Einführung in Monte-Carlo-Simulationsmethoden: vom Ising-Modell zur Gittereichtheorie
Teil 1: Ising-Modell

Georg Bergner

TPI FSU Jena
WWU Münster

Organisatorisches

- Zwei Blöcke: 1) Ising-Modell, 2) SU(2) Yang-Mills-Theorie
- Vorlesung und Übungen: Praktische Einführung zur konkreten Implementierung

Ziele:

- Kritische Phänomene in Spin-Modellen
- Monte-Carlo Simulationen: Metropolis-Algorithmus
- Eichtheorie und Eichprinzip
- Simulationen nicht-perturbativer Effekte (Confinement)

Organisatorisches

Online-Kurs:

- Vorlesung: 27.4. (10:00-11:30), 29.4. (15:00-16:30), 7.5. (10:00-11:30)
- Übungen: 30.4. (10:00-11:30), Aufgaben und erste Hilfestellungen
- Übungen: 4.5. (10:00-11:30), Lösungen/weiter Hilfestellungen (Diskussion per shared screen)
- Übungen: 6.5. (15:00-16:30), Weiterführende Aufgaben, Hilfestellungen
- Vorlesung am 29.4.: Als Test, Aufzeichnung im LearnWeb

LearnWeb: sim_ising_20

Motivation und Aufbau der Vorlesung

Ziel ist Quantenfeldtheorie auf dem Gitter:

- Teilchenphysik: relativistische Quantentheorie
- Pfadintegral-Formulierung
- Nicht-perturbative Methode: Simulationen auf Raum-Zeit-Gitter

Zugang über klassische statistische Mechanik:

- Raum-Zeit-Gitter (euklidisch) $\leftrightarrow$ Kristall-Gitter
- Pfad $x(t)$ $\leftrightarrow$ Spin-Konfiguration
- $\exp(-S_E[x]/\hbar) \leftrightarrow \exp(-H(\{s\})/(k_B T))$
- Kontinuumslimes $\leftrightarrow$ kritische Phänomene (Phasenübergänge)

Ziel der ersten Vorlesung: Ising-Modell

- Verständnis der Physik des Modells
- Einführung der thermodynamischen Größen und Observablen für die Simulation
- Verständnis der analytischen Ergebnisse, die als Vergleich für die Numerik dienen
- Einführung analytischer Verfahren, die ein vergleichbares Gegenstück in der QFT haben

Das Ising-Modell

Vereinfachte Darstellung eines Ferromagneten:

- elementare Magneten (Spins $s_x \in \{-1, 1\}$) in einem Kristall-Gitter
- Beobachtung für $T < T_c$ (Curie-Temperatur): spontane Magnetisierung
- Erste Näherung: nur Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung

$$H(\{s_x\}) = -J \sum_{<x,y>} s_x s_y - h \sum_x s_x$$

  $< x, y >$ Paare von nächsten Nachbarn; h externes magnetisches Feld
- ferromagnetisch: $J > 0$, antiferromagnetisch $J < 0$

Das Ising-Modell, historische Anmerkungen

- 1920: W. Lenz, E. Ising: Lösung in 1D (keine spontane Magnetisierung)
- 1936: R. Peierls: Beweis für spontane Magnetisierung in 2D
- 1944: L. Onsager: Analytische Lösung in 2D

In $D > 2$ keine analytische Lösung.
Näherungsverfahren:

- Hoch- und Tieftemperaturentwicklung
- Mean-Field-Näherung
- Numerische Simulation ...

Ising-Modell hat sich zu einem Standard-Modell für die statistische Physik entwickelt, an dem immer wieder neue Methoden getestet werden. (Auch modernste Verfahren wie conformal bootstrap oder tensor networks.)

Beschreibung des kanonischen Ensembles

- Gitter Λ: $x = (x^1, \dots, x^d)$, $x^\mu = n^\mu a$, $n^\mu = 1, \dots, N^\mu$, $L^\mu = aN^\mu$, $V = \prod_{\mu=1}^d L^\mu$, (hier $a = 1$)
- Spin an jedem Gitterpunkt: $s_x \in \mathcal{T}$, Ising-Modell: $\mathcal{T} = \{-1, 1\}$
- Konfiguration $w = \{s_x | x \in \Lambda\}$, $w : \Lambda \to \mathcal{T}^V = \mathcal{T} \times \mathcal{T} \times \dots$
- Thermische Zustandssumme ($\beta = 1/(k_B T)$)

$$Z_V(\beta, J, h) = \sum_{\{s_x\}} \exp(-\beta H(\{s_x\}))$$

- P Wahrscheinlichkeit für Konfiguration $\{s_x\}$ im thermischen Ensemble:

$$P(\{s_x\}, \beta, J, h) = \frac{1}{Z_V(\beta, J, h)} \exp(-\beta H(\{s_x\}))$$

Thermodynamische Größen

- thermische Mittelwerte von Observable O

$$\langle O \rangle_V(\beta, J, h) = \frac{1}{Z_V(\beta, J, h)} \sum_{\{s_x\}} O(\{s_x\}) \exp(-\beta H(\{s_x\}))$$

- z. B. (makroskopische) Magnetisierung im Volumen V:

$$M_V = \frac{1}{V} \sum_x s_x; \quad \langle M \rangle_V = -\frac{\partial}{\partial h} f_V(\beta, J, h)$$

- Freie Energie, freie Energiedichte

$$F_V(\beta, J, h) = -\frac{1}{\beta} \log Z_V(\beta, J, h); \quad f_V(\beta, J, h) = \frac{1}{V} F_V(\beta, J, h)$$

Thermodynamische Größen

- innere Energie

$$U_V(\beta, J, h) = \langle H \rangle = -\frac{1}{Z_V}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_{\{s_x\}} \exp(-\beta H(\{s_x\})) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z_V(\beta, J, h)$$

- magnetische Suszeptibilität

$$\chi_M = \frac{\partial}{\partial h}\langle M \rangle_V = \beta(\langle M^2 \rangle_V - \langle M \rangle_V^2)$$

- spezifische Wärme

$$C_V = \frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial T}U_V = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

Korrelationsfunktionen und Korrelationslänge

- Korrelationsfunktionen

$$G^{(n)}(x_1, \ldots, x_n) = \langle s_{x_1} s_{x_2} \ldots s_{x_n} \rangle$$

- Zweipunkt-Korrelationsfunktionen

$$G^{(2)}(x_1 - x_2) = \langle s_{x_1} s_{x_2} \rangle \sim \exp(-|x_1 - x_2|/\xi)$$

  wobei ξ die Korrelationslänge ist.
- für große Abstände: Clustering

$$\langle s_{x_1} s_{x_2} \rangle \approx \langle s_{x_1} \rangle \langle s_{x_2} \rangle$$

- Daher für $\langle M \rangle \neq 0$:

$$\tilde{G}^{(2)}(x_1 - x_2) = \langle s_{x_1} s_{x_2} \rangle - \langle s_{x_1} \rangle \langle s_{x_2} \rangle \sim \exp(-|x_1 - x_2|/\xi)$$

Phasendiagramm des Ising-Modells

Externes Magnetfeld:

- Anordnung der Spins entlang dem Magnetfeld, thermische Fluktuationen wirken entgegen

$h \to 0$:

- niedrige Temperatur: geordnete Spins, spontane Magnetisierung ($M_{+/-}$ für $h \to 0_{+/-}$)
- hohe Temperatur: thermische Fluktuationen, ungeordnete Spins

Zwischen beiden Phasen kann es einen Phasenübergang (T_c) geben.

Kritisches Verhalten

- Entscheidend für krtitisches Verhalten sind die Größen im thermodynamischen Limes $f = \lim_{V\to\infty} f_V$

Phasenübergänge, Ordnungsparameter ($\langle M\rangle$) zeigt kein analytisches Verhalten

- erster Ordnung: Diskontinuität von erster Ableitung der Zustandssumme (Ordnungsparameter)
- zweiter Ordnung: zweite Ableitung der Zustandssumme zeigen nicht stetiges Verhalten (Suszeptibilität oder spezifische Wärme)

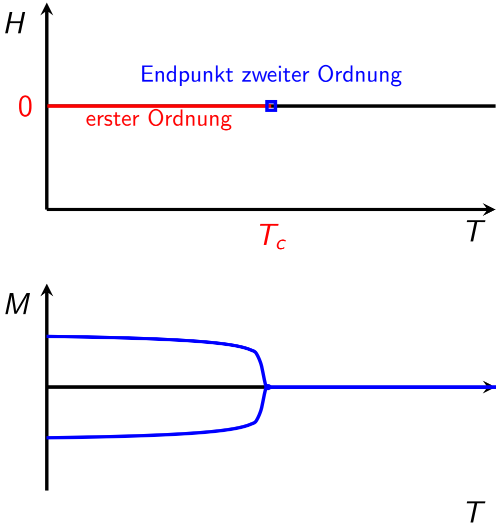
Kritische Exponenten charakterisieren universelles Verhalten

$$\langle M\rangle \sim \varepsilon^{\beta}; \qquad \varepsilon = \frac{|T - T_c|}{T_c}$$

$$\chi_M \sim \varepsilon^{-\gamma}$$

$$C_V \sim \varepsilon^{-\alpha}, \qquad \xi \sim \varepsilon^{-\nu}$$

Phasendiagramm des Ising-Modells



Ising-Modell in einer Dimension

Ising-Kette, periodische Randbedingungen, $(K = \beta J)$

$$H(\{s_x\}) = -J \sum_{x=1}^{N} s_x s_{x+1} - h \sum_{x=1}^{N} s_x$$

$$\begin{aligned} Z_V(\beta) &= \sum_{s_1, s_2, \ldots, s_N} e^{K s_1 s_2 + \frac{1}{2}\beta h (s_1 + s_2)} e^{K s_2 s_3 + \frac{1}{2}\beta h (s_2 + s_3)} \ldots \\ &= \sum_{s_1, s_2, \ldots, s_N} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \cdots T_{s_N s_1} = \mathrm{tr}\, T^N \end{aligned}$$

Transfermatrix $(s = \{+1, -1\})$:

$$T = \begin{pmatrix} e^{K+\beta h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-\beta h} \end{pmatrix}$$

Lösung des Ising-Modells in einer Dimension

Diagonalisierung der Transfermatrix:

$$T = RDR^{-1}; \quad R = \begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma \\ \sin\gamma & \cos\gamma \end{pmatrix}; \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}$$

$$\lambda_\pm = e^K \left(\cosh\beta h \pm \sqrt{\sinh^2\beta h + e^{-4K}} \right)$$

$$\sin 2\gamma = \frac{e^{-2K}}{\sqrt{\sinh^2\beta h + e^{-4K}}}; \quad \cos 2\gamma = \frac{\sinh\beta h}{\sqrt{\sinh^2\beta h + e^{-4K}}}$$

Zustandssumme

$$Z_V(\beta) = \mathrm{tr}\, T^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N(1 + p^N); \quad p = \frac{\lambda_-}{\lambda_+} < 1$$

Thermodynamik der Ising-Kette

Diagonalisierung der Transfermatrix:

$$f_V = -\frac{1}{\beta}\log\lambda_+ - \frac{1}{\beta N}\log(1+p^N) \rightarrow_{N\to\infty} f = -\frac{1}{\beta}\log\lambda_+$$

$$\langle M\rangle = \frac{1-p^N}{1+p^N}\cos 2\gamma \rightarrow_{N\to\infty} \frac{\sinh\beta h}{\sqrt{\sinh^2\beta h + e^{-4K}}}$$

Spontane Magnetisierung nur im Grenzfall $T \to 0$

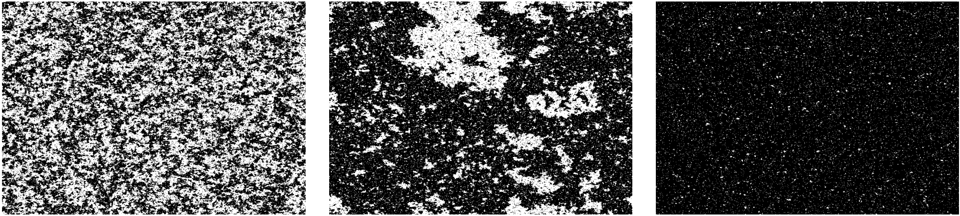
- U wird durch Ausrichtung aller Spins verringert
- $s_x \to -s_x$ für Teil der Spins ergibt $\Delta U = 4J$ an Grenze
- Aber: Entropiegewinn $\Delta S = k_B \log N$, da N mögliche Postitionen der Grenze

$\Rightarrow$ keine geringere $F = U - TS$ für ausgerichtete Spins

Zweidimensionales Ising-Modell

- 1936 Kurz nachdem Wilhelm Lenz und Ernst Ising keinen Phasenübergang in 1D gefunden hatten: Beweis für seine Existenz in 2D ($T_c > 0$)
- 1941 Kramers und Wannier T_c aus Dualitäts-Transformation Argument basiert auf Analyse von Regionen mit ausgerichteten Spins
- 1944 Lars Onsager: exakte Lösung durch Transfermatrix-Methode

Zweidimensionales Ising-Modell in numerischer Simulation



- Konfigurationen für $K = 0.4$, $K \approx K_c$, $K = 0.5$ (700×700 Gitter)
- In Simulationen zeigt sich Übergang vom geordneten zu ungeordneten Zustand
- $T \approx T_c$ Skaleninvarianz, Domänen auf jeder Größen-Skala

Lösung von Onsager

Umfangreiche Rechnung, Formel für die freie Energie:

$$-\beta f = \log\cosh(2K) - 2K + \frac{2}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta\ \log\left(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2\theta}\right)$$

$$\kappa = \frac{2\tanh(2K)}{\cosh(2K)}$$

$u(T)$, C_V als Funktion von elliptischen Integralen; Singularität von C_V zeigt Phasenübergang bei $2K_c = \log(1+\sqrt{2})$ an.

Magnetisierung:

$T > T_c$: $\langle M\rangle = 0$

$T < T_c$: $\langle M\rangle = \left(1 - \sinh^{-4}(2K)\right)^{1/8}$

Näherungsverfahren für das Ising-Modell

Neben numerischen Methoden wurde noch eine Reihe weiterer Verfahren für das Ising-Modell etabliert.

- Mean-Field-Näherung
- Hochtemperatur-Entwicklung
- Tieftemperatur-Entwicklung

Problem bei Entwicklungen: Darstellung von nicht-analytischem Verhalten bei T_c

Tieftemperatur-Entwicklung

Betrachte Anregungen von vollständig geordneten Zustand $E_0 = -dVJ - Vh$ und berücksichtige die Anzahl dieser Konfigurationen. Spins im Volumen X umgeklappt: Spins in Volumen $n = |X|$, Rand von Volumen (Paare mit unterschiedlichen Vorzeichen) $p = |\partial X|$

$$Z_V = e^{-\beta E_0} \sum_{n,p} z^n u^p G_V(n,p), \quad z = e^{-2\beta h}, \quad u = e^{-2\beta J},$$

G_V Zahl der Konfigurationen mit n und p.
Alternativ ($h = 0$): $H = E_0 + 2J \sum_{<x,y>} (1 - \delta(s_x, s_y))$

$$Z_V = e^{-\beta E_0} \sum_{s_x} e^{-2\beta J n_f [\{s_x\}]}$$

n_f Zahl der Bonds mit unterschiedlichen Vorzeichen

Tieftemperatur-Entwicklung

$$Z_V = e^{-\beta E_0}(1 + Vzu^4 + 2Vz^2u^6 + V(z^4 + 6z^3 + (V-5)z^2/2)u^8 + \dots)$$

Aus Ableitung von f ergibt sich Magnetisierung

$$\langle M \rangle = 1 - 2zu^4 - 8z^2u^6 - (8z^4 + 36z^3 - 10z^2)u^8 + \dots$$

Kritische Temperatur lässt sich aus dem Konvergenzradius der Reihe ableiten.

$$\langle M \rangle = \sum a_l u^{2l} \sim \left(1 - \frac{u^2}{u_c^2}\right)^{\beta}$$

Tieftemperatur-Entwicklung

Konvergenzradius $R = \lim_{l \to \infty} \frac{a_l}{a_{l-1}}$, ergibt sich aus Fit von

$$\frac{a_l}{a_{l-1}} = \frac{1}{u_c^2} - \frac{1+\beta}{u_c^2}\frac{1}{l}$$

Für u_c (T_c) und β (kritischer Exponent).

Tieftemperaturentwicklung:

- Ansatz: Entwicklung um Konfiguration, die H minimiert
- Vergleichbar semiklassischer Näherung / Schwacher-Kopplungs-Entwicklung in QFT

Hochtemperatur-Entwicklung

Hohe Temperaturen, Entwicklung für $\beta \ll 1$
Naiv:

$$Z_V = \sum_{\{s_x\}} \prod_{<x,y>} e^{K s_x s_y} = \sum_{\{s_x\}} \prod_{<x,y>} (1 + K s_x s_y + \frac{(K s_x s_y)^2}{2!} + \dots)$$

Summation über alle Konfigurationen: Beiträge mit ungeraden Anzahl von Spins an einem Gitterpunkt verschwinden.

$$Z_V = 2^V (1 + K^2 \frac{2V}{2} + \dots)$$

Hochtemperatur-Entwicklung

Effizientere Entwicklung (Entwicklung in Charakteren):
$e^{Ks_x s_y} = \cosh(K)(1 + vs_x s_y)$, $v = \tanh(K)$

$$Z_V = (\cosh K)^{2V} \sum_{\{s_x\}} \prod_{<x,y>} (1 + vs_x s_y)$$

$$Z_V = (\cosh K)^{2V} 2^V \left(1 + Vv^4 + 2Vv^6 + \ldots\right)$$

Hochtemperatur-Entwicklung

Die Entwicklung der Suszeptibilität ergibt sich aus einer Entwicklung für die Zweipunktsfunktion ($\langle M \rangle = 0$)

$$\chi = \frac{1}{V} \sum_{x,y} \langle s_x s_y \rangle$$

Es ergeben sich Graphen mit Einfügung von s_x und s_y.

$$\chi = 1 + 4v + 12v^2 + 36v^3 + 100v^4 + 276v^5 + 740v^6 + \ldots$$

Hochtemperaturentwicklung vergleichbar Entwicklungen der Gitter-QFT

- „strong coupling“ Entwicklung
- Hopping-Parameter-Entwicklung

Mean-Field-Näherung

Ansatz der Mean-Field-Näherung:

- Ersetze Wechselwirkung benachbarter Spins durch Wechselwirkung mit mittlerem Feld
- Selbstkonsistenzgleichung für das mittlere Feld
- Faktorisierung des Boltzmann-Maßes
- Mean-Field-Näherung sagt Phasenübergang voraus
- Genauigkeit hängt von der Koordinationszahl ab: je mehr Spins Wechselwirken, desto besser die Genauigkeit

$$T_{c,mf} = 2dJ$$

Zusammenfassung

Ising-Modell

- Spielzeugmodell für Näherungen und numerische Verfahren
- Gitter-QFT: eng verwandt mit Physik statistischer Modelle
- 2D Ising-Modell: Durch exakte Vorhersagen Benchmark für Numerik und analytische Verfahren
- Aufgaben: Simulation und Vergleich mit Näherungen und exakten Ergebnissen.