

I.6 Cluster-MC- Algorithmen

bisher: lokale Monte-Carlo-Schritte (single spin flips)

Problem: Autokorrelationszeiten sind groß nahe T_c ,
divergieren (bei T_c) für $L \rightarrow \infty$:
critical slowing down dynamischer Kritischer Exponent
Quantitativ: $\tau \propto \xi^z$ mit $z \approx 2.125$

Ursache: große Cluster gleich ausgerichteter Spins sind stabil gegen lokale spin flips im Inneren, nur an der Oberfläche sind die Akzeptanzraten signifikant:
Kosten für spin-flip im Inneren eines großen Clusters: $\Delta E = 4D J$
Kosten am Rand: $\Delta E \leq 4J$

Bei $T \approx T_c$ ändert sich die Gesamtkonfiguration daher in erster Linie durch Verschiebung der Cluster Grenzen, was näherungsweise dem Wandern einer Hyperfläche ($D-1$ Dimensionen) in D Dimensionen bzw. einem random walk in einer Dimension entspricht. Für unabhängige Konfigurationen müssen sich die Domänenwände um eine Distanz ξ bewegt haben, was idealisiert ξ^2 Single-spin-flips erfordert ($\tau \propto \xi^z$ mit $z=2$). Genauer: $z \approx 2.125$

Aber: der kritische Exponent ist spezifisch für die Monte-Carlo-Prozedur und kann verbessert werden!
 Idee: ganze Cluster können (fast) frei umgeklappt werden ($\Delta E \propto \ln(N_{\text{cluster}})$) \leadsto Cluster-Updates!

Vorüberlegung: welche Cluster sollen Umklapp-Kandidaten sein? Jeweils alle zusammenhängenden Spins gleicher Orientierung? **Nein**, sonst könnten Cluster nur wachsen, jede Simulation würde zur vollen Polarisation getrieben (Verletzung aller Gleichgewichts-Beziehungen).

Also: wie Cluster auswählen, nach welchen Regeln Spins invertieren?

Abbildung des Ising-Modells (allgemeiner: q-state Potts model) auf ein Perkolations-Modell:

P. W. Kasteleyn and C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 26s, 11 (1969); C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn, Physica (Utrecht) 57, 536 (1972), [http://dx.doi.org/10.1016/0031-8914\(72\)90045-6](http://dx.doi.org/10.1016/0031-8914(72)90045-6)

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\beta \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \right] \quad (\beta = 1) \\
 &= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta \sigma_i \sigma_j} \\
 &= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta [(1-p) + p \delta_{\sigma_i \sigma_j}]}; \quad p \equiv 1 - e^{-2\beta}
 \end{aligned}$$

Um uns von der Korrektheit zu überzeugen, müssen wir nur die möglichen Werte von $\sigma_i \sigma_j$ einsetzen:

$$\sigma_i \sigma_j = 1 \Rightarrow e^{\beta [(1-p) + p \delta_{\sigma_i \sigma_j}]} = e^{\beta} = e^{\beta \sigma_i \sigma_j}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_i \sigma_j = -1 &\Rightarrow e^{\beta [(1-p) + p \delta_{\sigma_i \sigma_j}]} = e^{\beta (1-p)} \\
 &= e^{\beta [1 - (1 - e^{-2\beta})]} = e^{-\beta} = e^{\beta \sigma_i \sigma_j}
 \end{aligned}$$

Beachte: $0 \leq p \leq 1$ "riecht" nach Wahrscheinlichkeit.

Wir formen Z weiter um; mit $\sum_{n=0}^1 [a \delta_{n,0} + b \delta_{n,1}] = a + b$ gilt:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{n_{ij}\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta} [(1-p) \delta_{n_{ij},0} + p \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{n_{ij},1}]$$

Zusätzlich zu den Spin-Variablen σ_i wurden hier Bond-Variablen n_{ij} eingeführt. Letztere können nur zwischen (Nachbar-)Spins gleicher Orientierung, "gesetzt" ($n_{ij}=1$) sein — mit Wahrscheinlichkeit p .

Minimales Beispiel: 2 Spins

σ_1	σ_2	n_{12}	Bild	Beitrag zu Z
+1	+1	0	↑ ↑	$e^{\beta} (1-p)$
+1	+1	1	↑ → ↑	$e^{\beta} p$
+1	-1	0	↑ ↓	$e^{\beta} (1-p)$
+1	-1	1	↑ → ↓	0

Beigleichen Spins: relative W' für bond ist p

{ gleicher Beitrag — Spin-flip zwischen nicht-verbundenen Spins „kostenlos“

Kein Beitrag — darf nicht auftreten

Swendson-Wang Cluster-Update-Algorithmus:

(i) Initialisierung der Spin-Konfiguration (z.B. zufällig)

→ (ii) Bond-update: für alle Nächst-Nachbar-Paare $\langle i,j \rangle$,

setze $n_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \sigma_i = \sigma_j \text{ und } r < p = 1 - e^{-2\beta} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

↑ Standard-Zufallszahl

(iii) Spin-update: Finde alle Cluster durch Bonds verbundener Spins und weise ihnen je zufällig neue Orientierung zu.

(iv) Messung von Observablen (nach Warm-up)

(v) Weiter mit (ii)

R. H. Swendsen, J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. 58, 86 (1987) http://prola.aps.org/abstract/PRL/v58/i2/p86_1

Man kann das Spin-Update (für feste Bond-Konfiguration) mit einem modifizierten Ising-Modell assoziieren, in dem die Paarwechselwirkung jeweils entweder verschwindet (für $n_{ij}=0$) oder unendlich stark ferromagnetisch ist (für $n_{ij}=1$).

Nichttriviale Implementationschritt: Finden der S-W-Cluster. Einfacher S-W-bond-update Algorithmus mit Rekursion:

(i) \forall spins i : setze $visited[i] = 0$

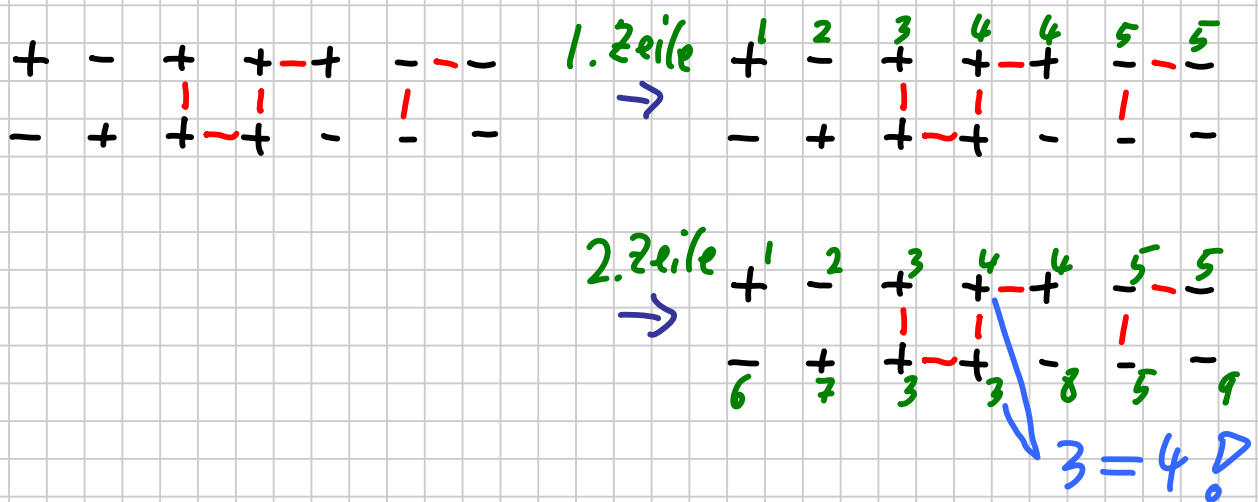
(ii) \forall spins i :
setze Variable σ_{neu} zufällig
flip-cluster (i, σ_{neu})

```
routine flip-cluster ( $i, \sigma_{neu}$ )  
  if  $visited[i] = 0$   
     $\sigma[i] = \sigma_{neu}$   
     $visited[i] = 1$   
     $\forall$  Nachbarn  $j$  von  $i$   
      flip-cluster ( $j, \sigma_{neu}$ )
```

Effizienterer Algorithmus ohne Rekursion: „cluster multiple labeling technique“

J. Hoshen, R. Kopelman, Phys. Rev. B 14, 3438 (1976) http://prola.aps.org/abstract/PRB/v14/i8/p3438_1

Prinzip: führe Cluster-Label für jeden Spin ein, das angibt, zu welchem Cluster er gehört, weise am Ende jedem Spin die richtige (Cluster-spezifische) Orientierung zu. Arbeite systematisch: zeilen + spaltenweise etc. Dabei erhält jeder Spin, der mit einem schon besuchten Spin verbunden ist, dessen Clusternummer, sonst eine neue:



Problem: häufig stellt sich nachträglich heraus, dass Spins mit verschiedenen Clusternummern doch verbunden sind \rightarrow Umbenennung + Buchhaltung nötig.

Effizienter und einfacher: **Wolff Cluster-Update** wie Swendsen Wang, jedoch mit Schritt

(iii) Wähle zufällig einen Spin i und flippe den zugehörigen Cluster.

Vorteil: bevorzugte Updates großer Cluster.

Beide Cluster-Algorithmen reduzieren die Autokorrelationszeiten gegenüber Single-spin-flip

dramatisch: $\tau \propto \xi^z$ mit $z \approx 0.2 - 0.5$

Besonderheit bei Swendsen-Wang: Observablen können über alle möglichen Einstellungen der Clusterspins gemittelt werden (nicht nur die, welche für die folgende Iteration benutzt wird), um die statistischen Fehler zu reduzieren.

1. Beispiel: Suszeptibilität (ohne Subtraktion von $\langle M \rangle^2$):

$$\chi \propto L^{2d} \langle M^2 \rangle = \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 \right\rangle$$

$$= \left\langle \left(\sum_c N_c \sigma_c \right)^2 \right\rangle$$

Summe über alle Cluster c mit N_c Spins, Orientierung σ_c

$$= \left\langle \left(\sum_c N_c \sigma_c \right) \left(\sum_{c'} N_{c'} \sigma_{c'} \right) \right\rangle$$

$$= \left\langle \sum_{\{\sigma_c = \pm 1\}} \left(\sum_c N_c \sigma_c \right) \left(\sum_{c'} N_{c'} \sigma_{c'} \right) \right\rangle$$

$$= \left\langle \sum_c N_c^2 \right\rangle$$

"improved estimator"

2. Beispiel: Energie

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \left\langle \sum_c \mathcal{E}_c \right\rangle = -J \left\langle \sum_{\langle ij \rangle} n_{ij} \right\rangle \quad (?)$$