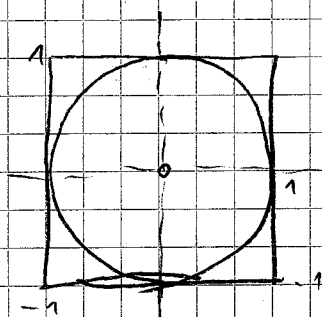


### III Monte Carlo Simulationen

MC Simulationen sind eine Alternative zu MD Simulationen für einige Fragestellungen: Thermodynamik, Strukturen, Zeitliche Dynamik.

Monte Carlo Simulationen gemäßen einem stochastischen Prozeß im Konfigurationsraum (ohne Impulse) des Modells. Alle Simulationen von Gittermodellen sind MC Simulationen.

#### Simple Sampling



Numerische Berechnung der Fläche des Kreises mit Radius 1 durch „Mensurieren“.

(Also nicht mit einer numerischen Integrationsroutine für den Viertelkreisbogen im 1. Quadranten)

Idee: Berechne Fläche im Quadranten wie folgt

- (i) Generiere Zufallszahl  $0 \leq x \leq 1$
- (ii) „ „  $0 \leq y \leq 1$
- (iii) Anzahl von Versuchen  $\neq 1$
- (iv) Wenn  $x^2 + y^2 \leq 1 \rightarrow$  Fläche  $\pm 1$
- (v) falls Loop-Count  $\leq$  Max gebe zu (i)
- (vi) Fläche =  $\frac{\text{Fläche}}{\text{Anzahl von Versuchen}}$

Der MC Schätzer für die Kreisfläche  $2\pi$  ist also  $4 \times$  (Anzahl der zufällig generierten Punkte die innerhalb des Kreisbogens liegen)

Problem aus der statistischen Physik

Berechne die mittlere Energie im kanonischen Ensemble

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_x E(x) e^{-\beta E(x)}$$

wobei  $x$  der Koordinatenvektor sein soll. Mit der simple-sampling Idee helfen wir:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{M} \frac{\sum_{i=1}^M E(x_i) e^{-\beta E(x_i)}}{\sum_{i=1}^M e^{-\beta E(x_i)}} \quad (\text{III.1})$$

Was geht schief?

In einem hochdimensionalen Konfigurationsraum ist die Wahrscheinlichkeit, ausgerechnet die Zustände  $x_i$  mit kleinem  $E(x_i)$  zu finden, verschwindend gering. Aber die machen den wesentlichen Beitrag zu den Summen (Integralen).

### Importance Sampling

Erzeuge die Stichprobenliste gemäß ihrer relativen Gewichte:  $e^{-\beta E(x_i)} \Rightarrow \langle E \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M E(x_i)$

Idee des Algorithmus: Simuliere einen Markov-Prozess, der die gewünschte Verteilung als stationäre Verteilung besitzt.

Markov-Prozess: Ein Markov-Prozess ist ein stochastischer Prozess ohne Gedächtnis.

stochastischer Prozess: Zufallsprozess; Sequenz von stochastischen Variablen (Zufallsvariablen)  $(X_i)_{i \in I}$ .  $I$  ist eine Indexmenge (z.B.  $I = \mathbb{N}, \mathbb{R}_0^+$ )

So einen stochastischen Prozeß kann man also z.B. hinschreiben als

$$X_{t_0}, X_{t_1}, X_{t_2}, \dots, X_{t_n}, \dots$$

oder  $(X_{t_0}, t_0), (X_{t_1}, t_1), \dots, (X_{t_n}, t_n), \dots$

Allgemein gilt: Um die statistischen Eigenschaften dieses Prozesses vollstandig zu beschreiben, mu sich alle Wahrscheinlichkeitsverteilungen

$$p_n(X_{t_0}, t_0; X_{t_1}, t_1; \dots; X_{t_n}, t_n), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

bekannt fur so eine Wahrscheinlichkeitsverteilung mu wirklich gelten.

$$(III.2) \begin{cases} (i) & p_n(X_{t_0}, t_0) \geq 0 \\ (ii) & \int p_n(X_{t_0}, t_0) dt_0 = 1 \\ (iii) & \int p_n(X_{t_0}, t_0; X_{t_1}, t_1; \dots; X_{t_n}, t_n) dt_n = p_{n-1}(X_{t_0}, t_0; \dots; X_{t_{n-1}}, t_{n-1}) \end{cases}$$

Mit so einem allgemeinen Proze lost sich nicht viel anfangen.

Vereinfachung: Definiere bedingte Wahrscheinlichkeiten.

$$p_n(X_{t_0}, t_0; X_{t_1}, t_1; \dots; X_{t_n}, t_n) = p_{n|n-1}(X_{t_n}, t_n | X_{t_0}, t_0; \dots; X_{t_{n-1}}, t_{n-1}) \cdot p_{n-1}(X_{t_0}, t_0; X_{t_1}, t_1; \dots; X_{t_{n-1}}, t_{n-1}) \quad (III.3)$$

$p_{n|n-1}$ : Wahrscheinlichkeit, da Ereignis  $X_n$  zur Zeit  $t_n$  eintritt, vorausgesetzt da die Ereignisse  $X_0$  zur Zeit  $t_0, \dots, X_{n-1}$  zur Zeit  $t_{n-1}$  eingetreten sind.

Markov-Eigenschaft:  $p_{n|n-1}(X_{t_n}, t_n | X_{t_0}, t_0; \dots; X_{t_{n-1}}, t_{n-1}) = p_{n|n-1}(X_{t_n}, t_n | X_{t_{n-1}}, t_{n-1}) \quad (III.4)$

„Proze ohne Gedachtnis“: wenn ich den jetzt-Zustand

$x_{n-1}$  zur Zeit  $t_{n-1}$  kennen, kann ich vorhersagen mit welcher Wahrscheinlichkeit zu zur Zeit  $t_n$  eintritt.

Vorteil: Ich muß nicht noch 2 Funktionen

kennen:  $p_1(x, t)$  und  $p_{111}(x_2 | x_1, t_1)$

um den Prozess vollständig zu beschreiben, denn:

$$p_n(x_0, t_0; x_1, t_1, \dots, x_n, t_n) = \left( \prod_{i=1}^n P_{111}(x_i, t_i | x_{i-1}, t_{i-1}) \right) p_1(x_0, t_0) \quad (\text{III.5})$$

Was heißt das für unser Problem?

Wir wollen, daß im stationären Fall gilt

$$p_1(x, t) = p_{eq}(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x)} \quad (\text{III.6})$$

D.h. wir haben  $p_1$  aber es fehlt uns  $p_{111}$

Stationarität bedeutet, daß gelten muß

$$p_{111}(x_2, t_2 | x_1, t_1) = p_{111}(x_2, t_2 - t_1 | x_1, 0) \\ \equiv: W_{\frac{1}{2}}(x_2 | x_1) \quad (\text{III.7})$$

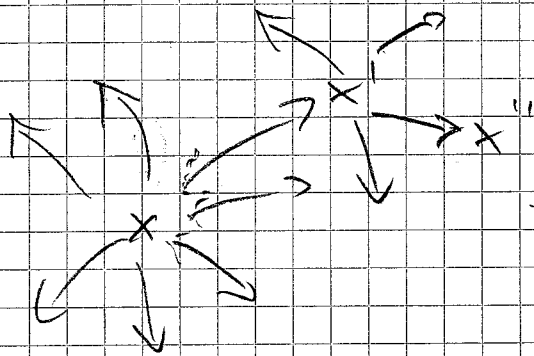
Diese  $W_{\frac{1}{2}}(x_2 | x_1)$  liegen im allgemeinen nicht eindeutig fest, es sei denn man hat irgendeine andere physikalische Theorie über die Dynamik auf der Zeitskala "t", die einem hierfür eine funktionale Form liefert.

Ausserdem geht man eine faßt vor. Behandeln wir eine diskrete Dynamik und setzen  $t=1$ . Betrachte die zeitliche Veränderung der Wahrscheinlichkeiten, daß sich das System im Zustand (Konfigurationen)  $x$  befindet

$$p(x, n+1) = p(x, n) + \sum_{x'} w(x|x') p(x', n) - \sum_{x'} w(x'|x) p(x, n) \quad (\text{III.8})$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß ich im nächsten Zeitschritt im Zustand  $x$  bin ist die Summe aus

- 1) der Wahrscheinlichkeit jetzt im Zustand  $x$  zu sein
- 2) plus  $\pm$  der Wahrscheinlichkeit aus einem anderen Zustand  $x'$  nach  $x$  zu springen
- 3) minus  $\pm$  der Wahrscheinlichkeit von  $x$  in einen anderen Zustand  $x'$  zu springen



„lokale Bilanzgleichung für Wahrscheinlichkeit“

Wahrscheinlichkeit ist eine Erhaltungsgröße

Wenn wir hier formal eine Zeiteinheit  $\Delta t$  einfügen und fordern:

$$w(x|x') = \Delta t w_0(x|x')$$

so haben wir:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \sum_{x'} w_0(x|x') p(x', t) - \sum_{x'} w_0(x|x) p(x, t) \quad (\text{III.9})$$

Gleichungen (III.8) und (III.9) sind die Mastergleichungen eines Markov-Prozesses in diskreter bzw. kontinuierlicher Zeit.

Scheinen nur wenn, was im stationären Fall passiert:

$$p(x, t+1) = p(x, t) \quad \text{oder} \quad \frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{x'} w(x|x') p_{eq}(x') = \sum_{x'} W(x'|x) p_{eq}(x) \quad (\text{III.10})$$

$$\text{Zufluss} = \text{Abfluss}$$

Diese Bedingung an die Übergangswahrscheinlichkeiten  $w(x|x')$  kann man auf viele Arten erfüllen. In der Praxis verwendet man die detaillierte Balance

$$w(x|x') p_{eq}(x') = w(x'|x) p_{eq}(x)$$

$$\text{oder} \quad \frac{w(x|x')}{w(x'|x)} = \frac{p_{eq}(x)}{p_{eq}(x')} \quad (\text{III.11})$$

Für das Problem mit der kanonischen Zustandssumme heißt das

$$\frac{w(x|x')}{w(x'|x)} = e^{-\beta[H(x) - H(x')]} \quad (\text{III.12})$$

Wenn man sich genauer überlegt, welche Anteile in  $w(x'|x)$  enthalten sind, sieht man

$$w(x'|x) = v(x'|x) \tilde{w}(x'|x) \quad (\text{III.13})$$

mit

$v(x'|x) \equiv$  Wahrscheinlichkeit  $x'$  als  
nächsten Zustand vorzuschlagen

$$\text{also} \quad \frac{\tilde{w}(x|x')}{\tilde{w}(x'|x)} = \frac{v(x'|x)}{v(x|x')} e^{-\beta[H(x) - H(x')]} \quad (\text{III.14})$$

Bei symmetrischer Wahl  $v(x'|x) = v(x|x')$

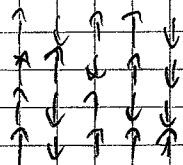
fällt der erste Term weg, aber das muß nicht

immer der Fall sein  $\Rightarrow$  Man kann sich beliebig MC moves ausdenken, solange sie nur die detaillierte Balance erfüllen.

Beispiel: Ising Modell (ferromagnetisch  $J > 0$ )

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad ; \quad s_i = \pm 1 \quad (\text{III.15})$$

wobei die Summe über nächste Nachbarpaare läuft, z.B. auf dem Quadratgitter



Man kann man ab MC moves

„single-spin-flip“ im Ising Modell

nehmen, d.h.  $x$  und  $x'$  unterscheiden

sich durch einen geflippten spin. Es gilt dann

$$v(x|x') = v(x'|x) = \frac{1}{z} \quad (\text{III.16})$$

und 
$$\frac{\tilde{w}(x|x')}{\tilde{w}(x'|x)} = e^{-\beta [H(x) - H(x')]}$$

Auch diese Gleichung ist durch auf nicht verschiedenen Arten zu erfüllen. Zwei oft gewählte Übergangswahrscheinlichkeiten sind

Metropolis's

$$\tilde{w}(x|x') = \min [1, e^{-\beta [H(x) - H(x')]}] \quad (\text{III.17})$$

Glauber

$$\tilde{w}(x|x') = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh\left(\frac{\beta}{2} [H(x) - H(x')]\right) \right\} \quad (\text{III.18})$$

Der Simulationsalgorithmus sähe also wie folgt aus:

(i) Wähle thermodynamische Parameter wie  $L, T, H$  (Magnetfeld)

(ii) erzeuge Startkonfiguration, z.B. alle Spins  $+1$

(iii) Loop über Anzahl von MC Steps

(iv) Loop  $i = 1, \dots, N = L^3$

- wähle Spin zufällig

- berechne Energieänderung  $H(x) - H(x')$  und

- Übergangswahrscheinlichkeit  $w(x|x')$

- ziehe gleichverteilte Zufallszahl  $0 < r < 1$

- Falls  $r \leq w(x|x')$  flippe den Spin  
ansonsten behalte die alte Konfiguration

(v) Wenn eine gewisse Anzahl von MCS simuliert wurde und das Gleichgewicht erreicht ist, beginne Messen der interessierenden thermodynamischen Größen

### Bemerkungen

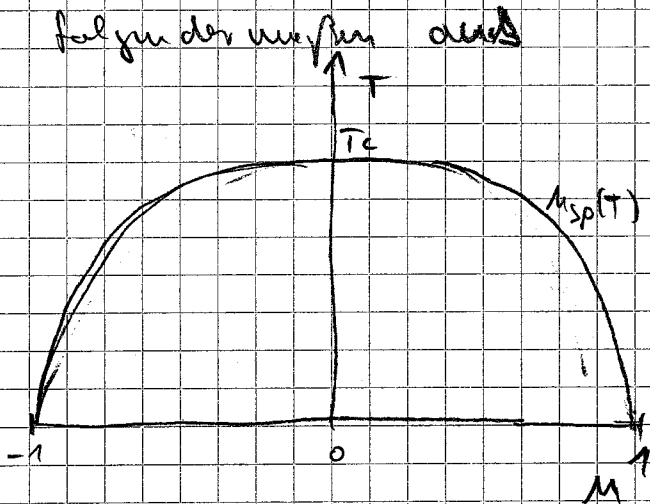
1. Zeiteinheit  $1 \text{ MCS} \equiv$  alle  $N$  Spins hatten im Mittel die Gelegenheit geflippt zu werden
2. Zur Generierung der Zufallszahlen werden hochwertige Zufallszahlengeneratoren gebraucht, nicht die built-in Generatoren unserer Rechner  $\rightarrow$  siehe letzte Semester
3. Wie beurteilt man, ob das System im Gleichgewicht ist, d.h. ob die Konfigurationen gemäß ihrer Gleichgewichtswahrscheinlichkeit  $p_{\text{eq}}(x)$  generiert werden?

### Zur Bemerkung 3:

In jedem System in der Natur oder auch in der Simulation gibt es langsame Freiheitsgrade.

Im Allgemeinen sind dies mathematische Eigenschaften des Systems wie z.B. die Magnetisierung  $M$  im Falle des Ising Modells.

Das Phasendiagramm des Ising Modells,  $M(T)$  sieht folgendermaßen aus:



Unterhalb einer kritischen Temperatur findet eine spontane Symmetriebrechung in  $\pm M_{sp}(T)$  statt.

Oberhalb von  $T_c$  ist  $\langle M(T) \rangle = 0$ , aber es gibt Fluktuationen  $\delta M(t)$ , die auf Null zufallen. Die Autokorrelationsfunktion der Fluktuationen

$$\begin{aligned} \phi(\Delta t) &= \frac{\langle \delta M(t+\Delta t) \delta M(t) \rangle - \langle \delta M(t) \rangle^2}{\langle \delta M^2(t) \rangle - \langle \delta M(t) \rangle^2} \\ &\equiv \frac{\langle \delta M(t+\Delta t) \delta M(t) \rangle}{\langle \delta M^2(t) \rangle} \quad (\text{III.19}) \end{aligned}$$

wobei  $\langle \rangle$  eine Mittelung über alle Zeitspannen in einer Zeitreihe  $\delta M(t)$  in der Simulation ist, legt die Definition einer Autokorrelationszeit nahe:

$$\tau_c = \int_0^{\infty} \phi(\Delta t) d(\Delta t) \quad (\text{III.20})$$

Falls  $\phi(st)$  eine reine Exponentialfunktion ist gilt:

$$\tau_c \triangleq \phi(\tau_c) = \frac{1}{e} \Rightarrow - \left( \frac{d\phi}{d(st)} \Big|_{st=0} \right)^{-1} \quad (\text{III.21})$$

Die Form der Relaxationsfunktion hängt von der Wahl der Bewegungstypen in der MC Prozedur ab

So bilden sich also dem oben beschriebenen Algorithmus falls man von  $T > \tau_c$  auf  $T < \tau_c$  übergeht Domänen einer Magnetisierung z.B.  $+M$ , die mit einem Potenzgesetz

$$L_M(t) \sim t^{\frac{1}{2}}$$

wachsen. Man kann aber die Moten in der MC Prozedur ändern und z.B. benachbarte Spins austauschen (Karuzaki spin-exchange dynamics)

Folgerungen 1)  $M$  ist eine Erhaltungsgröße

2) definiere  $c_i = \frac{1}{2} (1 + s_i) = \begin{cases} 0 & s_i = -1 \\ 1 & s_i = 1 \end{cases}$

$\Rightarrow$  Modell für AB Mischung ( $A \rightleftharpoons 0, B \rightleftharpoons 1$ )

oder  $A + B$  stellen. Die Gesamtheit von  $A$ -Teilchen und  $B$ -Teilchen sind erhalten, und man sieht ein Entmischungsphänomen. Die Domänengrößen von  $A$  oder  $B$  wachsen gleichermaßen und verhalten sich wie

$$L_{A,B}(t) \sim t^{1/3}$$

durch Diffusion von  $A(B)$ -Teilchen hin zu wachsenden Domänen.

Eine andere Art von Algorithmen benutzt den folgenden Move

(i) finde alle Nachbarn eines Spins  $S_i$  mit gleicher Orientierung:  $S_i \cdot S_j = 1$

(ii) erzeuge Bindungen zwischen diesen Spins mit Wahrscheinlichkeit

$$p = 1 - e^{-\frac{J}{k_B T}}$$

(iii) Verfahre mit den hier angegebenen Spins genauso, bis alle Spins des Gitters in Clustern zusammengefaßt sind (oder der eine, erste Cluster, den man betrachtet aufhört zu wachsen). Flippe dann die kompletten Cluster (den einen Cluster) mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  (1).

Diese Clusteralgorithmen führen zu einer sehr schnellen Äquilibriumierung, ermöglichen das Studium sehr großer Systeme, erlauben aber keine phys. Interpretation der genutzten Dynamik.

Wann kann man eine solche MC - Simulation dynamisch interpretieren?

I. Sie muß aus lokalen Bewegungen bestehen

II. Die Wahrscheinlichkeit eine dieser Bewegungen aus zu machen sollte alle  $\frac{1}{N}$  skalieren, so daß ~~man~~ bei Annahme einer Zeit  $\Delta t$  für die einzelnen Bewegungen (z.B. Spin flip, Spindeltausch) die doppelten Limes existieren:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} N \Delta t = \tau_{\text{mes}}$$

(III.22)

Betrachten wir noch einmal Gleichung (III.8)

$$p(x, n+1) - p(x, n) = \sum_{x'} w(x|x') p(x', n) - \sum_{x'} w(x'|x) p(x, n)$$

Zusammen mit (III.13) und (III.14)

$$w(x'|x) = v(x'|x) \tilde{w}(x'|x)$$

Für das Ising Modell mit single spin-flip gilt.

$$v(x'|x) = \frac{1}{z} \quad (\text{III.23})$$

und aus (III.14) hat man dann

$$\frac{\tilde{w}(x'|x)}{\tilde{w}(x|x')} = e^{-R[H(x') - H(x)]}$$

Dann können wir aus (III.8) schreiben

$$\frac{p(x, n+1) - p(x, n)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \sum_{x'} [w(x|x') p(x', n) - w(x'|x) p(x, n)]$$

und erhalten im Limes  $N \rightarrow \infty$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$ ,  $N \Delta t = t$

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \frac{1}{t} \sum_{x'} [w(x|x') p(x', n) - w(x'|x) p(x, n)] \quad (\text{III.24})$$

$t = 1$  MCS setzt die Zeitskala der Simulation.

Wir hatten ferner vorausgesetzt, daß nur lokale Änderungen der Konfiguration gesucht werden, die „klein“ sind

$$\frac{\|x - x'\|}{\|x\|} \ll 1$$

Dann kann man schreiben

$$\tilde{w}(x'|x) = \tilde{w}(\|x' - x\|; x) = \tilde{w}(v, x)$$

$$\tilde{w}(x|x') = \tilde{w}(x - x'; x') = \tilde{w}(-v, x + v)$$

und die Master-Gleichung (III.24) nach  $r$  entwickeln,  
 die sogenannte Kramer-Moyal Entwicklung.  
 Wenn man dies nach dem zweiten Term  
 abbricht, erhält man die sogenannte  
 Fokker-Planck-Gleichung, die allgemein folgende  
 Form hat

$$\partial_t p(x,t) = -\partial_x [u(x) p(x,t)] + \frac{1}{2} \partial_x^2 [D(x) p(x,t)]$$

(III.25)

Oft kann man den ersten Term als Ableitung  
 eines effektiven Potentials verstehen. Der zweite  
 Term ist der Diffusionskoeffizient.

Damit ist auch angegeben welche Prozesse in  
 der Natur durch eine FP-Gleichung  
 beschrieben werden: es sind Diffusionsprozesse,  
 d.h. die meisten Transportphänomene  
 in der Physik sind über diese Art von  
 Beschreibungen behandelbar.