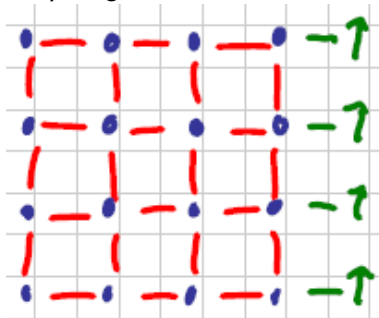


Randbedingungen

endliches System \rightarrow Randbedingungen wichtig

- fixierte Randbedingungen:

Kooplung an externes Medium



Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

Single-Spin-Flip-Algorithmus

Wähle Anfangs Spin-Konfiguration $x = \{\sigma_i\}$

- ① Wähle Gitterplatz i , x' ist gleich x außer $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$
- ② Berechne $\Delta E = E_{\{\sigma_1 \dots -\sigma_i \dots \sigma_N\}} - E_{\{\sigma_i\}}$
- ③ Wenn Zufallszahl $rand \in [0, 1) < \min(1, r = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}})$,
flippe Spin ($\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$); sonst behalte σ_i
- ④ nach warm-up(!):
nach jedem "sweep" ($\equiv N$ versuchte Spin-Flips):

$$n_{sum+} = 1, m_{sum+} = mag\{\sigma_i\}, E_{sum+} = E\{\sigma_i\} \quad (14)$$

- ⑤ genug sweeps?
 - ja: Berechne Mittelwerte und Fehler
 - nein: weiter bei 1.

Beachte: ΔE hängt nur von den Nachbarn von i ab
 \Rightarrow einfach zu berechnen!

Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

Ising-Modell (Nächst-Nachbar-WW) - kritische Temperatur

dim	lattice	q	$\frac{k_B T_c}{J}$	$\frac{k_B T_c}{qJ}$
1	chain/ring	2	0	0
2	honeycomb	3	~ 1.52	~ 0.5
	square	4	2.269	0.57
	triangular	6	~ 3.64	~ 0.61
3	diamond	4	~ 2.704	~ 0.68
	cubic	6	~ 4.512	~ 0.75
	bcc	8	~ 6.35	~ 0.79
	fcc	12	~ 9.79	~ 0.82
4	hypercubic	8	~ 6.68	~ 0.84
∞	"	∞	∞	1.0

vorwiegend aus *P. Meyer, PhD Thesis, Univ. of Derby (2000)*

- Phasenübergänge für alle Gitter in $d > 1$
- $T_c \xrightarrow{q \rightarrow \infty} \frac{qJ}{k_B}$

Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

Kritische Exponenten des Ising-Modells in $d = 3$

$$\alpha = 0.110(1); \quad \beta = 0.3265(3); \quad \gamma = 1.2372(5);$$

$$\delta = 4.789(2); \quad \nu = 0.6301(4); \quad \eta = 0.0364(5); \quad \omega = 0.84(4)$$

Pelissetto, Vicari, Physics Reports 386, 549 (2002)

$$\left. \begin{array}{ll} \text{Magnetisierung} & m = m_0 \epsilon^\beta \\ \text{Suszeptibilität} & \chi = \chi_0 \epsilon^{-\gamma} \\ \text{Spezifische Wärme} & C = C_0 \epsilon^{-\alpha} \\ \text{Korrelationslänge} & \xi = \xi_0 \epsilon^{-\nu} \\ \text{Magnetisierung bei } T_c & m \propto B^{\frac{1}{\delta}} \end{array} \right\} \epsilon = \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

Zum Vergleich:

mean field $d \geq 4$: $\alpha = 0, \beta = 1/2, \gamma = 1, \nu = 1/2$

$d = 2$: $\alpha = 0, \nu = 1, \beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4}, \delta = 15$