Untersuchung des 2D Ising-Modells mit Brascamp–Kunz-Randbedingungen

A. Krinner, T. Vogel, E. Bittner, W. Janke

Institut für Theoretische Physik, Universität Leipzig, 04109 Leipzig

Brascamp–Kunz-Randbedingungen

Wir benutzen ein quadratisches Gitter, in x-Richtung $2N$, in y-Richtung M Gitterplätze. Die Brascamp–Kunz-Randbedingungen [1] (BK-RB) sind:

- periodisch in y-Richtung
- fest in x-Richtung, davon auf einer Seite konstant "$+$", auf der anderen alternierend "$+-+-\cdots$"

Die Zustandssumme kann vereinfacht werden zu

$$Z_{M,2N} = 2^{2MN} \prod_{i=1}^{N} \prod_{j=1}^{M} \left[1 + z^2 - z(\cos\theta_i + \cos\phi_j)\right]$$

mit $z = \sinh 2\beta$, $\theta_i = (2i-1)\pi/2N$ und $\phi_j = j\pi/(M+1)$. Diese ist sehr viel leichter zu handhaben, als die des Modells mit periodischen Randbedingungen, welche aus 4 Summanden ähnlicher Produkte besteht.

Problemstellungen

- Wie wirkt sich das Setzen von BK-RB auf die Zustandsdichte $g(E)$ aus?
- Wie muß man den Cluster-Algorithmus an die neuen Randbedingungen anpassen?
- Verifikation der exakten Rechnungen durch Simulation, Algorithmenvergleich.

Bisher exakt bekannt

- Finite-Size Scaling (FSS) der Fisher-Null-stellen [2].
- FSS der kritischen spezifischen Wärme [2, 3]

$$C_{M,2N}(T_c) = \frac{\ln M}{\pi}\left(1 + \frac{1}{M}\right) + c_0 + \frac{c_1}{M} + \frac{c_2}{M^2} + \frac{c_3}{M^3} + \ldots$$

- FSS von $C^{\max}_{M,2N}$ und $T_{\max}$ enthalten Terme der Form $(\ln M)^k/M^l$ $(N = \rho(M+1))$ [2].

Algorithmen 1

1. Metropolis-Algorithmus

2. Wolff-Single-Cluster-Algorithmus [4]

- Einzelner Spin wird herausgegriffen, Nachbarspin wird mit WSK $P = 1 - \mathrm{e}^{-2\beta}$ zum Cluster zugefügt.
- Flippe den so entstandenen Cluster.

Anpassen des Cluster-Algorithmus

Problem: Behandlung der fixierten Ränder

Lösung: Multi-Ensemble-Simulation

Wird ein Randspin Clustermitglied, wird der betreffende Rand mit in den Cluster einbezogen, der so möglicherweise verschiedene Spinorientierungen enthält.

$\Rightarrow$ Es existieren vier verschiedene Randsituationen, die als unabhängige Systeme interpretiert werden und aus Symmetriegründen die gleichen Ergebnisse liefern (Abb. 1).

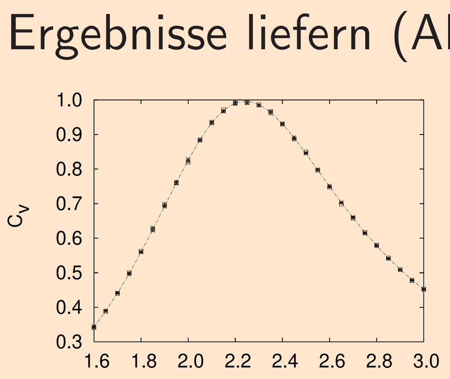

Abbildung 1: C_V für 8×8-Gitter, exakt und die vier Fälle der Clustersimulation.

Magnetischer Sektor

Im Rahmen dieser Arbeit sind neue Ergebnisse im magnetischen Sektor gewonnen worden (BK-RB, Single-Cluster):

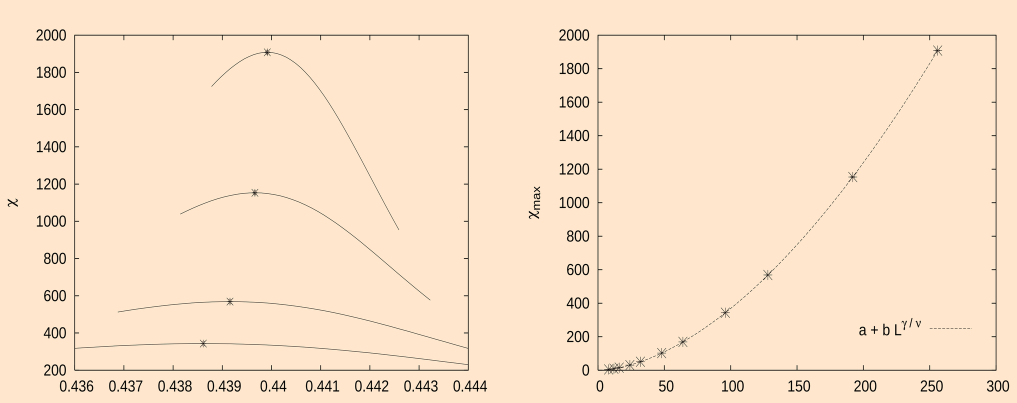

Abbildung 2: Suszeptibilität χ für verschiedene Gittergrößen als Funktion von $\beta = 1/T$. FSS der Maxima der Suszeptibilität $\chi_{\max}$.

FSS-Analyse

$$\chi_{\max} \cong L^{\gamma/\nu}$$

$$\gamma/\nu = 1.747(1)\ (Q = 0.72)$$

$$d\ln\langle|m|^p\rangle/d\beta \cong L^{1/\nu} f_p(x)$$

$$p = 1: \quad 1/\nu = 0.988(9)\ (Q = 0.94)$$
$$p = 2: \quad 1/\nu = 0.988(9)\ (Q = 0.91)$$

Algorithmen 2

3. Multikanonischer Algorithmus [5]

- Bestimme Gewichte W, so daß

$$P_{\mathrm{muca}}(E) = P_{\mathrm{kan}}(E) W(E)$$

uniform verteilt ist $\Rightarrow$ auch stark unterdrückte Zustände werden mit hoher Statistik simuliert.

4. Wang–Landau-Algorithmus [6]

- Spinflipwahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$p(E_1 \to E_2) = \min\left[1, \frac{g(E_1)}{g(E_2)}\right]$$

- Zustandsdichte wird modifiziert durch

$$g(E) \to g(E)\cdot f \quad \text{mit} \quad f > 1$$

bis das Histogramm $H(E)$ "flach" ist. Der Modifikator f wird immer dann durch eine monoton auf 1 abfallende Funktion verfeinert, z.B. $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$.

Zustandsdichte $g(E)$

Umentwicklung $Z_{M,2N} \sim \sum_{k=0}^{2NM} g_k x^k$, mit $x = \mathrm{e}^{-4\beta}$ ist direkt möglich $\Rightarrow$ $g(E)$ exakt bestimmt bis (bisher) 64×64 Gitter.

Um ein Gefühl zu bekommen, wie sich BK-RB auf die Zustandsdichte auswirken, haben wir diese zuerst für ein kleines Gitter exakt ausgezählt. Das Resultat zeigt Abb. 3:

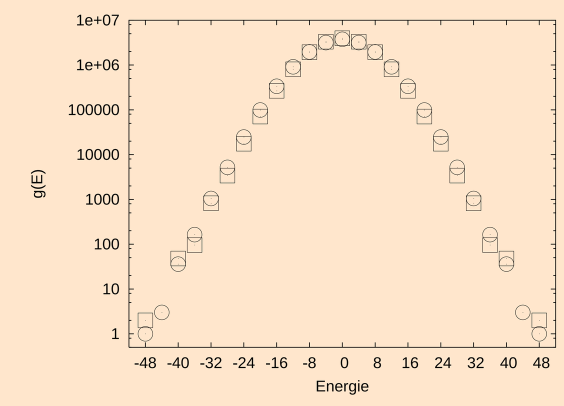

Abbildung 3: Vergleich der Zustandsdichten für 6×4-Gitter mit periodischen- (□) bzw. BK-RB (○); exakt ausgezählt.

Im folgenden vergleichen wir die exakte Lösung mit den Mittelwerten aus 16 Simulationen von je $\approx 10^6$ sweeps für ein 16×16 Gitter:

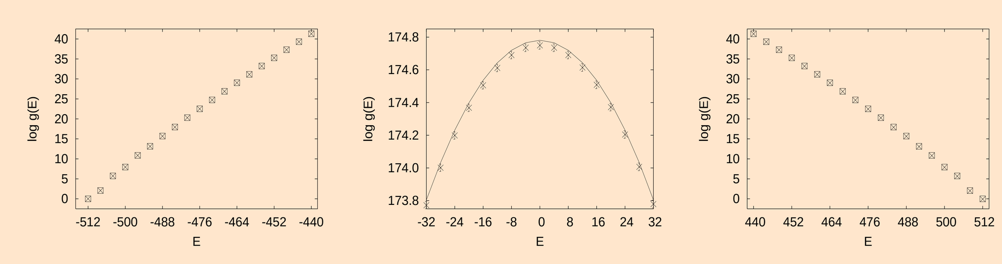

Abbildung 4: Vergleich der mit dem Wang–Landau-Algorithmus erhaltenen Zustandsdichte $\log(g(E))$ $(\times)$ mit der exakten Lösung.

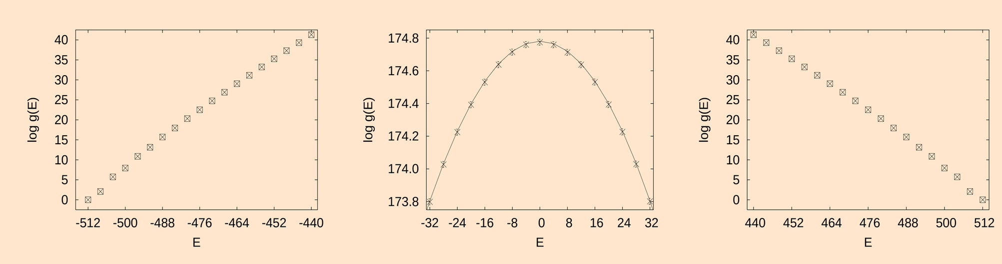

Abbildung 5: Vergleich der mit dem multikanonischen Algorithmus erhaltenen Zustandsdichte $\log(g(E))$ $(\times)$ mit der exakten Lösung.

Ergebnisse

Eigenschaften der Zustandsdichte:

- Zustandsdichte mit BK-RB ist ebenso symmetrisch um $E = 0$.
- Grundzustand E_0 ist mit BK-RB nicht entartet (Symmetriebrechung).
- Es existiert ein Zustand mit $E = E_0 + 4$, im Gegensatz zu periodischen RB.

Vergleich der Methoden:

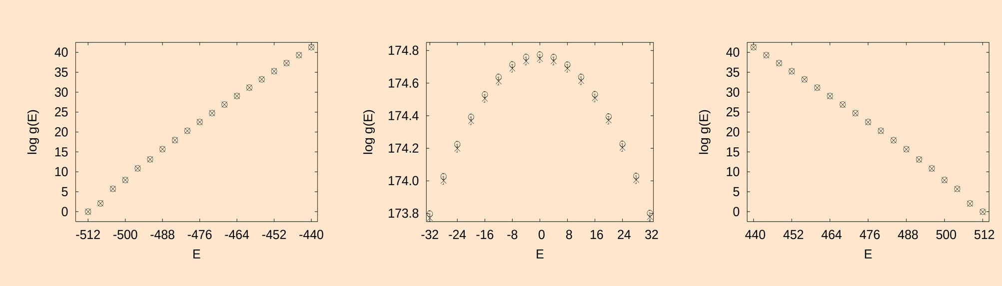

Abbildung 6: Vergleich der Ergebnisse der beiden Methoden: Wang–Landau-Algorithmus $(\times)$ und multikanonische Rekursion $(\circ)$.

- Beide Simulationsverfahren liefern korrekte Ergebnisse, die in etwa gleich schnell gewonnen wurden und qualitativ vergleichbar sind.

Literatur

[1] H.J. Brascamp, H. Kunz, J. Math. Phys. **15**, 65 (1974)

[2] W. Janke, R. Kenna, Phys. Rev. B **65**, 064110 (2002)

[3] N.Sh. Izmailian, K.B. Oganesyan, C.-K. Hu, cond-mat/0202282

[4] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989)

[5] B.A. Berg, T. Neuhaus, Phys. Lett. B **267**, 249 (1991)

[6] F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001)

Gedruckt am Rechenzentrum der Universität Leipzig