Effiziente Simulation periodischer und nicht-periodischer Ising-Modelle am kritischen Punkt

Diplomarbeit
von
Oliver Redner

Insititut für Theoretische Physik
der Universität Tübingen

Juli 1999

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Einleitung

Phasenübergänge sind überall um uns zu beobachten, am bekanntesten sind das Sieden des Wassers zu Wasserdampf und das Gefrieren zu Eis, aber auch Phänomene wie Staubildung auf Autobahnen lassen sich sinnvoll als Phasenübergang beschreiben [NaSc92]. Die meisten Phasenübergänge, die wir aus dem Alltagsleben kennen, zeichnen sich durch eine abrupte Änderung einer bestimmten Eigenschaft der betreffenden Substanz wie ihrer mikroskopischen Struktur oder Dichte aus. (Die Dichten von Wasser und Wasserdampf sind bekanntermaßen sehr verschieden.) Es gibt aber auch eine große Klasse von Substanzen, bei der die Änderung kontinuierlich verläuft. Hat man beispielsweise einen Behälter mit Wasser und Wasserdampf in Koexistenz bei Normaldruck und erhöht Druck und Temperatur derart, daß man weiterhin auf der Koexistenzkurve bleibt, so wird der Dichteunterschied zwischen beiden „Phasen“ immer geringer, bis er – am sogenannten kritischen Punkt – verschwindet; Wasser und Wasserdampf können dort, oder wenn man Druck oder Temperatur weiter erhöht, nicht mehr unterschieden werden, sie sind in Wahrheit nur Ausprägungen ein und derselben Phase. Am kritischen Punkt wird das „Wasser“ trüb. Diesen Effekt nennt man kritische Opaleszenz. Die Dichte und damit der Brechungsindex fluktuieren im ganzen Behälter, so daß einfallendes Licht stark gestreut wird. Da der kritische Druck und die kritische Temperatur bei Wasser mit $p_c \simeq 22.1\,\mathrm{bar}$ und $T_c \simeq 374°\mathrm{C}$ schon recht hoch sind, beobachtet man die kritische Opaleszenz allerdings einfacher bei anderen Substanzen, beispielsweise bei flüssigem Xenon ($p_c \simeq 5.8\,\mathrm{bar}$, $T_c \simeq 16.5°\mathrm{C}$).

Ein weiteres wichtiges Beispiel solch eines kontinuierlichen Phasenübergangs ist das Verschwinden der Magnetisierung von magnetisiertem Eisen bei Erwärmung am Curie-Punkt $T_c \simeq 770°\mathrm{C}$. Oberhalb des Curie-Punktes beobachtet man bei angelegtem magnetischen Feld eine Magnetisierung in Richtung des Feldes, die aber beim Abschalten des Feldes wieder verschwindet. Substanzen, die solch ein Verhalten zeigen, nennt man paramagnetisch. Unterhalb des Curie-Punktes führt ein (hinreichend starkes) Magnetfeld ebenfalls zu einer Magnetisierung in Feldrichtung, diese bleibt jedoch nach dem Abschalten des Feldes teilweise erhalten. Substanzen mit einem derartigen Verhalten heißen ferromagnetisch. Bei Eisen findet also am Curie-Punkt ein Übergang zwischen ferromagnetischem und paramagnetischem Verhalten statt.

Es stellt sich heraus, daß das kritische Verhalten einer Substanz, beispielsweise die Art, mit der die Magnetisierung des Eisens am Curie-Punkt auf Null abfällt, in vielen Fällen nicht von ihrer mikroskopischen Beschaffenheit abhängt. Relevant sind meist nur allgemeine Eigenschaften wie die Dimension (ob es sich also um Oberflächen oder Volumina handelt) und die Art, nicht aber die genaue Form der zugrundeliegenden lokalen Wechselwirkung. Damit haben eine Vielzahl verschiedener Substanzen dasselbe kritische Verhalten, das man in diesem Fall universell nennt. (Nicht-universell ist dagegen z.B. der Zahlenwert der kritischen Temperatur.) Diese Tatsache macht kritisches Verhalten durch relativ einfache mathematische Modelle beschreibbar, die nur den dafür relevanten Eigenschaften Rechnung tragen. Das vielleicht wichtigste Modell für Ferromagnetismus ist das 1920 von Lenz [Len20] vorgeschlagene und nach seinem Schüler Ising benannte Modell, der es in einer Dimension 1925 löste [Isi25]. In drei Dimensionen stellt es sich als richtige Beschreibung des Phasenübergangs von Eisen und vielen anderen Substanzen heraus (vgl. [BDFN92]). Der Phasenübergang des Ising-Modells ist einer zwischen einer geordneten, ferromagnetischen und einer ungeordneten, paramagnetischen Phase. Das Ising-Modell ist äquivalent zu einem sogenannten Gittergas-Modell, bei dem die Plätze eines Gitters entweder von einem „Atom“ besetzt sein können oder nicht und jedes Atom jeweils mit anderen Atomen auf direkt benachbarten Gitterplätzen wechselwirkt. Über diese Analogie läßt sich der Phasenübergang einer Vielzahl von Substanzen verstehen, die dem Ising-Modell in zwei Dimensionen bezüglich des kritischen Verhaltens entsprechen: bestimmte Oberflächenadsorbate [Ein87], Substanzen wie K_2CoF_4 [IkHi74] und K_2NiF_4 [BAS77] sowie Titanit [BSSG92, ZSBUWS95], um nur einige zu nennen. Eindimensionale Ising-Quantenketten finden unter anderem in der genetischen Evolutionsbiologie Anwendung [Tho72, BaGa99].

Trotz seiner Einfachheit ist das Ising-Modell nur in einer Dimension und für bestimmte sehr regelmäßige Strukturen in zwei Dimensionen exakt lösbar, in letzteren Fällen auch nur ohne äußere Magnetfelder. Will man etwas über kompliziertere Modelle erfahren, muß man zu approximativen Methoden greifen. Diese Arbeit wird sich mit Computer-Verfahren beschäftigen, die es erlauben, durch Verwendung von Zufallszahlen – deshalb Monte-Carlo-Verfahren genannt – das Verhalten von Modellen zu simulieren. Es soll dabei sowohl um die Bestimmung universeller als auch nicht-universeller Größen gehen, die das Verhalten am kritischen Punkt kennzeichnen. Als besonders leistungsfähig hierfür wird sich der sogenannte Invaded-Cluster-Algorithmus herausstellen, der 1995 von Machta, Chayes et al. [MCLSC95] entwickelt wurde. Er ist in der Lage, durch ein Selbst-Organisations-Verfahren den kritischen Punkt aufzuspüren und dabei die kritische Temperatur sowie andere wichtige Größen an diesem Punkt zu bestimmen.

Wir werden das Ising-Modell auch auf sogenannten quasiperiodischen Mustern betrachten. Dies sind Strukturen, die zwar geordnet, aber nicht periodisch sind. Das Interesse an solchen Mustern begründet sich in der Tatsache, daß sie Modelle für die Struktur von Quasikristallen liefern. Die Substanzen dieser Stoffklasse (üblicherweise ternäre Legierungen mit hohem Aluminiumanteil wie AlCuFe) zeichnen sich einerseits durch ihre Ähnlichkeit zu Kristallen aus, sie zeigen beispielsweise scharfe Beugungsbilder, müssen also langreichweitige Orientierungsordnung aufweisen. Andererseits können sie nicht periodisch sein, da ihr Beugungsbild Symmetrien besitzt, die periodische Substanzen nicht haben können. In den fünfzehn Jahren seit der Entdeckung des ersten Quasikristalls 1984 durch Shechtman et al. [SBGC84] sind diese Substanzen und quasiperiodische Muster im allgemeinen intensiv untersucht worden. In bestimmten Eigenschaften wie der elektrischen Leitfähigkeit unterscheiden sich Quasikristalle qualitativ von Kristallen. Bezüglich der magnetischen Eigenschaften gab Luck [Luc93] auf der Grundlage eines Arguments von Harris [Har74] ein heuristisches Kriterium an, das für die meisten quasiperiodischen Systeme dasselbe kritische Verhalten wie im entsprechenden periodischen Fall voraussagt. Diese Frage ist aber noch nicht abschließend geklärt. Weitere Untersuchungen des magnetischen kritischen Verhaltens sind also angebracht.

Der Aufbau dieser Arbeit ist folgendermaßen. Zunächst werden im ersten Kapitel die Grundlagen erarbeitet, die zum Verständnis der Phasenübergänge beim Ising-Modell und der Simulation desselben mit Monte-Carlo-Verfahren wichtig sind. Vor allem wird der Invaded-Cluster-Algorithmus vorgestellt, der das Hilfsmittel bei den Untersuchungen in den beiden folgenden Kapiteln sein wird. Im zweiten Kapitel werden dann die Ergebnisse von Tests dieses Algorithmus auf einigen ausgewählen periodischen und quasiperiodischen Ising-Modellen dargestellt, deren kritische Eigenschaften bekannt sind. Dann wird mit seiner Hilfe das kritische Verhalten bisher in dieser Hinsicht nicht untersuchter quasiperiodischer Modelle betrachtet. Das dritte und letzte Kapitel ist schließlich einer Klasse von Ising-Modellen gewidmet, für die das kritische Verhalten bei bestimmten Parameterwerten bekannt ist, bei anderen dagegen nicht.

Die vorliegende Arbeit ist absichtlich elementar gehalten, um Anfängern und Anfängerinnen auf dem Gebiet der Statistischen Physik einen leichten Einstieg in das Thema zu ermöglichen. Diese Arbeit ist meines Wissens die erste umfassende Einführung in den Invaded-Cluster-Algorithmus und seine Anwendungen.

Hier seien noch einige Anmerkungen zur Notation gemacht. Begriffe, die im Text definiert werden, sind durch *Kursivschrift* gekennzeichnet, die Hauptbegriffe der jeweiligen Abschnitte werden durch **Fettdruck** hervorgehoben. Englische Begriffe, für die kein entsprechender deutscher Begriff existiert, werden (gegebenenfalls mit Angabe einer Übersetzung) ins Deutsche übernommen. Existiert ein deutscher Begriff, aber ist die Kenntnis des englischen Pendants zum Verständnis der Literatur wichtig, so ist dieses in serifenloser Schrift angegeben.

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Das Ising-Modell

Wir betrachten eine höchstens abzählbare Menge von *Punkten* im d-dimensionalen Raum $\mathbb{R}^d$, $P = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots\}$ oder $P = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_N\}$, deren Elemente wir auch mit ihrem Index i identifizieren, und eine Menge von *Kanten* $E \subset \{\{\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j\} \subset P \mid i \neq j\}$, deren Elemente wir mit $\langle i, j \rangle$ bezeichnen und im Hinblick auf die physikalische Interpretation auch *Bindungen* nennen. Die Kanten denken wir uns als gradlinige Verbindungen der betreffenden beiden Punkte. Keine zwei Kanten sollen sich schneiden. Das Tupel $G = (P, E)$ beschreibt dann in der Terminologie von [Vol91] einen ungerichteten, schlichten[1], höchstens abzählbaren euklidischen **Graphen**. Im folgenden wollen wir weiterhin fordern, daß die betrachteten Graphen *zusammenhängend* sind, jeder Punkt des Graphen also mit jedem anderen über Kanten verbunden ist.

Um den Grenzfall unendlich großer Systeme, den thermodynamischen Limes (vgl. Abschnitt 1.2.1), untersuchen zu können, müssen wir auch Folgen (G_N) von Graphen betrachten, die gegen einen unendlichen Graphen G streben. Dies soll bedeuten, daß

(a) jedes $G_N = (P_N, E_N)$ endlich ist mit $|P_N| = N$,
(b) die G_N eine aufsteigende Folge bilden, $P_N \subset P_{N+1}$, $E_N \subset E_{N+1}$, und
(c) den Graphen $G = (P, E)$ ausschöpfen, $\bigcup_{N=1}^{\infty} P_N = P$, $\bigcup_{N=1}^{\infty} E_N = E$.

Die G_N werden als *Approximanten* bezeichnet.

Für alle im folgenden betrachteten Graphen G (evtl. nach geeigneter Drehung oder Scherung[2]) existiert eine aufsteigende, den $\mathbb{R}^d$ ausschöpfende Folge halboffener (im Zweidimensionalen rechteckiger) Bereiche $[\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_i[$ mit der folgenden Eigen-

[1] Ein *schlichter* Graph ist ein Graph ohne *Schlingen* und *Mehrfachkanten*, also ohne Kanten, die einen Punkt mit sich selbst verbinden, und ohne Paare von Kanten, die dieselben Punkte verbinden. Beides wird hier durch die Definition über Mengen – in denen gleiche Elemente automatisch identifiziert werden – sichergestellt.

[2] Eine Scherung ist eine lineare Transformation, unter der die Koordinatenachsen gegeneinander gekippt werden. Alle Drehungen und Scherungen im $\mathbb{R}^d$ entsprechen genau den $d \times d$-Matrizen mit positiver Determinante.

schaft: Schneidet man aus G den Bereich $[\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_i[$ heraus, so gibt es zu jeder auf einer Seite herausführenden Kante eine, die genau auf der gegenüberliegenden Seite wieder hineinführt. Diese Kanten und gegenüberliegende Seiten identifiziert man und erhält einen endlichen Graphen G_i auf dem so mit *periodischen Randbedingungen* versehenen Bereich $[\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_i[$. Die G_i nennt man *periodische Approximanten*.

Das **Ising-Modell** auf einem Graphen $G = (P, E)$ besteht aus Spins $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_i)$, wobei i alle Punkte des Graphen durchläuft und jedes σ_i die Werte $+1$ $(+)$ oder -1 $(-)$ annehmen kann. Die Energie des Systems wird durch die folgende Hamilton-Funktion beschrieben:

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}) = -\sum_{\langle i,j\rangle \in E} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{i\in P} H_i\sigma_i$$

J_{ij} beschreibt die *Kopplungsstärke* der Bindung $\langle i, j\rangle$. Wir werden nur den sog. *ferromagnetischen Fall* $J_{ij} > 0$ betrachten, bei dem benachbarte Spins die Tendenz zeigen, sich parallel auszurichten. Mit den H_i wird ein *lokales äußeres Feld* eingeführt, zu dem sich die Spins tendenziell parallel ausrichten.

Wir werden das Ising-Modell bei gegebener Temperatur T und fester Anzahl Spins N betrachten, können es also durch das *kanonische Ensemble*[3] beschreiben. In diesem Ensemble treten die einzelnen Konfigurationen $\boldsymbol{\sigma}$ mit einer Wahrscheinlichkeit gemäß dem Boltzmann-Gesetz auf, also proportional zu $e^{-\beta\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})}$. Dabei ist $\beta = \frac{1}{k_\mathrm{B}T}$ die *inverse Temperatur* mit der Boltzmann-Konstanten k_B. Wir erhalten also durch Normierung für die Wahrscheinlichkeit der Konfigurationen im kanonischen Ensemble

$$P_\mathrm{KE}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{Z}e^{-\beta\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})}, \quad Z = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} e^{-\beta\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})}. \tag{1.1}$$

Z wird *kanonische Zustandssumme* genannt und hat eine besondere Bedeutung. Die *freie Energie* des Systems, $F = E - TS$, mit innerer Energie E und Entropie S, ist im kanonischen Ensemble der Logarithmus der Zustandssumme, $F = -k_\mathrm{B}T\log Z$. Die kanonische Wahrscheinlichkeitsverteilung ist nun gerade so beschaffen, daß sie die freie Energie bei gegebener Temperatur und Anzahl der Spins minimiert (*Minimalprinzip der freien Energie*). Die Zustandssumme wird also maximiert.

Hier ist ein Wort zur Klärung des Zustandsbegriffs am Platze. Die Konfigurationen $\boldsymbol{\sigma}$ werden oft auch als (mikroskopische) Zustände bezeichnet. Ich werde den Begriff des Zustands aber nur für den makroskopischen Zustand des Systems verwenden und darunter die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Konfigurationen verstehen. In diesem Sinne läßt sich das Minimalprinzip der freien Energie folgendermaßen formulieren: Bei festgehaltener Temperatur und Anzahl des Spins nimmt das System den Zustand an, der die freie Energie minimiert. Dies ist gerade die kanonische Wahrscheinlichkeitsverteilung.

[3] Eine lesenswerte Einführung in die Statistische Mechanik ist z.B. [Pat77].

Den *Erwartungswert* einer Observablen A im kanonischen Ensemble schreiben wir als

$$\langle A \rangle := \sum_{\boldsymbol{\sigma}} A(\boldsymbol{\sigma}) P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}). \tag{1.2}$$

Es ist zu bemerken, daß von den 2^N Konfigurationen nur ein sehr kleiner Bruchteil nennenswert zum Erwartungswert beiträgt. Eine *Observable* kann dabei prinzipiell jede Funktion auf der Menge der Konfigurationen sein. Im Gegensatz dazu wollen wir alle Größen, die einen makroskopischen Zustand von anderen abgrenzen, *Zustandsgrößen* nennen. Dies sind normalerweise Erwartungswerte von Observablen oder Ableitungen davon. Die wichtigsten Zustandsgrößen des Ising-Modells sind in Tabelle 1.1 zusammengestellt.

Zustandsgröße	Definition
innere Energie pro Spin	$\epsilon = \frac{1}{N}\langle \mathcal{H} \rangle$
Magnetisierung pro Spin	$m = \frac{1}{N}\langle \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \rangle$
spezifische Wärme	$C = \frac{\partial \epsilon}{\partial T}$
Suszeptibilität	$\chi = \frac{\partial m}{\partial H}$

Tabelle 1.1: Die wichtigsten Zustandsgrößen des Ising-Modells, vgl. z.B. [BDFN92].

Wir werden uns im folgenden fast ausschließlich auf den Fall ohne äußere Felder beschränken, $H_i = 0$. Dann gilt $\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}) = \mathcal{H}(-\boldsymbol{\sigma})$ und damit auch $P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}) = P_{\mathrm{KE}}(-\boldsymbol{\sigma})$. Das Ising-Modell ohne äußere Felder weist also eine Symmetrie bezüglich simultaner Umkehr aller Spins auf.

1.2 Phasenübergänge

1.2.1 Definition

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, den Begriff des Phasenübergangs zu definieren. Ich möchte hier einige davon kurz beschreiben.

Phänomenologisch erkennt man einen Phasenübergang normalerweise daran, daß sich spezielle Eigenschaften eines Systems bei Veränderung der äußeren Parameter wie Temperatur, Druck usw. bei bestimmten Werten derselben abrupt ändern. Erwärmt man z.B. ein Stück magnetisiertes Eisen bei ausgeschaltetem äußeren Feld ($H = 0$) über den Curie-Punkt $T_{\mathrm{c}} \simeq 1043\,\mathrm{K}$, so verliert es dort seine Magnetisierung. Wir bemerken also an einem Punkt im Parameterbereich (hier der T-H-Ebene) eine abrupte Änderung einer Zustandsgröße, der Magnetisierung.

Um den Begriff des Phasenübergangs mathematisch präziser zu fassen, kann man z.B. wie in [Tho72] einen *Phasenübergangspunkt* als Nicht-Analytizitätspunkt[4] des thermodynamischen Potentials definieren, hier also der freien Energie. Speziell für das Ising-Modell im homogenen Feld $H_i = H$ ist diese definiert über

$$f_{\text{Ising}}(T, H) = \lim_{N\to\infty} N^{-1} \log Z(N, T, H), \tag{1.3}$$

vorausgesetzt der Grenzwert existiert und ist unabhängig von der Wahl der Approximanten des unendlichen Graphen. Existiert an einem Phasenübergangspunkt die n-te Ableitung des Potentials nicht und sind alle niedrigeren Ableitungen wohldefiniert, so spricht man von einem *Phasenübergang n-ter Ordnung*, vgl. [Pat77]. Ist das Potential dort beliebig oft differenzierbar, so handelt es sich um einen *Phasenübergang unendlicher Ordnung*. Einen Phasenübergang von höherer als erster Ordnung nennt man auch *kontinuierlichen Phasenübergang*, da das Potential am zugehörigen Übergangspunkt stetig ist. Der Übergangspunkt, hier (T_c, H_c), wird dann auch *kritischer Punkt* genannt.

Die kanonische Zustandssumme (1.1) besitzt keine reellen Nullstellen und ist als endliche Summe immer analytisch. Deshalb ist die freie Energie eines endlichen Systems, die über den Logarithmus der Zustandssumme definiert ist, ebenfalls immer analytisch. Ein endliches System kann deshalb keinen Phasenübergang im eben definierten Sinne besitzen. Aus diesem Grund betrachtet man hier immer unendliche Systeme, was sich in (1.3) durch den *thermodynamischen Limes* $N \to \infty$ ausdrückt.

Ein *Ordnungsparameter* eines Phasenübergangs ist eine Zustandsgröße, die auf einer Seite des Phasenübergangspunkts überall Null ist, auf der anderen Seite dagegen immer von Null verschieden. (Dies kann durchaus eine komplexwertige oder vektorielle Größe sein, wie die Beispiele in [BDFN92] zeigen.) Über die Existenz eines Ordnungsparameters kann i.a. nicht viel gesagt werden. Einen phänomenologischen Rahmen bietet die Landau-Theorie, vgl. [BDFN92].

Eine weitere Möglichkeit der Definition eines Phasenübergangs ist über sog. (limitierende) Gibbs-Zustände gegeben, vgl. [Kel98]. Für endliche Systeme haben wir auf Seite 2 den (makroskopischen) Zustand des Systems über die Wahrscheinlichkeitsverteilung definiert, die die freie Energie minimiert. Diese Verteilung ist eindeutig und gerade die kanonische. Für unendliche Systeme kann man analog verfahren, nur ist die Zustandsmenge nicht mehr endlich, sondern sogar überabzählbar[5], man benötigt also fortgeschrittene Kapitel der Maßtheorie. Für eine mathematisch rigorose Beschreibung vgl. [Sim93, Kel98, Geo88]. Der Zustand, den ein System bei gegebener Temperatur und äußerem Feld annimmt, ist das Wahrscheinlichkeits-Maß auf der Zustandsmenge, das die freie Energie minimiert. Dies ist nun nicht immer eindeutig. Ein Phasenübergang ist definitionsgemäß genau dann gegeben, wenn das Maß durch das Minimalprinzip nicht eindeutig festgelegt ist.

Die hier vorgestellten Definitionen sind nicht immer äquivalent, beim Ising-Modell fallen sie aber zusammen.

[4] Das ist ein Punkt, an dem eine Funktion nicht in eine Taylor-Reihe entwickelt werden kann.

[5] Schon eine eindimensionale unendliche Ising-Kette kann als Binärkodierung einer reellen Zahl aufgefaßt werden.

1.2.2 Phasenübergänge beim Ising-Modell

Das Ising-Modell wurde 1920 von Lenz vorgeschlagen [Len20]. 1925 wurde das eindimensionale Modell von seinem Schüler Ising gelöst [Isi25]; es zeigt keinen Phasenübergang. Peierls argumentierte 1936, daß jedoch in höheren Dimensionen ein Phasenübergang auftritt [Pei36], dies wurde später von Griffiths bewiesen [Gri64]. Das zweidimensionale Modell auf dem Quadratgitter und ohne äußeres Feld konnte erst Onsager 1944 vollständig lösen [Ons44]. Für das Modell mit Feld fehlt bisher noch eine Lösung, es existiert aber ein gelöstes Modell aus der Universalitätsklasse[6] des Ising-Modells im homogenen Feld $H_i = H$. In höheren Dimensionen konnte das Ising-Modell bisher nicht gelöst werden. Es gibt auch deutliche Anzeichen dafür [GuEn96], daß das dreidimensionale Modell kein lösbares Modell sein kann, d.h. kein geschlossener Ausdruck für die freie Energie angegeben werden kann. Bei Anwesenheit eines homogenen äußeren Feldes kann kein Phasenübergang erfolgen. Für andere Feldkonfigurationen dagegen, z.B. die in Abschnitt 1.7 erwähnten, gibt es Phasenübergänge.

Wir wissen, daß ein System im thermodynamischen Gleichgewicht immer einen Zustand annimmt, der die freie Energie $F = E - TS$ minimiert. Es gibt also ein Wechselspiel zwischen dem Minimieren der inneren Energie E, das bei niedrigen Temperaturen überwiegt, und dem Maximieren der Entropie S, das bei hohen Temperaturen dominiert. Am kritischen Punkt sind beide Effekte in gewisser Weise gleich stark. Bei $T = 0$, im Grundzustand also, ist das Ising-Modell (das wir hier ohne äußere Felder annehmen wollen) völlig geordnet, d.h. alle Spins zeigen in eine gemeinsame Richtung, und die Magnetisierung ist maximal, $|m| = 1$. Bezüglich der Richtung ist der Grundzustand entartet. Für Temperaturen $T < T_c$ gibt es immer noch einen großen Anteil gleichgerichteter Spins, also weiterhin eine Magnetisierung des Systems, $m \neq 0$. (Typische Konfigurationen bei verschiedenen Temperaturwerten sind in Abbildung 1.2 dargestellt.) Für Temperaturen $T > T_c$ ist das System ungeordnet. Es gibt zwar Gruppen gleichgerichteter Spins, diese wiegen sich im Mittel aber gegenseitig auf, ergeben also verschwindende Magnetisierung, $m = 0$. Die Magnetisierung m ist damit ein Ordnungsparameter des Phasenübergangs. Es gibt eine ferromagnetische Niedrigtemperaturphase und eine paramagnetische Hochtemperaturphase.

Das Auftreten spontaner[7] Magnetisierung entspricht einer spontanen Symmetriebrechung, die sich in der Uneindeutigkeit des Gibbs-Zustandes unterhalb von T_c widerspiegelt. Oberhalb von T_c ist der Zustand symmetrisch bezüglich Spin-Umkehr $\boldsymbol{\sigma} \to -\boldsymbol{\sigma}$ in dem Sinne, daß die Konfigurationen $\boldsymbol{\sigma}$ und $-\boldsymbol{\sigma}$ gleich wahrscheinlich sind. Unterhalb von T_c dagegen gibt es zwei Zustände, die der positiv und der negativ magnetisierten Phase entsprechen.[8] In der positiv magnetisierten

[6] s. Abschnitt 1.2.4

[7] d.h. ohne Einwirken eines äußeren Feldes

[8] Für $d = 2$ gibt es genau diese zwei Zustände, für $d \geq 3$ dagegen existieren weitere Zustände, die der Koexistenz beider Phasen entsprechen, vgl. die bibliographischen Notizen zu Abschnitt 6.2 in [Geo88].

Phase ist eine Konfiguration $\boldsymbol{\sigma}$ mit erwartungsgemäßer, positiver Magnetisierung sehr wahrscheinlich, die Konfiguration $-\boldsymbol{\sigma}$ dagegen äußerst unwahrscheinlich. Die Symmetrie ist also gebrochen. Das Anlegen eines beliebig kleinen äußeren Feldes oder das Vorschreiben einer Richtung der Spins am Rand des Systems reicht aus, um das Vorzeichen der Magnetisierung zu bestimmen.

1.2.3 Langreichweitige Ordnung

Ein weiteres mögliches Anzeichen eines Phasenübergangs ist das Auftreten sog. langreichweitiger Ordnung. Wir folgen [Tho88, Abschnitt 5.5] und betrachten ein Ising-Modell im homogenen Feld $H_i = H$, das translationsinvariant[9] sein soll. Die *Paarkorrelationsfunktion* für ein solches Modell mit N Spins und ihr Grenzwert für das unendliche System sind

$$G_N(r) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_N - \langle \sigma_i \rangle_N \langle \sigma_j \rangle_N, \quad r = |\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|, \quad G(r) = \lim_{N\to\infty} G_N(r). \tag{1.4}$$

Dabei bezeichne $\langle . \rangle_N$ den in (1.2) definierten Erwartungswert für das endliche System. Wegen der Translationsinvarianz gilt $\langle \sigma_i \rangle_N = \langle \sigma_1 \rangle_N$, und für $H = 0$ verschwindet dieser Erwartungswert für das endliche System wegen der Spin-Umkehr-Symmetrie der Hamilton-Funktion, $\langle \sigma_i \rangle_N = \langle \sigma_1 \rangle_N = 0$. Im unendlichen System ist das Gibbs-Maß des Systems, bezüglich dessen man den Erwartungswert nimmt, für $H = 0$ und $T < T_c$ dagegen mehrdeutig, vgl. [Kel98]. Es existieren zwei Maße und damit zwei Erwartungswerte $\langle . \rangle^+$ und $\langle . \rangle^-$, die Phasen mit positiver und negativer Magnetisierung entsprechen und die sich als links- und rechtsseitiger Grenzwert des Erwartungswerts $\langle . \rangle$ des unendlichen Systems für $H \neq 0$ ergeben, $\langle . \rangle^\pm = \lim_{H\to 0^\pm} \langle . \rangle$.

Die *spontane Magnetisierung* m muß deshalb über $m = \lim_{H\searrow 0} \langle \sigma_1 \rangle = \langle \sigma_1 \rangle^+$ definiert werden. Von **langreichweitiger Ordnung** spricht man, wenn die Größe

$$\rho = \lim_{r\to\infty} \lim_{N\to\infty} \lim_{H\searrow 0} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_N \tag{1.5}$$

von Null verschieden ist, wenn also auch beliebig weit entfernte Spins noch korreliert sind. Aus der Endlichkeit der Suszeptibilität für $T \neq T_c$ folgt [Tho88, S. 128] $\lim_{r\to\infty} G(r) = 0$ und für $H \neq 0$ damit $\lim_{r\to\infty} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = \langle \sigma_1 \rangle^2$. Also ist, falls die Limites bezüglich H und r vertauschen, auch

$$\lim_{r\to\infty} \lim_{H\searrow 0} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \lim_{H\searrow 0} \lim_{r\to\infty} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = (\lim_{H\searrow 0} \langle \sigma_1 \rangle)^2 = m^2.$$

Vertauschen in (1.5) auch die Limites bezüglich H und N, dann gilt $\rho = m^2$, d.h. langreichweitige Ordnung und spontane Magnetisierung fallen zusammen, so z.B. im Fall des Ising-Modells. Andernfalls ist es denkbar, daß man spontane Magnetisierung, aber keine langreichweitige Ordnung hat.

Die Paarkorrelationsfunktion $G(r)$ zeigt das in Tabelle 1.2 zusammengestellte asymptotische Verhalten, siehe auch Abschnitt 1.3.2.

[9] im Endlichen also mit periodischen Randbedingungen versehen, vgl. Seite 2

Temperaturbereich	Magnetisierung	Paarkorrelation
$T < T_{\mathrm{c}}$	$m > 0$	$G(r) \propto e^{-r/\xi(T)}$
$T = T_{\mathrm{c}}$	$m = 0$	$G(r) \propto r^{-d+2-\eta}$
$T > T_{\mathrm{c}}$	$m = 0$	$G(r) \propto e^{-r/\xi(T)}$

Tabelle 1.2: Verhalten von Magnetisierung und Paarkorrelationsfunktion für die verschiedenen Temperaturbereiche bei Ising-Modellen. ξ ist die über das hier angegebene asymptotische Abfallverhalten definierte Korrelationslänge. Für den kritischen Exponenten η vergleiche Abschnitt 1.2.4 und Tabelle 1.3.

1.2.4 Kritische Exponenten, Universalität

Am kritischen Punkt ist das System *skaleninvariant*, d.h. unabhängig von der Längenskala, mit der man es betrachtet. Dies äußert sich u.a. in der Tatsache, daß die in (1.4) definierte Paarkorrelationsfunktion $G(r)$ nach einem Potenzgesetz abfällt, vgl. Tabelle 1.2. (Bei einem exponentiellen Abfallverhalten gemäß $e^{-r/a}$ hätten wir durch a eine ausgezeichnete Längenskala.) Die Skaleninvarianz bedingt aber auch, daß alle anderen singulären Zustandsgrößen, d.h. solche, die am kritischen Punkt nicht beliebig oft differenzierbar sind, in seiner Nähe einem Potenzgesetz gehorchen. Die verschiedenen **kritischen Exponenten**, die dieses Verhalten beschreiben, sind in Tabelle 1.3 zusammengestellt. Es ergibt sich, daß nur zwei kritische Exponenten unabhängig sind. Ich werde dafür y_t und y_h wählen, deren Zusammenhang zu den anderen Exponenten Tabelle 1.3 entnommen werden kann. Dies entspricht der Sprache der Renormierungstheorie, auf die ich hier nicht näher eingehen will. Für eine gute Darstellung der Zusammenhänge auch bezüglich der Renormierungstheorie siehe [BDFN92, Car96].

Vergleicht man wie z.B. in [BDFN92, Tab. 1.2] die kritischen Exponenten verschiedener Substanzen miteinander, so stellt man im Rahmen der experimentellen Fehler Übereinstimmungen fest. Andererseits gibt es theoretische Modelle, deren kritische Exponenten mit denen realer Substanzen gut übereinstimmen. Die Exponenten des dreidimensionalen Ising-Modells sind z.B. denen des Eisens sehr ähnlich, $\nu \simeq 0.6289(8)$, $\gamma \simeq 1.2390(71)$ [FeLa91] verglichen mit $\nu \simeq 0.69(2)$, $\gamma \simeq 1.330(15)$ (für die Quellen s. [BDFN92]). Ähnliche Übereinstimmungen findet man auch bei anderen Gruppen von Substanzen, was die sog. **Universalitätshypothese** nahelegt: Das kritische Verhalten vieler Systeme ist nur von allgemeinen Eigenschaften wie ihrer Dimension (und z.B. der Dimension des Ordnungsparameters) abhängig, nicht aber von ihren mikroskopischen Details. Systeme mit gleichem kritischen Verhalten werden zu *Universalitätsklassen* zusammengefaßt. Die kritischen Exponenten des zweidimensionalen Ising-Modells z.B. definieren die *Onsager-Universalitätsklasse*. Zu ihr gehören z.B. bestimmte Oberflächenadsorbate [Ein87], Substanzen wie K_2CoF_4 [IkHi74] und K_2NiF_4 [BAS77], sowie Titanit [BSSG92, ZSBUWS95].

Der Vollständigkeit halber sei hier noch erwähnt, daß bei homogenen Model-

Exponent	Definition			Gleichheit mit		Onsager
α	$C \propto t^{-\alpha}$	$T \to T_{\mathrm{c}}$	$H = 0$	$2 - \nu d$	$2 - \frac{d}{y_t}$	$0(\log)$
β	$m \propto t^{\beta}$	$T \nearrow T_{\mathrm{c}}$	$H = 0$	$\frac{1}{2}\nu(d + \eta - 2)$	$\frac{d - y_h}{y_t}$	$1/8$
γ	$\chi \propto t^{-\gamma}$	$T \to T_{\mathrm{c}}$	$H = 0$	$\nu(2 - \eta)$	$\frac{2y_h - d}{y_t}$	$7/4$
δ	$m \propto H^{1/\delta}$	$T = T_{\mathrm{c}}$	$H \to 0$	$\frac{d+2-\eta}{d-2+\eta}$	$\frac{y_h}{d - y_h}$	15
ν	$\xi \propto t^{-\nu}$	$T \to T_{\mathrm{c}}$	$H = 0$		$\frac{1}{y_t}$	1
η	$G_{\mathrm{c}} \propto r^{-d+2-\eta}$	$T = T_{\mathrm{c}}$	$H = 0$		$d + 2 - 2y_h$	$1/4$

Tabelle 1.3: Übersicht über die kritischen Exponenten eines magnetischen Systems mit der reduzierten Temperatur $t = |T - T_{\mathrm{c}}|/T_{\mathrm{c}}$ (nach [BDFN92, Car96]). Für die Definition der Größen siehe Tabelle 1.1 und Abschnitt 1.3.2.

len am kritischen Punkt die Erwartungswerte von Observablen, die von mehreren Ortsparametern abhängen (wie z.B. die Paarkorrelationsfunktion des Ising-Modells $G(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \propto |\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|^{-d+2-\eta}$), invariant unter konformen (winkeltreuen) Abbildungen sind. Dies hat in zwei Dimensionen zu einer Klassifikation möglicher kritischer Exponenten geführt. Eine genauere Darstellung würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen, es sei deshalb auf [Car96, Kapitel 11] und die darin enthaltenen Literaturangaben verwiesen.

1.3 Monte-Carlo-Simulationen

Die exakte Lösbarkeit des Ising-Modells, d.h. die Existenz geschlossener Ausdrücke für die Zustandsgrößen (s. Tabelle 1.1) oder zumindest für die freie Energie, ist leider auf den Fall ohne äußere Felder und wenige zweidimensionale Gittertypen (vgl. [Bax82, Syo72]) beschränkt. Daher ist man in den anderen Fällen auf Numerik angewiesen (oder auf andere approximative Methoden wie Entwicklungen der freien Energie oder Renormierungsgruppenansätze, vgl. [BDFN92]). Der Versuch, den Erwartungswert einer Observablen A gemäß der Definition (1.2) auszurechnen, scheitert an der enormen Anzahl der möglichen Konfigurationen, die exponentiell mit der Anzahl der Spins wächst. Dies ist schon deshalb ein ineffektives Verfahren, da für die allermeisten Konfigurationen $\boldsymbol{\sigma}$ die Wahrscheinlichkeit $P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma})$ verschwindend klein ist, der entsprechende Summand also praktisch keinen Beitrag zum Erwartungswert leistet.

Besser ist es, die Mittelung auf Konfigurationen $\boldsymbol{\sigma}^{(k)}$ ($k = 1, \ldots, S$) durchzuführen, die „typisch“ für die betrachtete Temperatur sind, also gemäß der Wahrscheinlichkeit $P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}^{(k)})$ auftreten:

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{S} \sum_{k=1}^{S} A(\boldsymbol{\sigma}^{(k)}) \tag{1.6}$$

Dieses Verfahren wird als importance sampling[10] bezeichnet. Algorithmisch erreicht man dies am leichtesten, indem man eine Übergangsfunktion definiert, die einer gegebenen Konfiguration $\boldsymbol{\sigma}^{(k)}$ eine Konfiguration $\boldsymbol{\sigma}^{(k+1)}$ mit der bedingten Wahrscheinlichkeit $P(\boldsymbol{\sigma}^{(k+1)}|\boldsymbol{\sigma}^{(k)})$ zuordnet, also einen Markov-Prozeß[11] beschreibt. Nach dem Birkhoffschen (punktweisen) Ergodensatz wissen wir, daß (1.6) näherungsweise für große S fast sicher gilt, wenn die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind.

1. Der Markov-Prozeß muß als Gleichgewichtsverteilung $P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma})$ besitzen, $P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{\boldsymbol{\tau}} P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\tau})$.
2. Er muß ergodisch sein.
3. Die erste betrachtete Konfiguration, $\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$, muß mit der Gleichgewichts-Wahrscheinlichkeit $P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)})$ auftreten.

Hinreichend für erstere ist die Forderung der *Detailed Balance*. In der Theorie der Markov-Prozesse entspricht dieser die Bedingung der Reversibilität, vgl. z.B. [Fel68]. Sie besagt, daß die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang zwischen zwei Konfigurationen $\boldsymbol{\sigma}$ und $\boldsymbol{\tau}$ in beiden Richtungen gleich groß sein muß:

$$P(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}) = P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\tau})$$

Man erreicht dies, indem man die Übergangswahrscheinlichkeiten so wählt, daß der Quotient der Übergangswahrscheinlichkeiten von Hin- und Rückrichtung gerade dem Quotienten der Wahrscheinlichkeiten der jeweiligen Zielkonfigurationen entspricht:

$$\frac{P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})}{P(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})} = \frac{P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma})}{P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\tau})} = e^{-\beta(\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})-\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau}))} \tag{1.7}$$

(Der Fall $P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau}) = P(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma}) = 0$ soll dabei eingeschlossen sein.)

Die Forderung der *Ergodizität* bedeutet, daß jede Konfiguration von jeder anderen aus in endlich vielen Schritten erreicht werden kann. In der Sprache der Markov-Prozesse besagt diese Forderung, daß die aus den $2^N \times 2^N$ Übergangswahrscheinlichkeiten gebildete Markov-Matrix $M = (P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau}))_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\tau}}$ irreduzibel ist. Dies kann man noch verschärfen, indem man verlangt, daß der Prozeß auch aperiodisch ist, also in einer für alle Paare von Konfigurationen gleichen Anzahl von Schritten jede Konfiguration von jeder anderen aus erreicht werden kann; M ist dann sogar primitiv.[12]

[10] Stichproben-Nehmen nach Wichtigkeit

[11] vgl. [Pet83, S. 7f, 51ff] für die Behandlung von Markov-Prozessen und Ergodizität

[12] Ich folge hier der in [Pet83] verwendeten Terminologie. Einem irreduziblen M entspricht dort ein *ergodischer* Markov-Prozeß, einem primitivem M ein *strikt ergodischer*. In anderer Literatur, z.B. [Fel68], wird nur letzterer Fall als ergodisch bezeichnet. Für den Birkhoffschen Ergodensatz reicht allerdings die schwächere Voraussetzung.

Die Forderung der Detailed Balance beschränkt die maximale Periodenlänge auf 2. Mit einem Prozeß, der jeweils mit Wahrscheinlichkeit 1/2 einen oder zwei Übergänge macht, kann man formal aus einem 2-periodischen Prozeß M einen äquivalenten aperiodischen Prozeß $M' := (M + M^2)/2$ erhalten.

Eine weitere Forderung an das Verfahren ergibt sich aus der Bedingung, daß die erste betrachtete Konfiguration mit Wahrscheinlichkeit $P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)})$ auftreten soll. Im Normalfall kennen wir aber keine solche Konfiguration (dann bräuchten wir ja das ganze Verfahren nicht), sondern starten weit weg vom Gleichgewicht. Start-Konfigurationen entsprechen typischerweise $T = 0$ (alle Spins gleichgerichtet) oder $T = \infty$ (alle Spins gleichverteilt + oder −). Wegen der Primitivität der Markov-Matrix wissen wir jedoch, daß die Gleichgewichtsverteilung P_{KE} für jede Startverteilung P_0 approximiert wird,

$$\lim_{S\to\infty} \sum_{\boldsymbol{\tau}} P^S(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau}) P_0(\boldsymbol{\tau}) = P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}).$$

Dabei bedeutet P^S die Übergangswahrscheinlichkeit der S-fach iterierten Übergangsfunktion, also gerade die Markov-Matrix zur S-ten Potenz. Starten wir nun mit irgendeiner Verteilung P_0 und warten eine genügend große Anzahl S_{eq} von Übergängen, so kommen wir der Gleichgewichtsverteilung P_{KE} beliebig nahe. Diesen Vorgang nennt man *Equilibrierung* (man bringt das System ins „thermodynamische Gleichgewicht“). Die praktische Forderung an unsere Übergangsfunktion ist nun, daß wir in möglichst wenigen Schritten S_{eq} eine typische Konfiguration erreichen. Wieviele Schritte tatsächlich nötig sind, wird in Abschnitt 1.5.6 behandelt.

Eine **Monte-Carlo-Simulation** ist ein Verfahren, das im Kern eine solche Übergangsfunktion implementiert:

Initialisierung: Erzeuge eine (beliebige) Startkonfiguration und weise sie der Variablen $\boldsymbol{\sigma}$ zu.

Equilibrierung: Wiederhole den folgenden Schritt S_{eq}-mal, bis das System im thermodynamischen Gleichgewicht ist:

> **Monte-Carlo-Schritt (MCS):** Erzeuge aus der gegebenen Konfiguration $\boldsymbol{\sigma}$ eine neue Konfiguration $\boldsymbol{\tau}$ mit der Wahrscheinlichkeit $P(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})$ und weise sie $\boldsymbol{\sigma}$ zu.

Messung: Wiederhole den MCS S-mal und bestimme $\langle A \rangle$ nach (1.6).

Bei der Beschreibung der Algorithmen im folgenden werde ich nur die Übergangsfunktion, d.h. den Monte-Carlo-Schritt, erklären, da der Rest jeweils der hier angegebenen Form entspricht.

1.3.1 Der Metropolis-Algorithmus

Das erste Monte-Carlo-Verfahren und zugleich das einfachste, das den Bedingungen der Ergodizität und der Detailed Balance genügt, ist der 1953 von Metropolis et al. vorgestellte Algorithmus [MRRTT53]:

Metropolis-Schritt: Wähle einen Punkt i aus (zufällig oder durch Ablaufen des Graphen). $\boldsymbol{\tau}$ sei die Konfiguration, die aus der gegebenen Konfiguration $\boldsymbol{\sigma}$ durch Umdrehen des Spins σ_i entsteht. Ist $\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau}) \leq \mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})$, so wird $\boldsymbol{\tau}$ immer die neue Konfiguration, bei $\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau}) > \mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})$ nur mit Wahrscheinlichkeit $e^{-\beta(\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau})-\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}))}$.[13]

Daß der Metropolis-Algorithmus ergodisch ist, kann man leicht sehen. Im Fall, daß wir den Graphen ablaufen, erhält nach N Schritten, wobei N die Anzahl der Punkte des Graphen bezeichne, jeder Spin Gelegenheit zum Umdrehen. Damit kann von jeder Konfiguration jede andere in N Schritten erreicht werden. Im Fall, daß wir die Spins zufällig auswählen, sei $\boldsymbol{\sigma}$ die gegebene Konfiguration, $\boldsymbol{\tau}$ die Konfiguration, die wir erhalten wollen, und d bezeichne die Anzahl verschiedener Spins in $\boldsymbol{\sigma}$ und $\boldsymbol{\tau}$ (Hamming-Distanz). Dann kann $\boldsymbol{\tau}$ von $\boldsymbol{\sigma}$ in d Schritten erreicht werden.

Um die Forderung der Detailed Balance zu überprüfen, zerlegen wir die Übergangswahrscheinlichkeit $P(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})$ in das Produkt aus Auswahlwahrscheinlichkeit $g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})$ und Akzeptanzwahrscheinlichkeit $A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})$ des Schritts. Die Auswahlwahrscheinlichkeit ist in beiden Richtungen gleich.[14] Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit für $\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau}) > \mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})$ ist $A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma}) = e^{-\beta(\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau})-\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}))}$, andernfalls ist $A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma}) = 1$. Da jede Richtung genau einem der beiden Fälle entspricht, wird die Bedingung der Detailed Balance erfüllt:

$$\frac{P(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})}{P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})} = \frac{g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})}{g(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})}\frac{A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})}{A(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})} = e^{-\beta(\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau})-\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}))}$$

Trotz seiner Einfachheit ist der Metropolis-Algorithmus sehr effizient, um das Ising-Modell fern vom kritischen Punkt zu simulieren. Er findet auch bei einer Vielzahl anderer Probleme seine Anwendung. In der Nähe des kritischen Punkts macht ihm jedoch ein Problem zu schaffen, das ich im nächsten Abschnitt beschreibe.

1.3.2 Kritische Verlangsamung

Wie bereits in Abschnitt 1.2.3 und Tabelle 1.2 bemerkt, fällt die Paarkorrelationsfunktion für Temperaturen $T \neq T_\mathrm{c}$ asymptotisch exponentiell ab,

$$G(|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|) \propto e^{-|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j|/\xi}.$$

Die *Korrelationslänge* ξ ist die charakteristische Länge dieses Abfallverhaltens. Sie divergiert für $T \to T_\mathrm{c}$ wie $|T - T_\mathrm{c}|^{-\nu}$ mit einem modellspezifischen *Korrelationslängenexponenten* ν.

[13] Das Auswerten der Energiedifferenz kann lokal und damit effizient geschehen, da sie nur von den nächsten Nachbarn des betrachteten Spins abhängt.

[14] $g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})$ ist 0, wenn sich $\boldsymbol{\sigma}$ und $\boldsymbol{\tau}$ in mehr als einem Spin unterscheiden, und 1, wenn die beiden Konfigurationen gleich sind. Unterscheiden sie sich in genau einem Spin, so ist $g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})$ im Fall des zufälligen Auswählens $1/N$, beim Ablaufen des Graphen nur dann 1, wenn der entsprechende Spin an der Reihe ist, und 0 sonst.

Bei der Anwendung eines Monte-Carlo-Verfahrens versteht man üblicherweise eine Zeiteinheit als die Anzahl von Monte-Carlo-Schritten, in der N Spins Gelegenheit haben, umgedreht zu werden. Damit definiert man die *normierte Autokorrelationsfunktion* einer Observablen A,

$$\Gamma_A(t) = \frac{\langle A(t'+t)A(t')\rangle' - \langle A(t')\rangle'^2}{\langle A(t')^2\rangle' - \langle A(t')\rangle'^2}. \tag{1.8}$$

Der gestrichene Erwartungswert einer Observablen ist dabei definiert als ihr Mittelwert über Konfigurationsfolgen der Länge S im Grenzwert $S \to \infty$. Jede Folge $(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{\sigma}^{(S)})$ taucht dabei mit der Wahrscheinlichkeit $P_{\mathrm{Zyl}}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{\sigma}^{(S)}) = P(\boldsymbol{\sigma}^{(1)})P(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}|\boldsymbol{\sigma}^{(1)}) \cdots P(\boldsymbol{\sigma}^{(S)}|\boldsymbol{\sigma}^{(S-1)})$ auf.[15] Wir haben also

$$\langle B(t')\rangle' := \lim_{S\to\infty} \sum_{\boldsymbol{\sigma}^{(1)}} \sum_{\boldsymbol{\sigma}^{(2)}} \cdots \sum_{\boldsymbol{\sigma}^{(S)}} P_{\mathrm{Zyl}}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{\sigma}^{(S)}) \frac{1}{S} \sum_{t'=1}^{S} B(\boldsymbol{\sigma}^{(t')}). \tag{1.9}$$

Auch die Autokorrelationsfunktion fällt näherungsweise exponentiell ab, $\Gamma_A(t) \propto e^{-t/\tau_{\mathrm{exp}}}$. Über dieses Abfallverhalten wird analog zur Korrelationslänge die *exponentielle Autokorrelationszeit* τ_{exp} als charakteristische Abfallzeit definiert. Sie beschreibt ungefähr die Zeit, die man warten muß, um zwei unkorrelierte Konfigurationen zu erhalten. Auch die Autokorrelationszeit divergiert für $T \to T_{\mathrm{c}}$ nach einem Potenzgesetz, $\tau_{\mathrm{exp}} \propto \xi^{z_{\mathrm{exp}}} \propto |T - T_{\mathrm{c}}|^{-z_{\mathrm{exp}}\nu}$. Dies bedeutet, daß die Anzahl der MCS, die man benötigt, um aus einer Konfiguration eine damit unkorrelierte zu erhalten, in der Nähe des kritischen Punktes immer größer wird. Dieses Phänomen wird als **kritische Verlangsamung** (critical slowing down) bezeichnet. Es behindert die Analyse des kritischen Verhaltens wesentlich.

Die *integrierte Autokorrelationszeit* τ_{int} ist über

$$\tau_{\mathrm{int}}(w) := \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{w} \Gamma_A(t), \qquad \tau_{\mathrm{int}} := \lim_{w\to\infty} \tau_{\mathrm{int}}(w) \tag{1.10}$$

definiert. Auch sie divergiert für $T \to T_{\mathrm{c}}$ wie $\tau_{\mathrm{int}} \propto \xi^{z_{\mathrm{int}}}$.

Die Größen z_{exp} und z_{int} heißen *dynamische Exponenten* und sind – wie man am Auftauchen der bedingten Wahrscheinlichkeiten in P_{Zyl} sieht – verfahrensspezifisch. Dabei ist z_{int} normalerweise leichter und genauer zu bestimmen (siehe Seite 27). Deshalb wird bei einem Verfahren normalerweise dieser Wert angegeben, wobei der Index oft weggelassen wird. Die Angabe von z bezieht sich immer auf die am langsamsten dekorrelierende Observable.

Numerisch fanden Nightingale und Blöte [NiBl96] für den Metropolis-Algorithmus beim Ising-Modell auf dem Quadratgitter $z \simeq 2.1665(12)$. Allgemein gilt für jeden Algorithmus mit lokaler Dynamik eine untere Schranke von $z \geq 2$ nach Skalierungs-Argumenten von Bausch et al. [BDJZ81]. Dies läßt sich folgendermaßen

[15] vgl. die Definition des Maßes auf den Zylindermengen in [Pet83, S. 7]

plausibel machen. Die innere Energie des Ising-Modells kommt durch entgegengerichtete benachbarte Spins zustande. Benachbarte Spins zeigen also die Tendenz, sich einander parallel anzuordnen und Gruppen gleichgerichteter Spins (*Domänen*) zu bilden. Die Bindungen zwischen entgegengesetzt gerichteten Domänen bezeichnet man als *Domänenwände*. Die Wahrscheinlichkeit, daß sich unter einem lokalen Monte-Carlo-Verfahren wie dem Metropolis-Algorithmus eine große Domäne komplett umdreht, ist verschwindend (exponentiell) gering. Um von einer Konfiguration zu einer davon deutlich verschiedenen zu gelangen, ist es also nötig, daß sich die Spins an den Domänenwänden umdrehen, die Domänenwände sich verschieben, und damit Domänen schrumpfen und wachsen oder verschwinden und neu entstehen. Dies ist natürlich ein langwieriger Prozeß.

Eine starke Beschleunigung läßt sich durch die Verwendung von nicht-lokalen Monte-Carlo-Schritten erzielen. Solche Verfahren sind der Gegenstand des folgenden Abschnitts.

1.4 Cluster-Algorithmen

Der erste Monte-Carlo-Algorithmus für Spin-Systeme mit nicht-lokalem Monte-Carlo-Schritt wurde 1987 von Swendsen und Wang vorgeschlagen [SwWa87]. Konzeptionell etwas leichter zu verstehen ist die 1989 von Wolff [Wol89] vorgestellte Variante. Diese beschreibe ich deshalb zuerst. Für eine Übersicht über verschiedene Cluster-Algorithmen siehe [BaNe99].

1.4.1 Der Wolff-Algorithmus

Die Übergangsfunktion des Wolff-Algorithmus [Wol89] besteht aus zwei Teilen. Zunächst wird ein *Cluster* gebildet, indem Bindungen ausgewählt werden, die eine Gruppe gleichgerichteter Spins untereinander verbinden. Deren Mitglieder werden dann in einem zweiten Schritt allesamt umgedreht.

Bindungsschritt:

- **Start:** Wähle zufällig einen Punkt des Graphen als Keimstelle für den Cluster.
- **Wachstum:** Füge solange alle gleichorientierten Nachbarn j aller noch nicht bearbeiteten Spins i des Clusters mit einer Zufüge-Wahrscheinlichkeit $p_{ij} = 1 - e^{-2\beta J_{ij}}$ zum Cluster hinzu, bis alle Spins des Clusters bearbeitet sind.

Spinschritt: Drehe alle Spins des Clusters um.

Zu zeigen ist nun wieder, daß das Verfahren ergodisch ist und die Forderung nach Detailed Balance erfüllt. Die Ergodizität ergibt sich ganz analog wie beim Metropolis-Algorithmus mit zufälligem Auswählen der Spins. Sei d die Anzahl der Spins, in denen sich zwei Konfigurationen unterscheiden. Dann kann die eine von der anderen aus in d Schritten erreicht werden, nämlich dann, wenn nacheinander

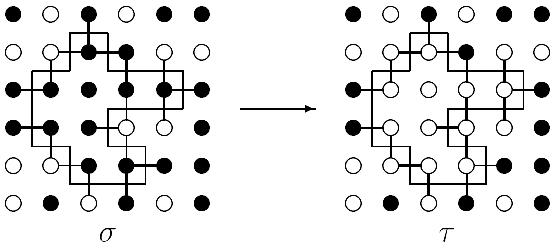


Abbildung 1.1: Wolff-Algorithmus: Übergang von einer Konfiguration $\boldsymbol{\sigma}$ zu einer Konfiguration $\boldsymbol{\tau}$ durch Umdrehen eines Clusters. Dicke Linien bezeichnen erfüllte Bindungen am Rand des Clusters, dünne unerfüllte.

jeder dieser Spins als Keimstelle ausgewählt wird, aber keine weiteren Spins zum Cluster zugefügt werden.

Um zu zeigen, daß die Forderung der Detailed Balance erfüllt ist, beachten wir zunächst, daß in jedem Wolff-Schritt genau ein Cluster umgedreht wird, und sei es nur ein einzelner Spin. Alle Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen Konfigurationen, die sich gar nicht oder in mehr als einer zusammenhängenden Gruppe gleichgerichteter Spins[16] unterscheiden, verschwinden also. Betrachten wir nun den Übergang einer Konfiguration $\boldsymbol{\sigma}$ in eine Konfiguration $\boldsymbol{\tau}$, die sich genau durch die Orientierung der Spins eines Clusters $\mathcal{C}$ unterscheiden, wie in Abbildung 1.1 dargestellt ist. Wir nehmen wieder die Aufteilung der Übergangswahrscheinlichkeit in Auswahl- und Akzeptanzwahrscheinlichkeit vor, $P(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma}) = g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})$.

$g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})$ enthält nun eine Summe über alle Möglichkeiten, den Cluster zu erhalten, d.h. über alle möglichen Keimstellen $k \in \mathcal{C}$ und alle möglichen Wachstumsprozesse w, die zum selben Cluster führen. Letztere können wir kodieren als eine Liste der betrachteten Bindungen zwischen gleichgerichteten Spins – solche werden wir in Zukunft *erfüllte* Bindungen nennen – zusammen mit der Entscheidung, ob der betreffende Spin in den Cluster aufgenommen wurde. Die Menge aller möglichen Wachstumsprozesse w, die in $\boldsymbol{\sigma}$ mit Keimstelle k zu $\mathcal{C}$ führen, bezeichnen wir mit $W^{\sigma}_{\mathcal{C},k}$. Wir haben also

$$g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k\in\mathcal{C}} \frac{1}{N} \sum_{w\in W^{\sigma}_{\mathcal{C},k}} P(w).$$

Dabei bezeichne $P(w)$ die Wahrscheinlichkeit, daß w auftritt, also das Produkt von Faktoren p_{ij} für alle Bindungen $\langle i, j\rangle$ in w, die ausgewählt wurden, und $(1 - p_{ij})$ für alle, die nicht ausgewählt wurden. Alle Summanden $P(w)$ haben einen Faktor für die Bindungen des Randes gemeinsam, nämlich für jede erfüllte Bindung einen

[16] Bei Konfigurationen (ohne ausgewählte Bindungen) ist es streng genommen nicht sinnvoll, von einem Cluster zu sprechen, da dieser erst durch das Auswählen von Bindungen entsteht. Im Normalfall ist ein Cluster kleiner als die Gruppe gleichgerichteter Spins, in der er liegt.

Faktor $(1-p_{ij})$. Dieser Faktor läßt sich ausklammern:

$$g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma}) = P_{\text{Rand}}^{\mathcal{C},\boldsymbol{\sigma}} \sum_{k\in\mathcal{C}} \frac{1}{N} \sum_{w\in W_{\mathcal{C},k}^{\boldsymbol{\sigma}}} \frac{P(w)}{P_{\text{Rand}}^{\mathcal{C},\boldsymbol{\sigma}}}, \qquad P_{\text{Rand}}^{\mathcal{C},\boldsymbol{\sigma}} = \prod_{\substack{\langle i,j\rangle \text{ erfüllt in } \boldsymbol{\sigma} \\ \text{am Rand von } \mathcal{C}}} (1-p_{ij})$$

Die restliche Summe kommt aber auch in der Auswahlwahrscheinlichkeit $g(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})$ der Gegenrichtung vor, und wir interessieren uns nur für den Quotienten der beiden.

Seien nun zur Erleichterung des Verständnisses und der Notation zunächst alle Kopplungen identisch, $J_{ij}=J$, und damit auch $p_{ij}=p$. Es bezeichne m die Anzahl der erfüllten Bindungen des Randes und n die Anzahl der unerfüllten (die dann in der Gegenrichtung gerade die erfüllten sind). Dann soll (1.7) gelten:

$$\frac{P(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})}{P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})} = \frac{g(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})}{g(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})}\frac{A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})}{A(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})} = (1-p)^{m-n}\frac{A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})}{A(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})} \stackrel{!}{=} e^{-\beta(\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau})-\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}))} \tag{1.11}$$

Mit $\mathcal{H}(\boldsymbol{\tau})-\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}) = -2(n-m)J$ erhalten wir daraus die Bedingung:

$$\frac{A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma})}{A(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau})} = \left(e^{2\beta J}(1-p)\right)^{n-m} \tag{1.12}$$

Für $p=1-e^{-2\beta J}$ ist die rechte Seite 1, und $A(\boldsymbol{\tau}|\boldsymbol{\sigma}) = A(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau}) =: A$ kann beliebig gewählt werden. Beim Wolff-Algorithmus ist die Wahl $A=1$ optimal, der Cluster wird also immer umgedreht. Jeder kleinere Wert für A würde die Korrelation aufeinanderfolgender Konfigurationen unnötig erhöhen.

Im Fall beliebiger Kopplungsstärken J_{ij} und entsprechender Zufüge-Wahrscheinlichkeiten p_{ij} wird aus dem Ausdruck $(1-p)^{m-n}$ in (1.11) der Quotient der Produkte der $(1-p_{ij})$ über die in $\boldsymbol{\sigma}$ und $\boldsymbol{\tau}$ erfüllten Bindungen am Rand des Clusters, $P_{\text{Rand}}^{\mathcal{C},\boldsymbol{\sigma}}/P_{\text{Rand}}^{\mathcal{C},\boldsymbol{\tau}}$. Entsprechend findet sich in (1.12) jeweils ein zugehöriger Boltzmann-Faktor $e^{2\beta J_{ij}}$, so daß A für $p_{ij}=1-e^{-2\beta J_{ij}}$ wieder beliebig gewählt werden kann.

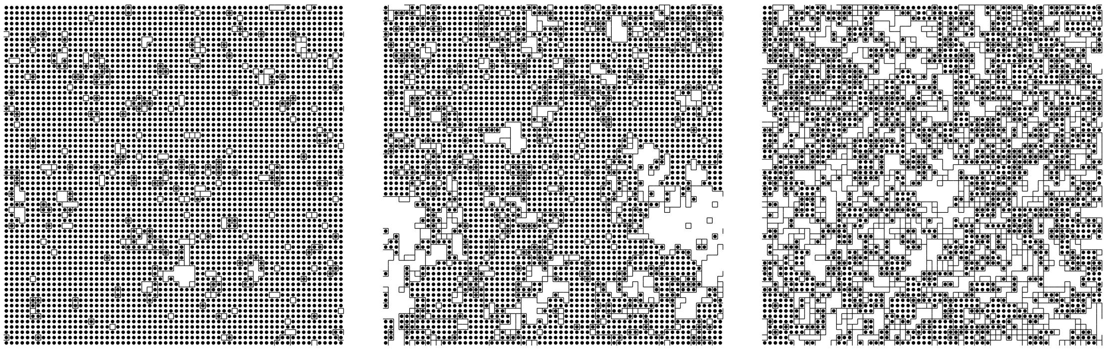
1.4.2 Der Swendsen-Wang-Algorithmus (SW)

Im Algorithmus von Swendsen und Wang [SwWa87], im folgenden SW abgekürzt, wird nicht nur ein Punkt Keimstelle der Clusterbildung, sondern alle Punkte des Graphen simultan.

Bindungsschritt: Wähle jede erfüllte Bindung $\langle i,j\rangle$ mit einer Bindungs-Wahrscheinlichkeit $p_{ij}=1-e^{-2\beta J_{ij}}$ aus.

Spinschritt: Drehe die Spins jedes so entstandenen Clusters mit Wahrscheinlichkeit 1/2 um.

Auch hier müssen wir zeigen, daß die Forderungen nach Ergodizität und Detailed Balance erfüllt sind. Bei der ersteren ist dies sofort klar, da jeder Spin einzeln



$\beta = 0.5 > \beta_c$ $\beta = 0.4384 \approx \beta_c$ $\beta = 0.3 < \beta_c$

Abbildung 1.2: Typische Spin- und Cluster-Konfigurationen des Ising-Modells auf dem Quadratgitter mit 32^2 Spins und periodischen Randbedingungen. Die Konfigurationen wurden mit dem SW-Algorithmus erzeugt. Punkte bezeichnen +-, leere Plätze −-Spins. Die Cluster sind jeweils von Linien umrandet.

ausgewählt werden und dann jeden beliebigen Wert annehmen kann. Detailed Balance ergibt sich wie im Fall des Wolff-Algorithmus aus der Betrachtung der erfüllten und unerfüllten Bindungen zwischen den Clustern. Dies führe ich hier nicht weiter aus. In Abschnitt 1.4.5 wird direkt gezeigt, daß die kanonische Verteilung die Gleichgewichtsverteilung des SW-Algorithmus ist, also die erste Forderung auf Seite 9 erfüllt wird.

Auch beim SW-Algorithmus kann die Akzeptanzwahrscheinlichkeit beliebig gewählt werden, sofern sichergestellt ist, daß sie in beiden Richtungen gleich groß ist. Optimal ist natürlich der Wert 1/2, weil damit die Korrelationen zwischen aufeinanderfolgenden Konfigurationen minimiert werden. Zusätzlich kann z.B. der größte Cluster immer umgedreht werden, um die Fluktuation zu erhöhen.

1.4.3 Typische Systemkonfigurationen

Bevor wir die bisher vorgestellten Algorithmen vergleichen, ist es sinnvoll, sich die Eigenschaften des Ising-Modells unterhalb, oberhalb und am kritischen Punkt zu veranschaulichen. Die in Abschnitt 1.2.2 gemachten Überlegungen sollen hier verfeinert und um die Beschreibung des Verhaltens der vom SW-Algorithmus niedergelegten Bindungen ergänzt werden.

Für Temperaturen unterhalb der kritischen Temperatur ($\beta > \beta_c$) überwiegt das Minimieren der inneren Energie E beim Minimieren der freien Energie $F = E - TS$. Dies führt dazu, daß der überwiegende Teil der Spins in dieselbe Richtung zeigt. Weiterhin ist die Bindungswahrscheinlichkeit $p = 1 - e^{-2\beta J}$ des SW-Algorithmus so groß, daß die meisten erfüllten Bindungen ausgewählt werden. Das führt dazu, daß es einen systemfüllenden Cluster gibt, in dem einige kleine Cluster liegen (wenn man will, die „Anregungen“ vom Grundzustand). Dies alles ist im linken Bild von

Abbildung 1.2 gut zu erkennen.

Oberhalb der kritischen Temperatur ($\beta < \beta_c$) dagegen dominiert das Maximieren der Entropie S; die Spins sind weitgehend unabhängig voneinander und bilden entsprechend kleine Gruppen gleichgerichteter Spins. Ferner ist die Bindungswahrscheinlichkeit deutlich kleiner als unterhalb der kritischen Temperatur. Es entstehen somit nur kleine Cluster, speziell für große Systeme praktisch keine, die mit der Systemgröße vergleichbar wären. Dieses Verhalten wird auch aus dem rechten Bild von Abbildung 1.2 ersichtlich.

Direkt am kritischen Punkt ist das Verhalten einerseits eine Mischung aus den anderen beiden Fällen, andererseits auch qualitativ von diesen verschieden. Es entstehen Cluster aller Größen. Die Verteilung der Clustergrößen gehorcht einem Potenzgesetz, worin sich wieder einmal die Skaleninvarianz des Systems am kritischen Punkt äußert. Die Cluster selbst bilden Fraktale. Betrachtet man einen festen Ausschnitt und teilt ihn in L^d (Hyper-)Kuben – L ist sozusagen das Reziproke der „Auflösung“ –, so skaliert das von einem Cluster ausgefüllte Volumen wie L^D mit einem nicht-ganzzahligen Exponenten D, der sog. *fraktalen Dimension*.[17]

1.4.4 Vergleich der Algorithmen

Für Temperaturen in der Nähe der kritischen Temperatur stellen der Wolff-Algorithmus und der Swendsen-Wang-Algorithmus eine wesentliche Verbesserung des Metropolis-Algorithmus dar. Dies schlägt sich in vergleichsweise kleinen dynamischen Exponenten nieder, für das Quadratgitter z.B. $z \simeq 0.25(1)$ [CoBa92] (verglichen mit $z \simeq 2.1665(12)$ [NiBl96]).

In diesem Fall zeigen die beiden Clusteralgorithmen im Rahmen der Genauigkeit keinen Unterschied. In höheren Dimensionen dagegen schneidet der Wolff-Algorithmus deutlich besser ab, vgl. die Zusammenfassung in [BaNe99]. Für $d \to \infty$ gilt $z_{\mathrm{SW}} \to 1$ [RTK89] und $z_{\mathrm{Wolff}} \to 0$ [TBK90]. Dies liegt vermutlich daran, daß beim Wolff-Algorithmus die Wahrscheinlichkeit, einen Cluster auszuwählen, proportional zu dessen Größe ist, während beim SW-Algorithmus alle Cluster gleich behandelt werden. Der Wolff-Algorithmus dreht also vor allem große Cluster um, was einer großen Veränderung und damit einer schnelleren Dekorrelation der Observablen entspricht, während der SW-Algorithmus viel Zeit auf kleine Cluster verschwendet. (Eine ausführlichere Diskussion findet man in [TBK90].)

Um diesen Unterschied zwischen den beiden Algorithmen besser zu verstehen, denke man sich vor der Anwendung des Monte-Carlo-Schritts bereits für jede Bindung eine Zufallszahl gezogen. Für den SW-Algorithmus ist damit die Cluster-Konfiguration schon festgelegt. Beim Wolff-Algorithmus wird einer der SW-Cluster mit der Auswahl irgendeiner seiner Spins als Keimstelle ausgewählt. Dies geschieht offensichtlich mit einer Wahrscheinlichkeit proportional zu seiner Größe.

Mit dem Wolff-Algorithmus oder dem SW-Algorithmus kommt man im Vergleich zum Metropolis-Algorithmus in gleicher Rechenzeit näher an den kritischen

[17] Später, in Abschnitt 1.5.6, wird benutzt, daß D gerade der Exponent y_h ist.

Punkt heran, und die kritischen Werte lassen sich genauer bestimmen. Aber auch diese beiden Algorithmen zeigen kritische Verlangsamung, so daß auch hier der Genauigkeit durch die Rechenzeit eine (oft unbefriedigende) Grenze gesetzt ist. Für den Swendsen-Wang-Algorithmus existiert eine rigorose untere Schranke für z, die sog. *Li-Sokal-Schranke* $z \geq \alpha/\nu = 2y_t - d$ [LiSo89]. Beim Ising-Modell auf dem Quadratgitter ist sie 0(log). Für Temperaturen weit weg vom kritischen Punkt sind die beiden Algorithmen aufgrund ihrer Komplexität dem einfachen Metropolis-Algorithmus unterlegen.

In Abschnitt 1.5 wird ein Algorithmus vorgestellt, der auf dem SW-Algorithmus basiert, aber speziell auf die Simulation des kritischen Punkts ausgelegt ist. Er weist deutlich weniger kritische Verlangsamung auf als die beiden bisher vorgestellten Cluster-Algorithmen. Um die Funktionsweise dieses Algorithmus besser verstehen zu können, wenden wir uns im folgenden Abschnitt der theoretischen Grundlage des SW-Algorithmus zu.

1.4.5 Graphische Darstellung

Der Swendsen-Wang-Algorithmus basiert auf der von Fortuin und Kasteleyn eingeführten [KaFo69, FoKa72] *graphischen Darstellung* (graphical representation), die als eine alternative Beschreibung eines (feldfreien[18]) Spin-Systems angesehen werden kann.

Betrachtet wird auf einem Graphen $G = (P, E)$ neben einer Spin-Konfiguration $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_i)_{i \in P}$ $(\sigma_i \in \{+, -\})$ vorerst unabhängig davon eine Bindungskonfiguration $\boldsymbol{\omega} = (\omega_{ij})_{\langle i,j \rangle \in E}$. Jede Bindung $\langle i, j\rangle$ kann entweder *ausgewählt* sein ($\omega_{ij} = 1$) oder nicht ($\omega_{ij} = 0$). Wieder seien zunächst alle Kopplungsstärken identisch. Gilt für die Spin-Konfiguration die kanonische Verteilung (1.1) und werden Bindungen mit Wahrscheinlichkeit $p = 1 - e^{-2\beta J}$ nach dem SW-Algorithmus ausgewählt, so gilt für Paare $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega})$ die von Swendsen, Wang, Edwards und Sokal [EdSo88] gefundene gemeinsame Verteilung (im folgenden *SWES-Verteilung* abgekürzt):

$$P(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{Z'} \underbrace{p^{|\boldsymbol{\omega}|}(1-p)^{|E|-|\boldsymbol{\omega}|}}_{=:B_p(\boldsymbol{\omega})} \Delta(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) \tag{1.13}$$

Dabei bezeichne $|E|$ die Gesamtzahl der Bindungen des Graphen und $|\boldsymbol{\omega}|$ die Zahl der ausgewählten Bindungen in $\boldsymbol{\omega}$. $\Delta(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega})$ sei 1, wenn die Wahl der Bindungen in $\boldsymbol{\omega}$ mit $\boldsymbol{\sigma}$ verträglich ist, also nur erfüllte Bindungen ausgewählt wurden, und 0 sonst. Z' sei die Zustandssumme des Ising-Modells mit um $J|E|$ verschobener Energie $\mathcal{H}' = \mathcal{H} + J|E|$. Es ist $Z' = Ze^{-\beta J|E|}$. $B_p(\boldsymbol{\omega})$ ist die Wahrscheinlichkeit, genau die in $\boldsymbol{\omega}$ bezeichneten Bindungen auszuwählen. Sind die Kopplungsstärken

[18] Auf Modelle mit Feldern wird in Abschnitt 1.7 eingegangen.

J_{ij} beliebig, so geht $B_p(\boldsymbol{\omega})$ in

$$B_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{\omega}) = \prod_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \text{mit } \omega_{ij}=1}} p_{ij} \prod_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \text{mit } \omega_{ij}=0}} (1 - p_{ij}) \tag{1.14}$$

mit den Bindungswahrscheinlichkeiten $p_{ij} = 1 - e^{-2\beta J_{ij}}$ über.

Die Randverteilungen der SWES-Verteilung bezüglich $\boldsymbol{\sigma}$ und $\boldsymbol{\omega}$ sind

$$\sum_{\boldsymbol{\omega}} P(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})} = P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}), \tag{1.15}$$

$$\sum_{\boldsymbol{\sigma}} P(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{Z'} B_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{\omega}) 2^{C(\boldsymbol{\omega})} =: P_{\mathrm{RC}}(\boldsymbol{\omega}). \tag{1.16}$$

Dabei bezeichne $C(\boldsymbol{\omega})$ die Anzahl der Cluster einschließlich der isolierten Spins, und $2^{C(\boldsymbol{\omega})}$ ist die Anzahl der Möglichkeiten, die 2 möglichen Spinwerte auf die $C(\boldsymbol{\omega})$ Cluster zu verteilen. Die Ableitung der Gleichungen (1.15) und (1.16) wird im Anhang A.1 gegeben. Die Randverteilungen sind also gerade die kanonische Verteilung P_{KE} für die Spin-Konfiguration und die sogenannte *Random-Cluster-Verteilung* P_{RC} [FoKa72], die die Wahrscheinlichkeit des Auftretens der Bindungskonfigurationen im SW-Algorithmus beschreibt.

Der Bindungsschritt des SW-Algorithmus entspricht der Auswahl einer Bindungskonfiguration $\boldsymbol{\omega}$ bei gegebener Spinkonfiguration $\boldsymbol{\sigma}$ mit der bedingten Wahrscheinlichkeit $P(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\sigma}) = \Delta(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) p^{|\boldsymbol{\omega}|}(1-p)^{\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})-|\boldsymbol{\omega}|}$. Dabei bezeichne $\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})$ die Anzahl der erfüllten Bindungen in $\boldsymbol{\sigma}$. Analog entspricht der Spinschritt der bedingten Wahrscheinlichkeit $P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\omega}) = \Delta(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) 2^{-C(\boldsymbol{\omega})}$. Für diese Wahrscheinlichkeiten gilt, wie im Anhang A.2 gezeigt wird,

$$P(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\sigma}) P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}) = P(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}), \tag{1.17}$$

$$P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\omega}) P_{\mathrm{RC}}(\boldsymbol{\omega}) = P(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}). \tag{1.18}$$

Unter Ausnutzung von (1.15) bis (1.18) läßt sich nun leicht zeigen, daß die kanonische Verteilung die Gleichgewichtsverteilung des SW-Algorithmus ist:

$$\sum_{\boldsymbol{\tau}} P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\tau}) P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\tau}) = \sum_{\boldsymbol{\omega}} P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\omega}) \sum_{\boldsymbol{\tau}} P(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\tau}) P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\tau}) =$$
$$\sum_{\boldsymbol{\omega}} P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\omega}) \sum_{\boldsymbol{\tau}} P(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\omega}) = \sum_{\boldsymbol{\omega}} P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\omega}) P_{\mathrm{RC}}(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{\boldsymbol{\omega}} P(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) = P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma})$$

Für gewisse Observable $A(\boldsymbol{\sigma})$ lassen sich *Pendants im Bindungsbild* $\tilde{A}(\boldsymbol{\omega})$ finden, für die $\langle A(\boldsymbol{\sigma}) \rangle_{\mathrm{KE}} = \langle A(\boldsymbol{\sigma}) \rangle_{\mathrm{SWES}} = \langle \tilde{A}(\boldsymbol{\omega}) \rangle_{\mathrm{SWES}} = \langle \tilde{A}(\boldsymbol{\omega}) \rangle_{\mathrm{rc}}$ gilt. Für solche Observablen sind SWES-, kanonische und Random-Cluster-Verteilung also äquivalent. Hierfür geben wir ein Beispiel, daß im folgenden wichtig sein wird.

Es ist interessant festzustellen, daß die Korrelation zweier Spins i und j, $\langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \rangle$, im feldfreien Fall mit dem Erwartungswert der Größe $\chi_{ij}(\boldsymbol{\omega})$

aus dem Bindungsbild übereinstimmt, die 1 ist, wenn i und j bezüglich $\boldsymbol{\omega}$ in einem Cluster sind, und sonst verschwindet. Dies bedeutet, daß langreichweitige Ordnung der Spins, $\rho \neq 0$ (1.5), genau dann auftritt, wenn die Bindungen perkolieren. *Perkolation* der Bindungen soll bedeuten, daß die Wahrscheinlichkeit für beliebig weit entfernte Spins, über ausgewählte Bindungen verbunden zu sein, nicht Null ist (vgl. z.B. [StAh95, Gri99]). Dem Ansatz der langreichweitigen Ordnung am kritischen Punkt T_c entspricht also die Perkolationsschwelle der Bindungen

$$p_\mathrm{c} = 1 - e^{-2\beta_\mathrm{c} J}. \tag{1.19}$$

Denn ohne äußere Felder verschwinden die Erwartungswerte der Spins, $\langle\sigma_i\rangle = 0$, also geht die Korrelationsfunktion in die Zweipunktfunktion über, $\langle(\sigma_i - \langle\sigma_i\rangle)(\sigma_j - \langle\sigma_j\rangle)\rangle = \langle\sigma_i\sigma_j\rangle$, und es gilt:

$$\begin{aligned}
\langle\sigma_i\sigma_j\rangle &= 2\langle\delta_{\sigma_i,\sigma_j}\rangle - 1 \\
&= 2\left[\frac{1}{Z'}\sum_{\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\sigma}} B_p(\boldsymbol{\omega})\Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega})\delta_{\sigma_i,\sigma_j}\right] - 1
\end{aligned}$$

Wir führen nun die Summation über $\boldsymbol{\sigma}$ aus. Zunächst stellt $\delta_{\sigma_i,\sigma_j}$ sicher, daß die Spins i und j gleichgerichtet sind. Nun unterscheiden wir die Fälle, daß i und j im selben oder in verschiedenen Clustern sind ($\chi_{ij} = 1$ bzw. $\chi_{ij} = 0$). Im ersten Fall bedeutet dies keine Einschränkung an die Anzahl der mit $\boldsymbol{\omega}$ verträglichen Spin-Konfigurationen, wir erhalten $2^{C(\boldsymbol{\omega})}$. Im zweiten Fall jedoch müssen die Cluster, in denen sich i und j befinden, gleichgerichtet sein, wir erhalten nur $2^{C(\boldsymbol{\omega})-1}$:

$$\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = 2\left[\frac{1}{Z'}\sum_{\boldsymbol{\omega}} B_p(\boldsymbol{\omega})\left(\chi_{ij}(\boldsymbol{\omega})2^{C(\boldsymbol{\omega})} + (1-\chi_{ij}(\boldsymbol{\omega}))2^{C(\boldsymbol{\omega})-1}\right)\right] - 1$$

Schließlich fassen wir zusammen und nutzen die Normiertheit der Random-Cluster-Verteilung aus, $\sum_{\boldsymbol{\omega}} P_\mathrm{RC}(\boldsymbol{\omega}) = 1$:

$$\begin{aligned}
\langle\sigma_i\sigma_j\rangle &= \frac{1}{Z'}\sum_{\boldsymbol{\omega}} B_p(\boldsymbol{\omega})2^{C(\boldsymbol{\omega})}\chi_{ij}(\boldsymbol{\omega}) \\
&= \langle\chi_{ij}(\boldsymbol{\omega})\rangle
\end{aligned} \tag{1.20}$$

1.5 Der Invaded-Cluster-Algorithmus (IC)

1.5.1 Der Algorithmus

Dem 1995 von Machta et al. [MCLSC95] vorgestellten Invaded-Cluster-Algorithmus[19] (IC) liegt die Idee zugrunde, den Zusammenhang (1.20) auszunutzen, um die Simulation des Systems am kritischen Punkt zu erzwingen. Auf der Basis des Swendsen-Wang-Algorithmus[20] wird ein Verfahren konstruiert, das selbstorganisiert die kritische Temperatur auch ohne vorherige Kenntnis derselben findet und dort das System simuliert. Wie (1.20) genau ausgenutzt werden kann, ist nicht von vornherein klar. Nach [MCLSC96, CMTC99] ist die im folgenden dargestellte Variante am effizientesten. Alternativen werden in Abschnitt 1.5.5 erwähnt.

Ich gebe hier den bereits veröffentlichten Algorithmus für den Fall identischer Kopplungsstärken wieder, die Erweiterung auf beliebige Kopplungsstärken wird in Abschnitt 3.1 dargestellt.

Bindungsschritt: Wähle erfüllte Bindungen in zufälliger Reihenfolge aus, bis eine *Abbruch-Bedingung* erfüllt ist – zur Simulation des kritischen Punktes: bis ein Cluster perkoliert (oder alle Bindungen ausgewählt sind).

Spinschritt: Drehe die Spins jedes so entstandenen Clusters mit Wahrscheinlichkeit 1/2 um.

Damit das Verfahren funktionieren kann, müssen wir uns auf periodisch geschlossene Graphen beschränken, die die Umrundung des Systems in jeder der d Dimensionen gestatten. Im folgenden werden dies immer periodische Approximanten[21] unendlicher Graphen sein. *Perkolation* eines Clusters definiert man als dann gegeben, wenn es möglich ist, auf ausgewählten Bindungen das System in mindestens einer Dimension zu umrunden.

Um den Bezug zum Swendsen-Wang-Algorithmus herzustellen, betrachten wir das *Akzeptanzverhältnis* (acceptance ratio) der erfüllten Bindungen

$$f := \frac{\text{Anzahl ausgewählter Bindungen}}{\text{Anzahl erfüllter Bindungen}}. \tag{1.21}$$

Der Erwartungswert dieser Größe bezüglich der SWES-Verteilung (1.13) ist gerade die Bindungs-Wahrscheinlichkeit des Swendsen-Wang-Algorithmus, $\langle f \rangle = p = 1 - e^{-2\beta J}$. Deshalb liegt es umgekehrt nahe, durch die Relation

$$f = 1 - e^{-2J\beta_{\text{est}}} \quad \Leftrightarrow \quad \beta_{\text{est}} = -\frac{1}{2J}\ln(1-f) \tag{1.22}$$

eine Schätzung β_{est} für die (bei dieser Abbruch-Bedingung kritische) inverse Temperatur zu gewinnen.

[19] invaded: von dem Invasions-Perkolations-Verfahren (vgl. z.B. [StAh95, Abschnitt 6.6]), auf dem der Algorithmus beruht

[20] Versuche auf der Basis des Wolff-Algorithmus haben nicht zu befriedigenden Ergebnissen geführt [Luc95].

[21] Vgl. Seite 2. Auf periodische Approximanten quasiperiodischer Muster wird in Abschnitt 2.2.1 eingegangen.

1.5.2 Warum funktioniert IC?

Wir wollen den Mechanismus, der das System selbstorganisiert in den kritischen Zustand bringt, zunächst intuitiv verstehen. Dazu betrachten wir, wie sich IC auf den schon in Abschnitt 1.4.3 behandelten drei typischen Fällen von Konfigurationen verhält:

Ist die Konfiguration typisch für $T < T_c$, dann gibt es eine systemfüllende Gruppe gleichgerichteter Spins. Auf dieser ist Perkolation leicht. Die Anzahl der erfüllten Bindungen ist größer, und es werden sehr wahrscheinlich weniger Bindungen ausgewählt als im kritischen Fall. Also ist das Akzeptanzverhältnis ebenfalls kleiner, $f < f_c$. So entstehen vornehmlich kleinere Cluster, was einer höheren Temperatur entspricht.

Ist die Konfiguration dagegen typisch für $T > T_c$, so gibt es viele kleine Gruppen gleichgerichteter Spins. Auf diesen ist Perkolation schwierig oder sogar unmöglich[22]. Es gibt weniger erfüllte Bindungen, und es werden mehr Bindungen benötigt als im kritischen Fall. Damit ist $f > f_c$, und es enstehen größere Cluster, was einer niedrigeren Temperatur entspricht.

Im Fall einer „kritischen“ Konfiguration $T \approx T_c$ gibt es Cluster aller Größen. Die Zahl der zur Perkolation nötigen und die der erfüllten Bindungen bleiben ungefähr konstant, f wird mit großer Wahrscheinlichkeit wieder in der Nähe von f_c liegen.[23]

Es handelt sich also um einen negativen Rückkopplungsmechanismus. Daß die Stärke der Rückkopplung gerade groß genug ist und nicht etwa dazu führt, daß abwechselnd viel zu „kalte“ und viel zu „warme“ Konfigurationen erzeugt werden, ist auf dieser Ebene nicht sofort einsichtig.

Eine typische von IC erzeugte kritische Spin- und Bindungs-Konfiguration ist in Abbildung 1.3 dargestellt.

1.5.3 Beobachtungen

Da der Invaded-Cluster-Algorithmus noch relativ neu und weiterhin aktives Forschungsgebiet ist, gibt es bisher wenige rigorose Aussagen über seine Eigenschaften. In diesem Abschnitt fasse ich deshalb einige empirische Ergebnisse zusammen:

- Die kritische Temperatur T_c des Ising-Modells auf dem Quadratgitter wird in [MCLSC95] auf ca. drei signifikante Stellen bestimmt: $k_B T_c \simeq 2.271(2)$[24] verglichen mit dem exakten Wert $k_B T_c \simeq 2.269$. Der Rechenaufwand war dabei relativ gering: knapp 2 Tage auf einer DEC ALPHA 2100 (11 Systemgrößen

[22] z.B. bei schachbrettartiger Verteilung der Spins

[23] Auf sog. Flaschenhälse in zwei Dimensionen, die ein zu großes f zur Folge haben, wird in Abschnitt 2.1.2 eingegangen.

[24] Angabe des (statistischen) Fehlers nach [BaNe99]

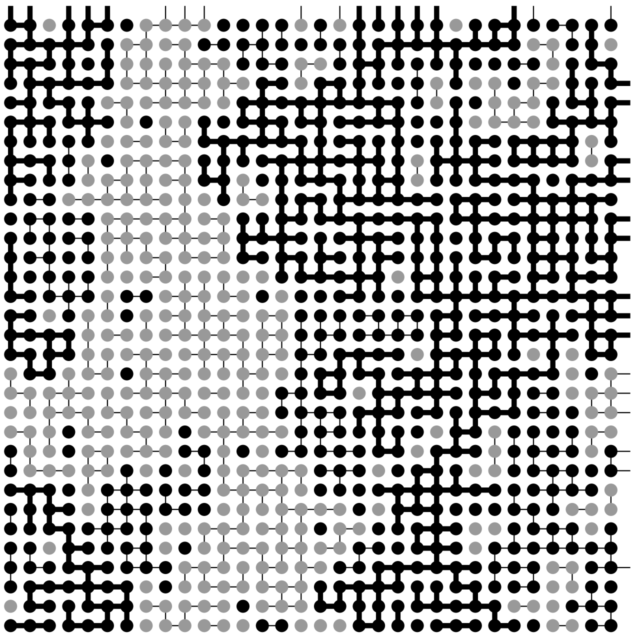


Abbildung 1.3: Eine typische von IC erzeugte kritische Spin- und Bindungs-Konfiguration auf dem Quadratgitter mit 32^2 Spins. Schwarze Punkte bezeichnen +-, graue −-Spins. Ausgewählte Bindungen sind als Linien gezeichnet, der perkolierende Cluster besteht aus den fettgezeichneten Linien.

bis 500^2 mit je 10^4 MCS und ca. $1.8 \cdot 10^{-5}$ Sekunden pro Spin) [MCLSC96]. Die Übereinstimmungen für das einfache kubische Gitter sind ähnlich gut.

- Für die mittlere Energie pro Spin ergibt sich dort -1.706 verglichen mit $-1.7071\ldots$

- Die Equilibrierung[25] erfolgt bis zu 25-mal schneller als bei SW, vor allem bei großen Systemen; ist man auch an Observablen endlicher Teilsysteme interessiert, so sind die nötigen Equilibrierungszeiten immerhin um einen Faktor 2 kürzer als bei SW und vergleichbar mit denen des Wolff-Algorithmus [MMC99].

- Für den dynamischen Exponenten z auf dem Quadratgitter wird in [MMC99] eine obere Schranke von 0.21 gefunden. Die Daten sind aber im Rahmen der Fehler auch mit einer logarithmischen Divergenz ($z = 0$) konsistent. Zum Vergleich: Für SW ergab sich $z \simeq 0.25(1)$ [CoBa92]. Auf dem 3-Zustands-Potts-Modell – im wesentlichen das Ising-Modell mit drei möglichen Spinwerten – verletzt IC sogar die Li-Sokal-Schranke $z \geq \alpha/\nu$ (vgl. Seite 18).

- Die Ergebnisse der Simulationen hängen nicht erkennbar von der Güte des

[25] vgl. auch Seite 27

verwendeten Zufallszahlengenerators ab [CMTC99], was z.B. beim Wolff-Algorithmus ein Problem sein kann [FLW92].

- Die Verteilung der Cluster-Größen folgt einem Potenzgesetz [MCLSC96], wie es am kritischen Punkt sein muß. (Da die von IC simulierte Verteilung nicht bekannt ist, wie im folgenden Abschnitt begründet wird, ist dies nicht von vornherein klar.)

1.5.4 Unterschiede zu SW

In Bezug auf das Verhalten von IC verglichen mit SW und damit dem kanonischen Ensemble stellen wir folgendes fest:

- Jede von IC erzeugte Konfiguration enthält genau einen gerade perkolierenden Cluster. Dies ist eine starke Einschränkung, die im kanonischen Ensemble (in endlichen Systemen) nur äußerst selten erfüllt ist.

- Die geschätzte inverse Temperatur β_{est} der erzeugten Konfiguration ist aufgrund der Rückkopplung immer stark von der vorhergehenden abhängig; β_{est} ändert sich also von Schritt zu Schritt. Der Begriff „Temperatur“ ist deshalb nur im Mittel sinnvoll.

- Außerdem sind damit notwendigerweise die Fluktuationen anders als im kanonischen Ensemble. Suszeptibilität und spezifische Wärme hängen also nicht (oder jedenfalls nicht in der gewohnten Weise) mit den Fluktuationen zusammen. Z.B. divergiert im Falle des Quadratgitters [MCLSC95] die mit der Anzahl der Spins multiplizierte Varianz der Energie pro Spin, $N\,\mathrm{var}(\epsilon)$, linear in N und nicht logarithmisch wie im kanonischen Ensemble. Diese Größe kann also nicht mit der spezifischen Wärme C zusammenhängen.

- Die spezifische Wärme und der Korrelationslängenexponent $\nu = 1/y_t$ (vgl. Abschnitt 1.2.4) können vermutlich gar nicht gemessen werden [MMC99, CMTC99].

Das von IC berechnete Ensemble, im folgenden *IC-Ensemble* genannt, ist also definitiv nicht das kanonische. Die Verteilung ist noch unbekannt. Im thermodynamischen Limes wird jedoch erwartet [MCLSC95], daß das IC-Ensemble dem kanonischen für $T = T_\mathrm{c}$ äquivalent ist.

1.5.5 Abbruch-Bedingungen

Neben der in Abschnitt 1.5.1 verwendeten Abbruch-Bedingung, daß ein Cluster perkoliert, sind noch weitere Abbruch-Bedingungen denkbar. Sie sollen hier nur kurz Erwähnung finden; für eine genauere Auseinandersetzung sei auf [MCLSC96, CMTC99] verwiesen.

- Zur Simulation des kritischen Punktes eignen sich neben der Perkolation eines Clusters in einer Dimension (1-span oder topological spanning rule) auch die Perkolation in $k \leq d$ Dimensionen (k-span rule) sowie die Bedingung, daß die lineare Ausdehnung eines Cluster in 1 bis d Dimensionen der Systemgröße L entspricht (extension spanning rule). Die besten Ergebnisse ergeben sich jedoch mit der in Abschnitt 1.5.1 verwendeten topologischen Abbruch-Bedingung.

- Um β in Abhängigkeit von der Magnetisierung m zu erhalten, kann man fordern, daß bei festen Randbedingungen die Anzahl der mit dem Rand verbundenen Spins mN erreicht (magnetization rule) bzw. bei freien oder periodischen Randbedingungen die Größe eines Clusters mN erreicht (mass rule).

- β in Abhängigkeit von der Suszeptibilität χ läßt sich mit Hilfe der Bedingung bestimmen, daß die Summe der Quadrate der Clustergrößen gerade χN erreicht (susceptibility rule).

- Für β in Abhängigkeit von der inneren Energie pro Spin ϵ eignen sich wieder zwei Bedinungen: Die Summe der Bindungen, deren Endpunkte im selben Cluster liegen, erreicht $\epsilon|E|/J$ (energy rule), oder die Anzahl der ausgewählten Bindungen erreicht $\rho(\epsilon)|E|$ (bond density rule).

1.5.6 Bestimmung von Zustands- und Verfahrensgrößen

In diesem Abschnitt soll angegeben werden, wie verschiedene Zustandsgrößen des Ising-Modells mit dem Invaded-Cluster-Algorithmus bestimmt und Aussagen über das Zeitverhalten des Verfahrens gemacht werden können.

Temperatur T

Es bieten sich zwei Varianten an. Man bestimmt zunächst $\langle f \rangle$ nach (1.21) und erhält dann mittels (1.22) die inverse (kritische) Temperatur, oder man bestimmt direkt $\langle \beta_{\text{est}}(f) \rangle$ nach (1.22). Beide Varianten führen für endliche Systeme auf systematisch verschiedene Ergebnisse, was an unterschiedlichen Fluktuationen beider Größen liegt und in zwei Dimensionen auch mit der in Abschnitt 2.1.2 besprochenen Asymmetrie der Verteilung von f zusammenhängt. Im thermodynamischen Limes stimmen sie jedoch überein, wie in Abschnitt 2.1.2 gezeigt wird. Es ist also gleichgültig, welche Variante man wählt.

Bei Modellen mit unterschiedlichen Kopplungsstärken muß das in Abschnitt 3.1 beschriebene Verfahren verwendet werden.

Innere Energie ϵ, Magnetisierung m

Diese Größen können direkt entsprechend ihrer Definition in Tabelle 1.1 bestimmt werden.

Suszeptibilität χ

Da die Magnetisierungs-Fluktuationen im IC-Ensemble nicht wie im kanonischen mit der Suszeptibilität zusammenhängen, muß man auf das Pendant im Bindungsbild zurückgreifen:

$$\chi(\boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{C(\boldsymbol{\omega})} C_i^2$$

Dabei bezeichnet $C(\boldsymbol{\omega})$ die Anzahl der Cluster in $\boldsymbol{\omega}$, C_i sei die Größe des i-ten Clusters, d.h. die Anzahl der ihn bildenden Spins.

Spezifische Wärme C

Diese Größe kann, wie in Abschnitt 1.5.4 bereits erwähnt, vermutlich nicht gemessen werden [MMC99].

Kritische Exponenten y_t, y_h

Wie in Abschnitt 1.5.4 bereits erwähnt, kann vermutlich nur y_h gemessen werden [CMTC99]. Dies geschieht über die Skalierungsrelation $\langle|m|\rangle \propto |T - T_\mathrm{c}|^{(d-y_h)/y_t}$ unter Verwendung von $\xi \propto |T - T_\mathrm{c}|^{-1/y_t}$, vgl. Tabelle 1.3. In einem endlichen System kann die Korrelationslänge nicht über die *lineare Ausdehnung* $L = \sqrt[d]{N}$ des Systems wachsen. Für die Betrachtung des kritischen Verhaltens können wir also L statt ξ verwenden und erhalten

$$\langle|m|\rangle \propto L^{y_h - d}.$$

Es stellt sich dabei als günstiger heraus, statt $|m|L^d$ das Pendant im Bindungsbild, die Größe (auch mass) des perkolierenden Clusters, M, zu benutzen. Dieser ist – als größter Cluster des Systems – für die (absolute) Magnetisierung des Systems verantwortlich, da die kleineren Cluster gleichwahrscheinlich diesem gleich- oder entgegengerichtet sind, zum Erwartungswert also nicht beitragen. Die Fluktuationen sind aber geringer, da die kleineren Cluster von vornherein ignoriert werden, nicht erst bei der Mittelwertsbildung. Die fraktale Dimension D des perkolierenden Clusters, $M \propto L^D$, ist dann gerade der Exponent y_h.

Autokorrelationszeiten $\boldsymbol{\tau}$

Die normierte Autokorrelationsfunktion $\Gamma_A(t)$ einer Observablen A und die zugehörige exponentielle und integrierte Autokorrelationszeit τ_exp bzw. τ_int wurden in Abschnitt 1.3.2 definiert. Da das Abfallverhalten von $\Gamma_A(t)$ nur im einfachsten Fall exponentiell und die numerische Bestimmung von τ_exp bei gegebenen Werten von $\Gamma_A(t)$ zudem aufwendig ist, ist ihr normalerweise die integrierte Autokorrelationszeit vorzuziehen. Die praktische Auswertung von $\Gamma_A(t)$ bei einer gegebenen

Folge von Konfigurationen $\boldsymbol{\sigma}^{(k)}$ $(k = 1, \ldots, S)$ geschieht durch Verwendung des folgenden zeitlichen Mittelwerts in (1.8):

$$\langle B(t') \rangle' = \frac{1}{S-w} \sum_{t'=1}^{S-w} B(\boldsymbol{\sigma}^{(t')})$$

Dabei muß $w = t$ im Falle $B(t') = A(t' + t)A(t')$ und $w = 0$ sonst gewählt werden. Für τ_{int} kann natürlich auch nur der Wert $\tau_{\text{int}}(w_{\max})$ bei einem maximalen $w_{\max} \ll S$ genommen werden. Zur optimalen Bestimmung siehe [MMC99, SaSo97].

Dynamischer Exponent z

Aus den obengenannten Gründen ist es zweckmäßig, zur Bestimmung des dynamischen Exponenten die integrierte statt der exponentiellen Autokorrelationszeit zu verwenden. Ferner ist, wie bereits erwähnt, die Korrelationslänge in kritischen endlichen Systemen im wesentlichen die lineare Systemgröße $L = \sqrt[d]{N}$. Für die praktische Auswertung definieren wir also den dynamischen Exponenten z (genauer z_{int}) über $\tau_{\text{int}} \propto L^z$. Eine präzise Bestimmung ist aber ein schwieriges Unterfangen. Für Details sei auf [MMC99, SaSo97] verwiesen.

Equilibrierung

Die Equilibrierung muß solange erfolgen, bis auch die langsamste Observable – oder zumindest die langsamste Observable, an deren Messung man interessiert ist – von ihrem Wert in der Anfangskonfiguration vollständig dekorreliert ist. S_{eq} muß also ein Vielfaches der (exponentiellen oder integrierten) Autokorrelationszeit dieser Observable sein.

Fehlerabschätzung

Im vorhergehenden haben wir es mit dem Schätzen von Erwartungswerten von Observablen A bezüglich des IC-Ensembles analog (1.6) zu tun gehabt. Um die zugehörigen statistischen Fehler abzuschätzen, greifen wir auf folgende Sachverhalte zurück (vgl. z.B. [Bra92, SaSo97]).

Seien X_i $(i = 1, \ldots, n)$ identisch verteilte, unabhängige Zufallsvariable. Dann gilt:

1. Der Vektor $\boldsymbol{X} = (X_i)$ heißt *Stichprobe* vom Umfang n. Seine Verteilung ist die n-fache Produktverteilung der Verteilung der X_i.

2. Die *Schätzung* eines Parameters λ der Verteilung der X_i geschieht durch eine Stichprobenfunktion $f(\boldsymbol{X})$. Sie heißt *erwartungstreu* oder *unverzerrt*, wenn ihr Erwartungswert bezüglich der Stichproben-Verteilung λ ist, $E(f(\boldsymbol{X})) = \lambda$, und *konsistent*, wenn die entsprechende Standardabweichung für große n gegen Null geht, $\lim_{n\to\infty} \sigma(f(\boldsymbol{X})) = 0$.

3. Der *Mittelwert der Stichprobe* (sample mean), $\overline{\boldsymbol{X}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$, ist Schätzung für den Erwartungswert $E(X_i)$ jeder einzelnen Zufallsvariable X_i. Er ist unverzerrt und konsistent, $E(\overline{\boldsymbol{X}}) = E(X_i)$ und $\sigma^2(\overline{\boldsymbol{X}}) = \sigma^2(X_i)/n \to 0$.

4. $s^2(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{\boldsymbol{X}})^2$ ist unverzerrte Schätzung für die Varianz $\sigma^2(X_i)$ jedes X_i.

5. $\Delta^2(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{n}s^2(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{\boldsymbol{X}})^2$ ist Schätzung für die *Varianz des Mittelwerts*, $\sigma^2(\overline{\boldsymbol{X}}) = \sigma^2(X_i)/n$.
   $\Delta(\boldsymbol{X})$ ist Schätzung für den *Fehler des Mittelwerts*.

Eine Möglichkeit, die Unabhängigkeit sicherzustellen, besteht darin, nach einer Equilibrierung von S_{eq} Schritten nS Einzelwerte $A(\boldsymbol{\sigma}^{(k)})$ in n Gruppen à S zu nehmen und die Mittelwerte der Gruppen als unabhängige X_i zu betrachten (vgl. z.B. [SaSo97]). S muß dabei natürlich so groß gewählt werden, daß alle Korrelationen abgeklungen sind. Dazu nimmt man am besten für S ein Vielfaches der größten gemessenen (integrierten) Autokorrelationszeit. Dann können wir durch $\overline{\boldsymbol{X}} \pm \Delta(\boldsymbol{X})$ den Erwartungswert der Observablen und den Fehler des Mittelwerts der Stichprobe schätzen.

1.6 Finite-Size-Scaling

Bei der Simulation eines Systems am kritischen Punkt mit Monte-Carlo-Simulationen ist man letztendlich an den Werten von Zustandsgrößen für das unendliche System interessiert bzw. an den Exponenten, mit denen sie divergieren. Da man allerdings nur endliche Systeme simulieren kann, braucht man eine Vorgehensweise, um auf das Verhalten des unendlichen Systems schließen zu können. Diese liefert das *Finite-Size-Scaling* (vgl. z.B. [Bar83]). Die zugrundeliegende *Skalierungs-Hypothese* (finite-size scaling hypothesis) besagt im wesentlichen, daß sich eine Zustandsgröße A in der Nähe des kritischen Punkts T_{c} wie

$$A(T, L) \approx A_{\mathrm{c}} L^{\rho/\nu} F(C|T - T_{\mathrm{c}}|^{\nu} L)$$

verhält, wobei F eine universelle Funktion für A ist. A_{c} und C sind Konstanten, ν der in Abschnitt 1.3.2 definierte Korrelationslängenexponent und ρ der kritische Exponent für A, $A \propto |T - T_{\mathrm{c}}|^{-\rho}$. Für nicht-singuläre Zustandsgrößen ist $\rho = 0$. Dieses Verhalten ist eine Konsequenz der Selbstähnlichkeit des Systems am kritischen Punkt und der Tatsache, daß die einzige relevante Längenskala in der Nähe desselben die in Abschnitt 1.3.2 definierte Korrelationslänge ξ ist, die sich dort wie $|T - T_{\mathrm{c}}|^{-\nu}$ verhält.

Für das kritische Verhalten der Zustandsgrößen erwartet man die Abhängigkeit

$$A(T_{\mathrm{r}}(L), L) \approx A_{\mathrm{c}} L^{\rho/\nu}. \tag{1.23}$$

$T_\mathrm{r}(L)$ ist die sogenannte *Rundungstemperatur* (rounding temperature), die „kritische“ Temperatur für endliche Systemgrößen, die man als Maximalstelle einer divergierenden Zustandsgröße wie z.B. der Suszeptibilität definiert, vgl. [Bar83]. Durch doppellogarithmisches Auftragen von A gegen $L^{1/\nu}$ erhält man den Exponenten ρ als Geradensteigung. Durch Information über spezielle Korrekturen (corrections to scaling, vgl. [Bar83]) an die Form (1.23) läßt sich die Genauigkeit der Bestimmung von ρ bzw. A_c verbessern.

Das beschriebene Verfahren ist aber nicht ohne weiteres auf den Invaded-Cluster-Algorithmus übertragbar. Für das IC-Ensemble existiert keine gute Theorie, weder für das Finite-Size-Scaling, noch für Korrekturen, so daß wir in Abschnitt 2.1.2 keine speziellen Eigenschaften des Skalenverhaltens benutzen können, sondern auf Heuristik angewiesen sind.

1.7 Das Ising-Modell mit äußeren Feldern

Wir haben im vorhergehenden nur das Ising-Modell ohne äußere Felder betrachtet. Der Fall mit Feldern wird auch für den Rest dieser Untersuchung keine Rolle spielen. Die Probleme, die bei Anwesenheit von Feldern auftreten, und mögliche Abhilfen sollen aber der Vollständigkeit halber Erwähnung finden.

Wir haben in Abschnitt 1.4.5 festgestellt, daß der Phasenübergang des feldfreien Ising-Modells mit der Perkolationsschwelle der graphischen Darstellung von Fortuin und Kasteleyn (FK) zusammenfällt. Dies ist bei Anwesenheit von Feldern i.a. nicht mehr der Fall. Das zweidimensionale Ising-Modell im homogenen Feld zeigt z.B. gar keinen Phasenübergang mehr [AiWe89]; eine Perkolationsschwelle der graphischen Darstellung gibt es aber natürlich weiterhin. Andere Fälle zeigen noch einen Phasenübergang, z.B. das *Random-Field-Ising-Modell (RFIM)*[26] in drei Dimensionen, bei dem die Felder für jeden Spin unabhängig und identisch verteilt sind (mit Mittelwert 0). Der Phasenübergang findet bei kleinerer Temperatur als im feldfreien Fall statt, da die Felder der ferromagnetischen Ordnung entgegenwirken. Die Übergangstemperatur ist ebenfalls kleiner als die Perkolationsschwelle, was man sich im Fall des RFIM in drei Dimensionen schnell plausibel machen kann. Nehmen wir den Grenzfall unendlich starker Felder $H_i = \pm\infty$ an. Im unendlichen System ist also unabhängig von der Temperatur die Hälfte aller Spins nach oben gerichtet. Wir entnehmen [StAh95, Tabelle 2.1], daß dann die erfüllten Bindungen perkolieren (dazu müßten nur ca. 31% aller Spins gleichgerichtet sein). Also ist auch Perkolation auf einer Auswahl der erfüllten Bindungen möglich, für die Perkolationsschwelle gilt also $p_\mathrm{c} < 1$. Dies entspricht nach (1.19) einer positiven Temperatur. Ein Phasenübergang beim Ising-Modell findet aber nicht statt. Dies entspricht der kritischen Temperatur $T_\mathrm{c} = 0$, die also kleiner ist als die Perkolationsschwelle.

Monte-Carlo-Simulationen für das kanonische Ensemble von Ising-Modellen mit

[26] für einen Überblick s. [Nat97]

Feldern sind weiterhin möglich, nur muß die Akzeptanzwahrscheinlichkeit A für den Feld-Anteil in der Hamilton-Funktion aufkommen, um Detailed Balance zu gewährleisten, vgl. (1.11). Bei der Simulation des kritischen Punkts sind allerdings schon sehr große Cluster vorhanden, die i.a. große Felder tragen. Damit sind sie faktisch in eine Richtung festgefroren, und die Autokorrelationszeiten sind riesig.

Versuche, die Cluster-Größen zu beschränken [NeBa96], bringen nur mäßige Verbesserung. In [RMC98, CMR98] wurde eine graphische Darstellung für zwei Kopien (Replikas) des Systems beschrieben, in der Perkolation von Stellen mit entgegengesetzten Spins mit dem Phasenübergang des Systems zusammenfällt. Eine darauf basierende Version des Swendsen-Wang-Algorithmus wurde ebenfalls vorgestellt und auf das Ising-Modell auf dem Quadratgitter mit schachbrettartig verteilten Feldern $\pm H$ mit Erfolg angewendet. Eine Anwendung auf das RFIM steht noch aus, verspricht aber auch noch keinen Durchbruch. Der Versuch, eine auf diesem Algorithmus beruhende Invaded-Cluster-Variante zu gründen, scheitert noch daran, daß zur Gewährleistung der Ergodizität neben den SW-Schritten auf den beiden Replikas gemeinsam noch ein weiterer Schritt für die einzelnen Replikas nötig ist, der den empfindlichen Rückkopplungsmechanismus von IC stört.

1.8 Fazit: Mögliche Anwendungen von IC

Zum Abschluß dieses Kapitels soll ein Fazit gezogen werden, welche Anwendungen des Invaded-Cluster-Algorithmus zur Zeit sinnvoll sind. Wir haben gesehen, daß IC in der Lage ist, die kritische Temperatur von Ising-Modellen relativ schnell auf drei signifikante Stellen zu bestimmen. Zu höheren Genauigkeiten zu gehen, scheint mangels einer genaueren Kenntnis des Finite-Size-Scaling noch nicht sinnvoll zu sein [CMTC99]. Weiterhin erlaubt IC die Bestimmung eines der beiden kritischen Exponenten. Damit läßt sich die Universalitätsklasse zwar nicht zweifelsfrei festzustellen, aber doch zumindest ein gutes Indiz dafür geben.

IC eignet sich also sehr gut, um mit geringem Aufwand die Lage des kritischen Punktes und die Universalitätsklassenzugehörigkeit von Ising-Modellen zu untersuchen. Dies soll im nächsten Kapitel für einige Modelle mit identischen Kopplungsstärken und im übernächsten für eine Modellklasse mit verschiedenen Kopplungsstärken geschehen. Dies werden ausnahmslos zweidimensionale Modelle sein, da damit schon eine Fülle interessanter Fragestellungen beantwortet werden kann. Die Behandlung mehrdimensionaler Modelle wäre ein wichtiger nächster Schritt, würde aber den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Es scheint aber unzureichend, daß die Funktionstüchtigkeit von IC bisher nur auf dem Quadratgitter und dem einfachen kubischen Gitter überprüft wurde. Damit also den Ergebnissen des Verfahrens für andere, kompliziertere Graphen Glauben geschenkt werden darf, wird es in den nächsten beiden Kapiteln zunächst in einigen ausgewählten komplizierteren Fällen getestet, deren Verhalten exakt oder numerisch bekannt ist.

Kapitel 2

Anwendung von IC auf Modelle mit identischen Kopplungen

2.1 Periodische Graphen

Auf einigen zweidimensionalen periodischen Graphen kann das feldfreie Ising-Modell vollständig gelöst werden [Bax82, Syo72]. Damit sind insbesondere die Werte der kritischen Temperatur bekannt. Folglich eignen sich diese Graphen dazu, den Invaded-Cluster-Algorithmus nach dem Quadratgitter und dem einfachen kubischen Gitter [MCLSC95, MCLSC96, CMTC99, MMC99] einem weiteren Test zu unterziehen. Ausschnitte der hier untersuchten periodischen Graphen sind in Abbildung 2.1 dargestellt. Als Kopplungsstärke wurde wie in der Literatur üblich $J = 1$ gewählt.

2.1.1 Wahl der Approximanten

Die erste Aufgabe, vor der man steht, wenn ein bestimmter (unendlicher) Graph mit dem Invaded-Cluster-Algorithmus untersucht werden soll, besteht darin, geeignete periodische Approximanten zu erstellen. Dazu muß man aus dem unendlichen Graphen nach geeigneter Drehung oder Scherung[1] (im Zweidimensionalen) rechteckige Bereiche ausschneiden, die ein periodisches Schließen erlauben. Für periodische Graphen ist dies natürlich nicht schwierig, man nimmt einfach eine oder mehrere Fundamentalzellen. Für das Quadratgitter ist damit ein Satz periodischer Approximanten offensichtlich. Schon beim Dreiecksgitter gibt es mehrere naheliegende Möglichkeiten, je nachdem, wie man das Gitter dreht oder schert. Jede solche Möglichkeit nennt man eine *Kodierung* des Graphen. Drei verschiedene Fundamentalzellen, mit denen das Dreiecksgitter kodiert werden kann, sind in Abbildung 2.2 dargestellt. Auch beim Quadratgitter findet man eine weitere naheliegende Kodierung, wenn man es um 45° dreht, siehe Abbildung 2.3.

[1] vgl. Fußnote 2 auf Seite 1

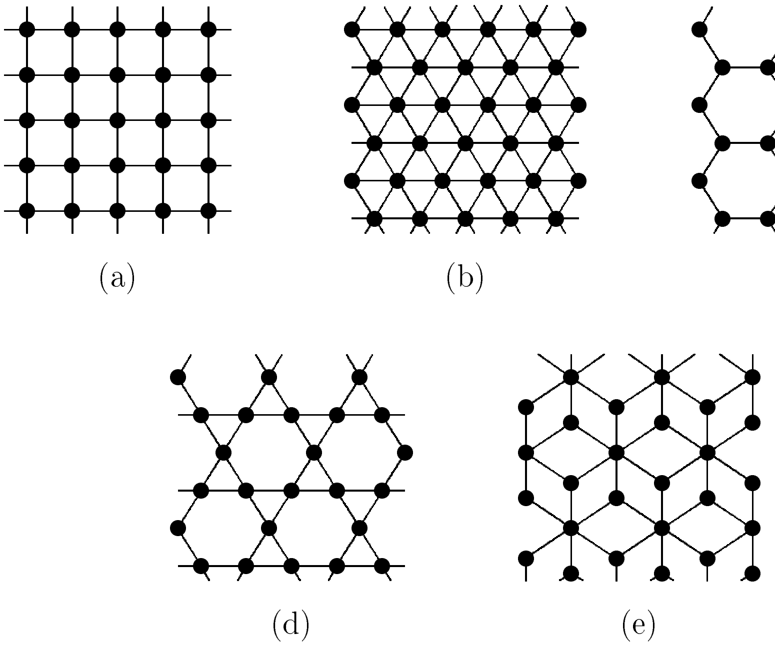


Abbildung 2.1: Ausschnitte der hier untersuchten periodischen Graphen, (a) des Quadratgitters, (b) des Dreiecksgitters, (c) der Sechseckpackung, (d) des Kagomé-Graphen und (e) des Diced-Graphen.

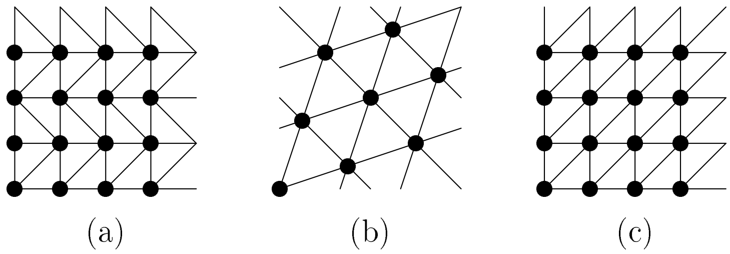


Abbildung 2.2: Unterschiedliche Kodierungen des Dreiecksgitters

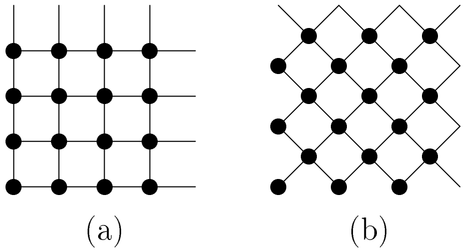


Abbildung 2.3: Unterschiedliche Kodierungen des Quadratgitters

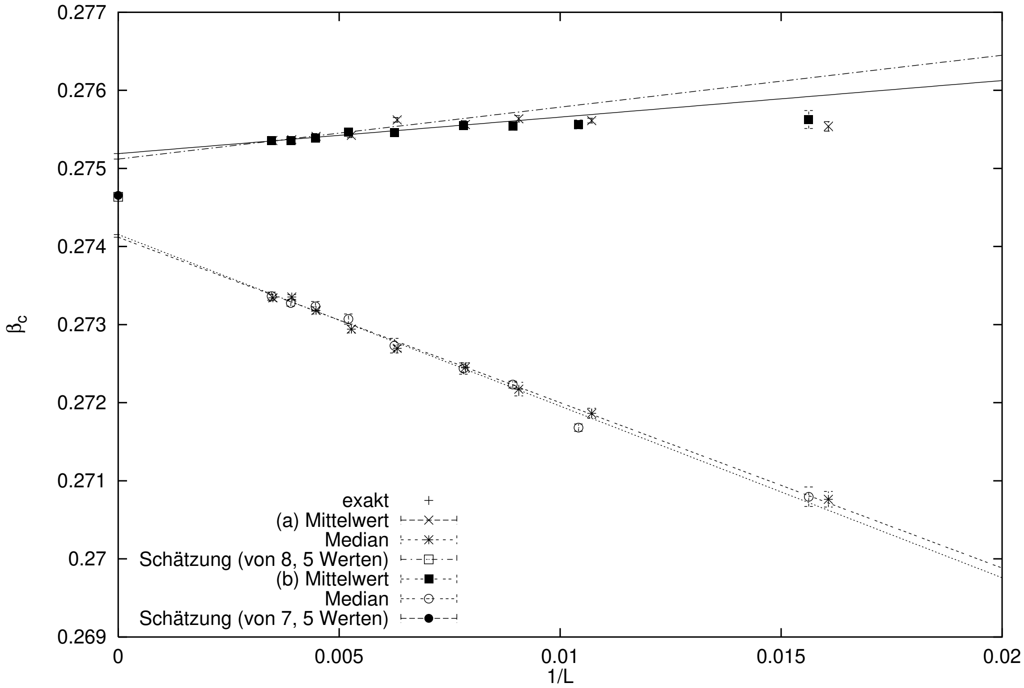


Abbildung 2.4: Finite-Size-Scaling der inversen kritischen Temperatur β_c für das Dreiecksgitter in den Kodierungen (a) und (b) aus Abbildung 2.2

Es stellt sich nun die Frage, inwieweit die Orientierung und die Symmetrieeigenschaften der Approximanten das Finite-Size-Scaling beeinflussen. Bei den in Abbildung 2.2 dargestellten Approximanten des Dreiecksgitters z.B. erwartet man, daß Variante (a) Perkolation in der y-Richtung bevorzugt, was sich numerisch auch bestätigt.[2] Die Varianten (b) und (c) dagegen sind symmetrisch.

Bei Untersuchungen der Varianten (a) und (b) des Dreiecksgitters und beider Varianten des Quadratgitters ließen sich aber im Rahmen der Genauigkeit selbst auf den endlichen Systemen keine Unterschiede für die Werte der inversen kritischen Temperatur β_c erkennen. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 2.4 und 2.5 dargestellt. (β_c wurde dabei nach dem zweiten auf Seite 25 beschriebenen Verfahren als $\langle \beta_{\text{est}}(f) \rangle$ ermittelt.) Wie aus den Werten für die endlichen Systeme auf die des unendlichen Systems geschlossen werden kann, wird im folgenden Abschnitt behandelt.

2.1.2 Finite-Size-Scaling der kritischen Temperatur

Wie bereits in Abschnitt 1.6 erwähnt, existiert für das Finite-Size-Scaling im IC-Ensemble bisher keine Theorie. Wir sind also bei der Extrapolation der kritischen Temperatur auf Heuristik angewiesen. Betrachtet man die in den Abbildungen 2.4

[2]Beim Dreiecksgitter mit 288^2 Spins z.B. trat Perkolation in 32% der Fälle in x-Richtung, in 57% in y-Richtung und in 11% gleichzeitig in x- und y-Richtung auf.

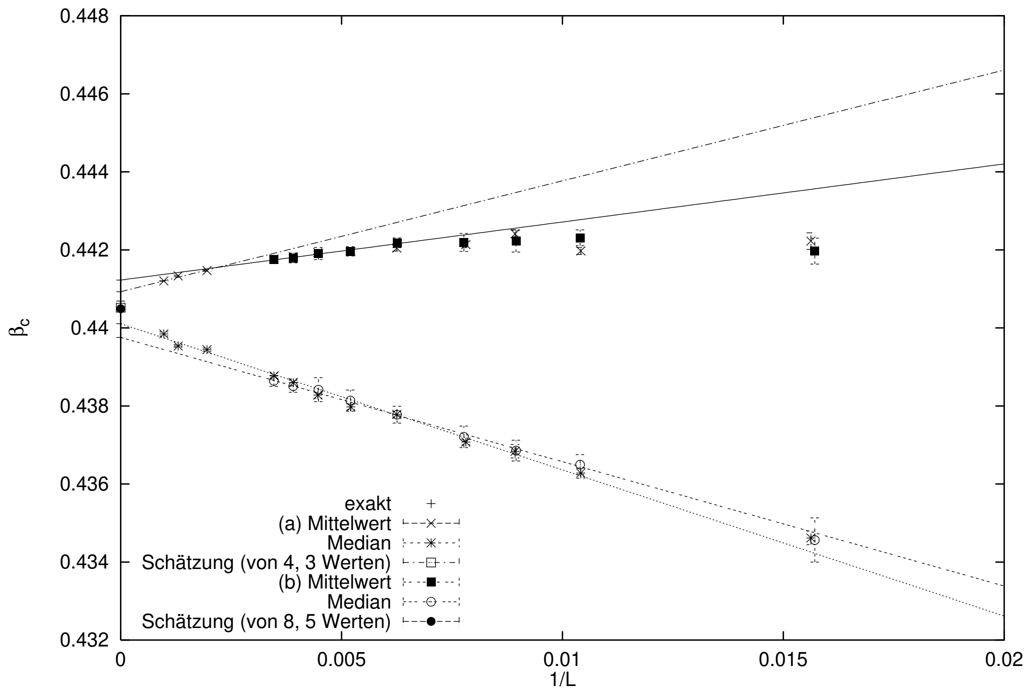


Abbildung 2.5: Finite-Size-Scaling der inversen kritischen Temperatur β_c für das Quadratgitter in den in Abbildung 2.3 dargestellten Kodierungen. Die relativ großen Unterschiede zwischen den Ausgleichgeraden der Kodierungen (a) und (b) kommen daher, daß in Kodierung (a) auch deutlich größere Systeme untersucht wurden.

und 2.5 dargestellten Werte der inversen kritischen Temperatur β_c, so stellt man fest, daß Mittelwert und Median systematisch voneinander abweichen, und zwar ist der Mittelwert stets größer als der Median. Das gleiche Verhalten zeigt auch das Akzeptanzverhältnis f, siehe Abbildung 2.7, da β_{est} eine streng monoton steigende Funktion von f ist (1.22). Die Verteilung von f, dargestellt in Abbildung 2.6, ist also asymmetrisch.

Der Grund dafür liegt in sog. *Flaschenhälsen* bei der Perkolation, die im Zweidimensionalen auftreten [MCLSC96]. In einigen Situationen müssen eine oder mehrere bestimmte Bindungen ausgewählt werden, damit Perkolation zustandekommen kann. Der Bindungsschritt des Algorithmus bricht also erst ab, wenn auch die letzte dieser Bindungen ausgewählt wurde. Ist nun eine dieser Bindungen weit hinten in der zufälligen Permutation, nach der die Bindungen ausgewählt werden, so ergibt sich ein unnatürlich hoher Wert für das Akzeptanzverhältnis f. Je größer das System wird, desto seltener tritt dieses Phänomen auf, denn es gibt „immer mehr Platz“ für die Cluster, um um solche Engpässe herumzuwachsen. In höheren Dimensionen gibt es keine solchen Flaschenhälse [MCLSC96].

Durch diese Besonderheit in zwei Dimensionen ergibt sich aber eine relativ einfache Möglichkeit zur Bestimmung der kritischen Temperatur in Form des folgenden „Kochrezepts“. Man trägt wie in den Abbildungen 2.4 und 2.5 Mittelwert

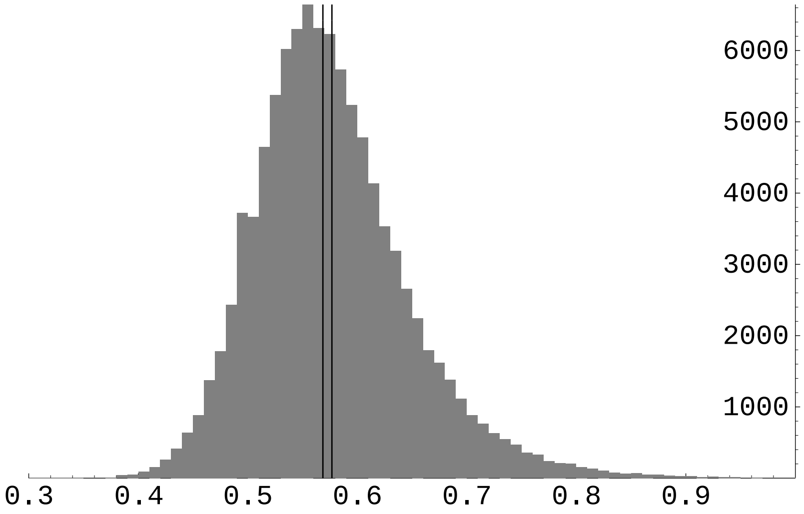


Abbildung 2.6: Histogramm von 10^5 Werten des Akzeptanzverhältnisses f beim Invaded-Cluster-Algorithmus auf dem Quadratgitter mit 16^2 Spins. Die senkrechten Linien bezeichnen Median (links) und Mittelwert (rechts).

und Median von β_c (oder auch von f) gegen $1/L$ auf, berechnet Ausgleichsgeraden für die zu großen L gehörenden Werte und nimmt die Mitte der beiden Achsenabschnitte als Schätzung für β_c (bzw. f). Empirisch ergibt sich, daß sich beide Kurven für große L einander annähern. Die halbe Differenz der Achsenabschnitte ist eine grobe Schätzung des Fehlers, die den tatsächlichen Fehler in der Regel deutlich überschätzen dürfte.

In Abschnitt 1.5.6 wurde bereits erwähnt, daß man alternativ das Finite-Size-Scaling für f durchführen und dann β_c nach (1.22) bestimmen kann. Für das Quadratgitter in der Kodierung (a) aus Abbildung 2.3 ist das Finite-Size-Scaling für f in Abbildung 2.7 dargestellt. Das Ergebnis nach dem im letzten Absatz gegebenen „Kochrezept“ ist in beiden Fällen identisch $\beta_c = 0.4405(4)$.

2.1.3 Ergebnisse

Es wurden die in Abbildung 2.1 dargestellten periodischen Graphen betrachtet, das Quadratgitter, das Dreiecksgitter, die Sechseckpackung, der Kagomé-Graph und der Diced-Graph (dice: Würfel). Letzterer heißt in anderen Zusammenhängen Laves-Parkettierung Typ [3.6.3.6], vgl. [GrSh89, S. 96]. Für jeden dieser Graphen wurden periodische Approximanten erzeugt, die ungefähr den linearen Systemgrößen $L = 16, 24, 32, 48, 64, 96, 112, 128, 160, 192, 224, 256, 288$ entsprechen. Beim Quadratgitter in Kodierung (a) nach Abbildung 2.3 wurden auch die Approximanten für $L = 512, 768, 1024$ benutzt. Dazu wurden die in den Abbildungen 2.2, 2.3 und 2.8 gezeigten Fundamentalzellen verwendet.

Für jede Systemgröße wurden zunächst 5000 Monte-Carlo-Schritte (MCS) für die Equilibrierung verwendet und dann gemäß dem auf Seite 28 beschriebenen

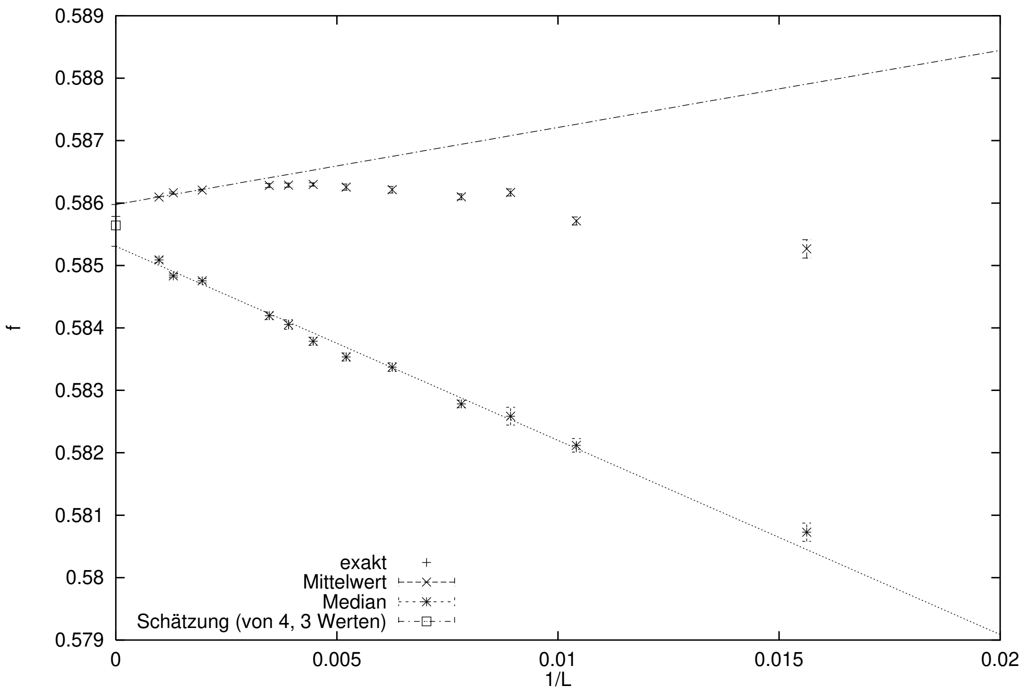


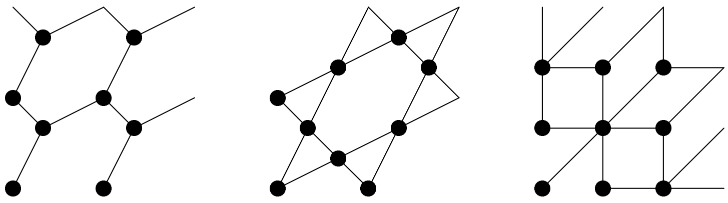
Abbildung 2.7: Finite-Size-Scaling des Akzeptanzverhältnisses f für das Quadratgitter in Repräsentation (a) aus Abbildung 2.3

Verfahren die Mittel- und Medianwerte von 9 Gruppen (für $L = 1024$ nur 5) à 5000 MCS als unabhängig betrachtet. Die Zahl 5000 ist dabei um etliche Vielfache größer als die gemessenen integrierten Autokorrelationszeiten, die alle im Bereich von 0.03 bis 1 MCS lagen. Nach dem im vorigen Absatz beschriebenen „Kochrezept" wurden dann die Werte der kritischen Temperatur ermittelt. Sie sind in Tabelle 2.1 zusammen mit den exakten Werten dargestellt. Die Übereinstimmung von IC-Schätzung und exaktem Wert ist deutlich besser, als der angegebene Fehler vermuten läßt. Ohne genaue Kenntnis des Finite-Size-Scaling müssen wir aber mit unserer großzügigen Fehlerabschätzung leben.

Die Simulation eines Graphen benötigte auf einem Pentium-Prozessor mit 200

Graph	Bestimmungsgleichung	numerischer Wert	IC-Schätzung
Quadratgitter	$\sinh(2\beta_c) = 1$	$\beta_c \simeq 0.4406868$	0.4405(4)
Dreiecksgitter	$\sinh(2\beta_c) = 3^{-\frac{1}{2}}$	$\beta_c \simeq 0.2746531$	0.2747(5)
Sechseckpackung	$\sinh(2\beta_c) = 3^{\frac{1}{2}}$	$\beta_c \simeq 0.6584789$	0.6584(11)
Kagomé	$\coth(2\beta_c) = \frac{\sqrt{3}+1}{2}$	$\beta_c \simeq 0.4665660$	0.4665(8)
Diced	$\cosh(2\beta_c) = \frac{\sqrt{3}+1}{2}$	$\beta_c \simeq 0.4157215$	0.4157(7)

Tabelle 2.1: Werte der inversen kritischen Temperatur auf verschiedenen periodischen Graphen. Die exakten Resultate sind [Bax82, Syo72] entnommen.



(a) (b) (c)

Abbildung 2.8: Verwendete Fundamentalzellen (a) der Sechseckpackung, (b) des Kagomé-Graphen und (c) des Diced-Graphen

MHz nur ca. $2.3 \cdot 10^{-6}$ Sekunden pro Bindung (Realzeit, nicht CPU-Zeit). Für einen kompletten Satz der oben angegebenen Systemgrößen muß man also nur einen knappen Tag warten. Der Zeitaufwand läßt sich noch weiter reduzieren, wenn man sich auf die tatsächlich zur Bestimmung der Ausgleichsgeraden verwendeten Systemgrößen beschränkt. Der Invaded-Cluster-Algorithmus ist also tatsächlich gut geeignet, um „über Nacht" die kritische Temperatur und andere Größen des Ising-Modells auf einem unbekannten Graphen mit guter Genauigkeit zu bestimmen.

2.2 Quasiperiodische Parkettierungen

Nach dem erfolgreichen Test des Invaded-Cluster-Algorithmus auf verschiedenen periodischen Graphen liegt es nahe, als nächsten Schritt auch *quasiperiodische* Graphen zu betrachten. Dies sind nicht-periodische unendliche Graphen, in denen sich jeder endliche Ausschnitt an anderen Stellen im Graphen mit gleichmäßiger Häufigkeit wiederfinden läßt. Betrachtet man jedoch zwei solche Stellen und vergrößert die Ausschnitte, so bedingt die Nicht-Periodizität, daß sie sich ab einer bestimmten Größe unterscheiden müssen.

Eine wichtige Klasse quasiperiodischer Graphen sind die quasiperiodischen *Parkettierungen* (tilings). Das sind Graphen, die entstehen, wenn man sog. Kacheln (tiles) nach bestimmten Anlageregeln so aneinanderlegt, daß sie lückenlos und ohne Überlappung die Ebene bedecken. Als Kacheln läßt man eine endliche Anzahl von Elementarbausteinen (prototiles) zu, in unserem Fall sind dies immer Dreiecke oder Vierecke. Die wohl bekannteste quasiperiodische Parkettierung ist die Rhombus-Parkettierung von Penrose [Pen74]. Weitere wichtige Parkettierungen sind die oktagonale oder Ammann-Beenker-Parkettierung [AGS92, Bee82], die Tübinger Dreieck-Parkettierung [BKSZ90] und die Quadrat-Dreieck-Parkettierung [BKS92]. Ausschnitte dieser vier Parkettierungen sind in Abbildung 2.9 dargestellt.

Physikalisch relevant sind quasiperiodische Parkettierungen, weil sie Modelle für die Struktur von Quasikristallen sind. Quasikristalle sind Substanzen, häufig ternäre Legierungen mit hohem Aluminiumanteil wie z.B. AlCuFe, die scharfe Beugungsbilder haben, also langreichweitig geordnet sein müssen. Sie weisen allerdings teilweise im Beugungsbild Symmetrien auf, die nicht von periodischen Strukturen

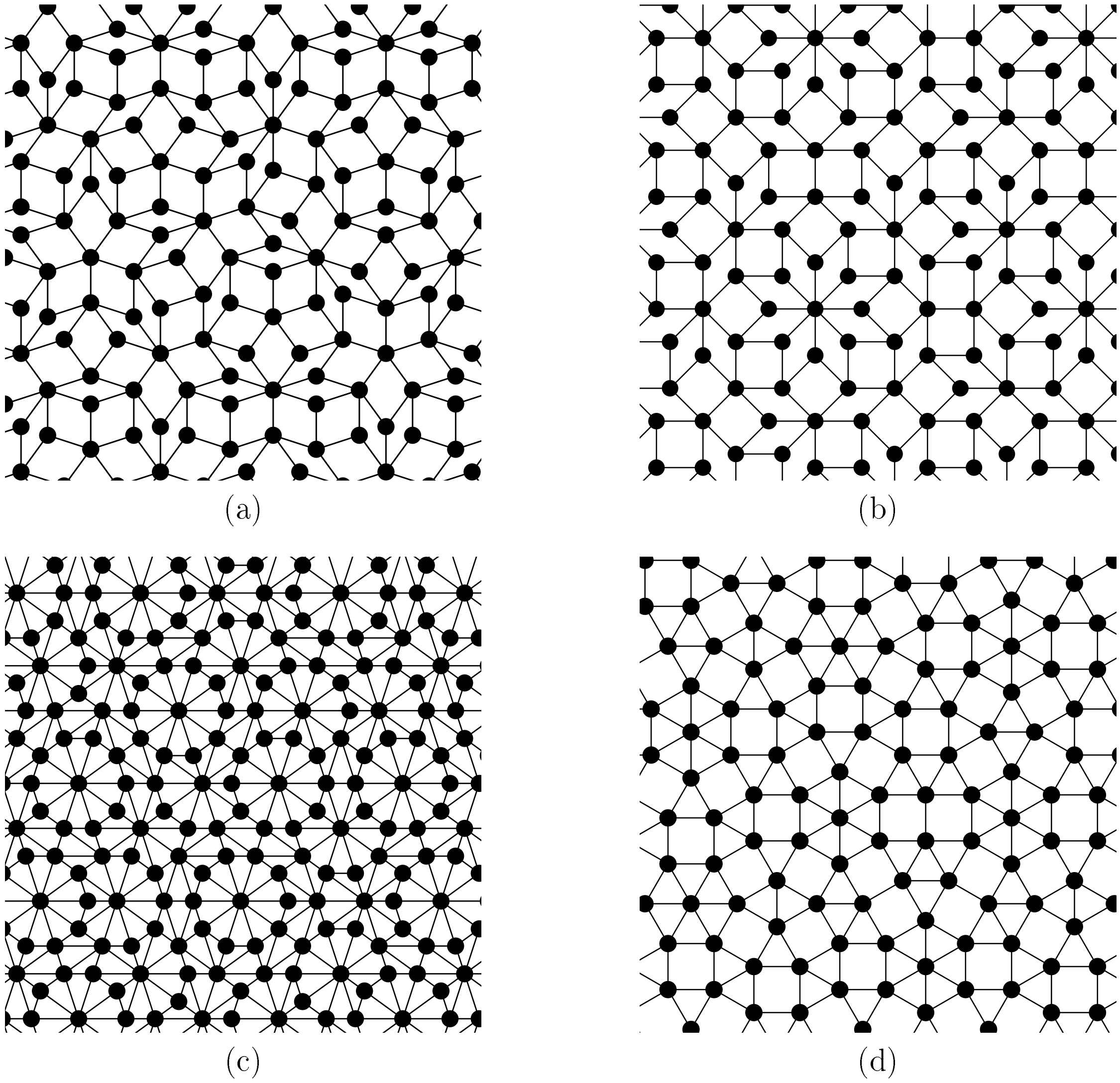


Abbildung 2.9: Ausschnitte der hier untersuchten quasiperiodischen Parkettierungen, (a) der Penrose-Parkettierung, (b) der Ammann-Beenker-Parkettierung, (c) der Tübinger Dreieck-Parkettierung und (d) der Quadrat-Dreieck-Parkettierung

stammen können (z.B. zehnzählige Symmetrie wie bei der Penrose-Parkettierung oder zwölfzählige Symmetrie wie bei der Quadrat-Dreieck-Parkettierung). Aufgrund solch einer für Kristalle verbotenen Symmetrie wurde der erste Quasikristall entdeckt [SBGC84].

Es sind keine exakten Lösungen des Ising-Modells auf den hier untersuchten quasiperiodischen Parkettierungen bekannt. Untersuchungen der komplexen Temperatur-Nullstellen der Zustandssummen endlicher Systeme, sog. *Lee-Yang-Nullstellen*, manchmal auch *Fisher-Nullstellen* genannt, [YaLe52, LeYa52, Fis65] deuten darauf hin, daß prinzipiell kein analytischer Ausdruck für die freie Energie gewonnen werden kann, siehe [BGP95, SBG95, SiBa97, Sim97] für Untersuchungen der Penrose- und der Ammann-Beenker-Parkettierung. Die Lee-Yang-Nullstellen sind im thermodynamischen Limes für Nicht-Analytizitätspunkte der freien Energie auf der reellen Achse verantwortlich, und damit für die Phasenübergänge des Modells. Numerisch zeigt sich, daß sie im Falle quasiperiodischer Muster im thermodynamischen Limes sehr wahrscheinlich komplizierte (eventuell fraktal berandete) Bereiche füllen, die mit einer analytischen Form der freien Energie unvereinbar sind.

Bei der Penrose- und der Ammann-Beenker-Parkettierung liegen jedoch numerische Schätzungen für die kritische Temperatur vor [OkNi88, SJR91, LLT95, RGS99b]. Hier bietet sich also eine Prüfung des Invaded-Cluster-Algorithmus an. Darüberhinaus ist es interessant, die kritische Temperatur auf der Tübinger Dreieck-Parkettierung und der Quadrat-Dreieck-Parkettierung zu bestimmen, denn hierfür sind bisher keine Werte bekannt.

2.2.1 Periodische Approximanten

Während die Erzeugung periodischer Approximanten bei periodischen Graphen sehr einfach ist, muß man für quasiperiodische Parkettierungen zum Teil deutlich aufwendigere Verfahren benutzen. Grundsätzlich bieten sich zwei Gruppen von Verfahren an, die ich hier kurz beschreiben will.

Ein Verfahren beruht darauf, daß die betrachtete Parkettierung invariant unter einer speziellen Inflationstransformation ist. (Das ist für alle in dieser Arbeit betrachteten Parkettierungen der Fall.) Dabei geht zunächst jede Kachel durch Zerschneidung in mehrere (maßstäblich verkleinerte) Kacheln über, und dann wird die ganze Ebene reskaliert und ggf. gedreht (wie im Fall der Quadrat-Dreieck-Parkettierung). Diese Parkettierungen lassen sich deshalb durch iterierte Inflation aus einzelnen oder bestimmten Gruppen von Kacheln erzeugen. (In Abbildung 2.13 sind für die Tübinger Dreieck-Parkettierung eine aus vier Kacheln bestehende Ausgangskonfiguration und die ersten beiden durch Inflation daraus hervorgehenden Konfigurationen dargestellt.) Startet man von einer periodisch schließbaren Konfiguration von Kacheln und iteriert die Inflation, so erhält man i.a. wieder periodische Konfigurationen. Diese liefern die von uns benötigten periodischen Approximanten. Der Vorteil dieses Verfahrens ist, daß es sich in Computeralgebrasystemen wie MATHEMATICA® mit relativ geringem Aufwand umsetzen läßt. Zur Erzeugung so großer Approximanten, wie wir sie benötigen (bis ca. 288^2 Spins), sind solche Programme allerdings zu langsam und zu speicherintensiv. Eine Umsetzung in Programmiersprachen wie C++ ist deutlich aufwendiger, dafür aber auch um Größenordnungen schneller.

Andere Verfahren zur Erzeugung periodischer Approximanten beruhen auf der Tatsache, daß sich viele Parkettierungen, zumindest alle in dieser Arbeit vorkommenden, durch einen Projektionsformalismus aus einem höherdimensionalen Gitter erzeugen lassen. Dabei wird eine (hier zweidimensionale) Ursprungsebene, der sog. physikalische Raum, mit irrationaler Steigung in den höherdimensionalen Raum eingebettet. Das orthogonale Komplement des physikalischen Raums heißt interner Raum. Im internen Raum wird eine kompakte Menge ausgewählt, das sog. Fenster. Alle diejenigen Punkte des höherdimensionalen Gitters, deren Projektionen auf den internen Raum im Fenster liegen, werden nun auf den physikalischen Raum projiziert und erzeugen so die Punkte der Parkettierung. Die Kanten erhält man, wenn man im höherdimensionalen Raum benachbarte Punkte verbindet. Wählt man die Steigung des physikalischen Raums rational, aber in der Nähe der irrationalen Steigung, so erhält man ein periodisches Muster, dessen Fundamentalzelle gerade einen periodischen Approximanten des unendlichen Musters liefert. Durch eine geeignete Folge rationaler Steigungen, die die irrationale Steigung approximieren, erhält man eine Folge periodischer Approximanten. Eine systematische Übersicht über verschiedene Projektionsverfahren findet sich in [BJK93, KBJ93, DuAu94].

Von periodischen Graphen zu den hier betrachteten quasiperiodischen Parkettierungen zu gehen, ist insofern nur eine kleine Verallgemeinerung, da die Eigenschaften des unendlichen Graphen schon von relativ kleinen Approximanten gut angenähert werden. Wichtige Kenngrößen dafür sind die mittleren Koordinationszahlen des Graphen, auf die im folgenden Abschnitt eingegangen wird.

2.2.2 Koordinationszahlen und kritische Temperatur

Die n-te Koordinationszahl c_n eines Punkts i eines Graphen ist die Anzahl der Punkte, deren kürzeste Verbindung zu i gerade aus n Bindungen besteht. Die erste Koordinationszahl ist also die Zahl der nächsten Nachbarn, die zweite die der übernächsten usw. Entsprechend ist die *n-te mittlere Koordinationszahl* $\bar{c}_n$ des Graphen der Mittelwert über alle seine Punkte. Für das Quadratgitter z.B. sind die Koordinationszahlen $\bar{c}_n = c_n = 4n$ $(n \geq 1)$.

Es besteht ein Zusammenhang zwischen den mittleren Koordinationszahlen eines Graphen und der kritischen Temperatur des Ising-Modells darauf, vgl. z.B. [BGRJ98]. Je höher die Koordinationszahlen eines Punktes sind, je mehr (nächste, übernächste usw.) Nachbarn er also besitzt, desto stärker tendiert der entsprechende Spin dazu, sich seinen Nachbarn parallel auszurichten. Entsprechend größer muß die Temperatur werden, die diesem Effekt entgegenwirkt und schließlich das paramagnetische Verhalten des Systems bewirkt. Es scheint aber nicht möglich zu sein, eine allgemeingültige Formel anzugeben, um von den Koordinationszahlen auf die kritische Temperatur zu schließen [BGRJ98].

Die deutlichste Abhängigkeit der kritischen Temperatur zeigt sich erwartungsgemäß von der ersten mittleren Koordinationszahl. Um die Abhängigkeit von der zweiten mittleren Koordinationszahl zu untersuchen, sind beide Größen in Abbildung 2.10 für einige Graphen mit gleicher erster mittlerer Koordinationszahl 4 dargestellt. Es ist deutlich, daß keine einfache Abhängigkeit existieren kann. Besonders eklatant ist dies für das Quadratgitter und den Kagomé-Graphen. Beide teilen auch dieselbe zweite mittlere Koordinationszahl 8 und unterscheiden sich erst in der dritten (12 beim Quadratgitter, 14 beim Kagomé-Graphen), die kriti-

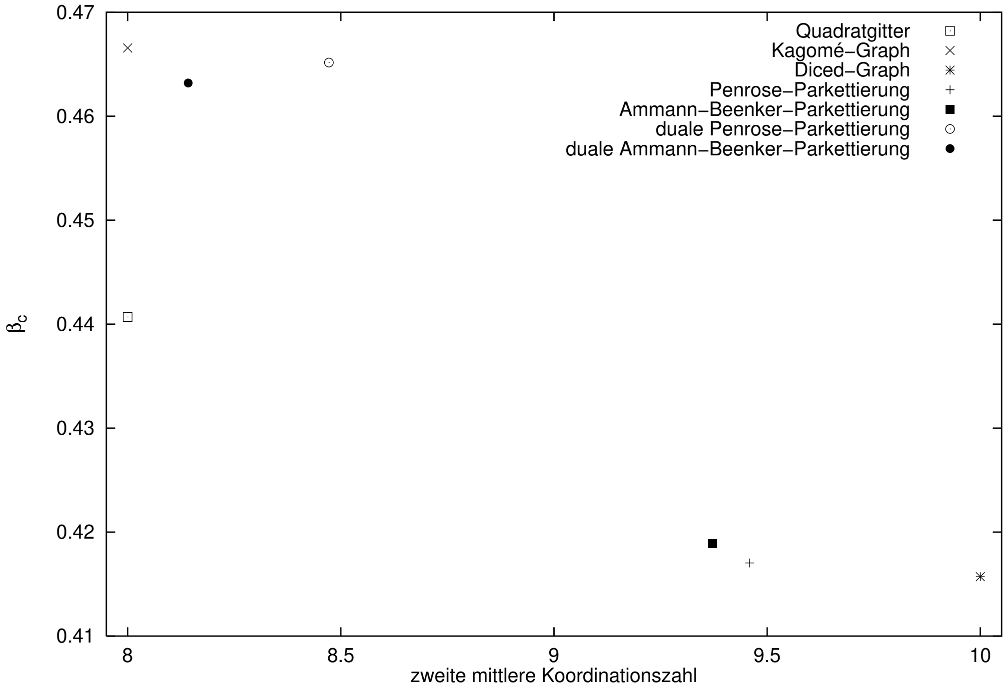


Abbildung 2.10: Die inverse kritische Temperatur in Abhängigkeit der zweiten mittleren Koordinationszahl bei Graphen mit erster mittlerer Koordinationszahl 4

schen Temperaturen sind jedoch stark voneinander verschieden. Dieses Phänomen ist seit längerem bekannt, aber bisher nicht verstanden.

Bei den hier betrachteten quasiperiodischen Parkettierungen stimmen die ersten beiden mittleren Koordinationszahlen schon bei den kleinsten verwendeten periodischen Approximanten auf mehrere Stellen mit denen des unendlichen Graphen überein, vgl. Tabelle 2.2. Aus diesem Grund sollte die Tatsache, daß man Approximanten benutzt, neben den üblichen Effekten bei endlichen Systemen keine zusätzliche Verschiebung der geschätzten kritischen Temperatur bewirken.

2.2.3 Penrose-Parkettierung

Auf der Penrose-Parkettierung [Pen74] ist die kritische Temperatur des Ising-Modells numerisch bekannt. Die besten Werte sind $\beta_c \simeq 0.417046(1)$ [RGS99b], $\beta_c \simeq 0.4181(7)$ [OkNi88] und $\beta_c \simeq 0.4165(9)$ [SJR91]. Die zur Verwendung des Invaded-Cluster-Algorithmus nötigen periodischen Approximanten wurden mithilfe eines in Pascal programmierten Projektionsverfahrens gewonnen. Sie entsprechen den linearen Systemgrößen $L \simeq 18.4, 29.8, 48.3, 78.1, 126.4, 204.5, 330.8$. Der Quotient der linearen Größe aufeinanderfolgender Approximanten, der gleichzeitig der *Skalierungsfaktor* der Penrose-Parkettierung ist, ist der goldene Schnitt $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 \simeq 1.618$.

Das Finite-Size-Scaling ist in Abbildung 2.11 dargestellt. Es ist qualitativ nicht

Punkte	$\bar{c}_1$	$\bar{c}_2$
50	4	9.16
130	4	9.38462
340	4	9.42353
890	4	9.4427
*2330	4	9.45236
*6100	4	9.45639
*15970	4	9.45798
*41810	4	9.4586
*109460	4	9.45883
∞	4	9.45898

Punkte	$\bar{c}_1$	$\bar{c}_2$
7	4	2
41	4	9.36585
239	4	9.37238
1393	4	9.37258
*8119	4	9.37258
*47321	4	9.37258
14	4	6.57143
82	4	9.46341
478	4	9.38912
2786	4	9.44293
*16238	4	9.37308
∞	4	9.37258

Tabelle 2.2: Die ersten beiden mittleren Koordinationszahlen der Penrose-Parkettierung (links) und der Ammann-Beenker-Parkettierung (rechts) und ihrer hier verwendeten periodischen Approximanten. Die Werte für die vollständigen Parkettierungen sind [BGRJ98] entnommen. Die mit * markierten Approximanten wurden für die Bestimmung der kritischen Temperatur benutzt, vgl. die Abbildungen 2.11 und 2.12.

von den periodischen Fällen verschieden, so daß auch hier dasselbe Verfahren zur Bestimmung der kritischen Temperatur verwendet werden konnte. Das Ergebnis[3] $\beta_c \simeq 0.4170(8)$ stimmt mit den bereits bekannten, ebenfalls aus Monte-Carlo-Verfahren gewonnen Werten [OkNi88, SJR91] überein und ist auch, was die Größe des angegebenen Fehlers betrifft, mit ihnen vergleichbar. Das bisher genaueste Resultat [RGS99b] wurde aus der Berechnung der sog. Kac-Ward-Determinanten für große periodische Approximanten gewonnenen (diese Methode wird in [RGS99a] beschrieben). Mit Hilfe dieser Determinaten lassen sich die kritischen Punkte auf periodischen Graphen beliebig genau numerisch bestimmen. Durch Extrapolation kann man dann die kritische Temperatur auf der unendlichen Parkettierung erschließen. Mit dem so gewonnenen Resultat stimmt unseres sogar viel besser überein als die Ergebnisse der anderen beiden Monte-Carlo-Verfahren. Dies bestärkt uns in der Vermutung, daß wir den Fehler bei IC deutlich überschätzen.

2.2.4 Ammann-Beenker-Parkettierung

Auch für die Ammann-Beenker- oder oktagonale Parkettierung [AGS92, Bee82] liegen numerische Werte für die inverse kritische Temperatur vor, $\beta_c \simeq 0.41887800(1)$ [RGS99b] und $\beta_c \simeq 0.4186(7)$ [LLT95]. Die periodischen Approximanten wurden wieder nach einem Projektionsverfahren mithilfe eines Pascal-Programms erzeugt. Sie entsprechen linearen Größen $L \simeq 15.5, 37.3, 90.1, 217.5$. Der Skalierungsfaktor

[3] Die Ergebnisse für alle untersuchten quasiperiodischen Parkettierungen sind in Tabelle 2.3 zusammengestellt.

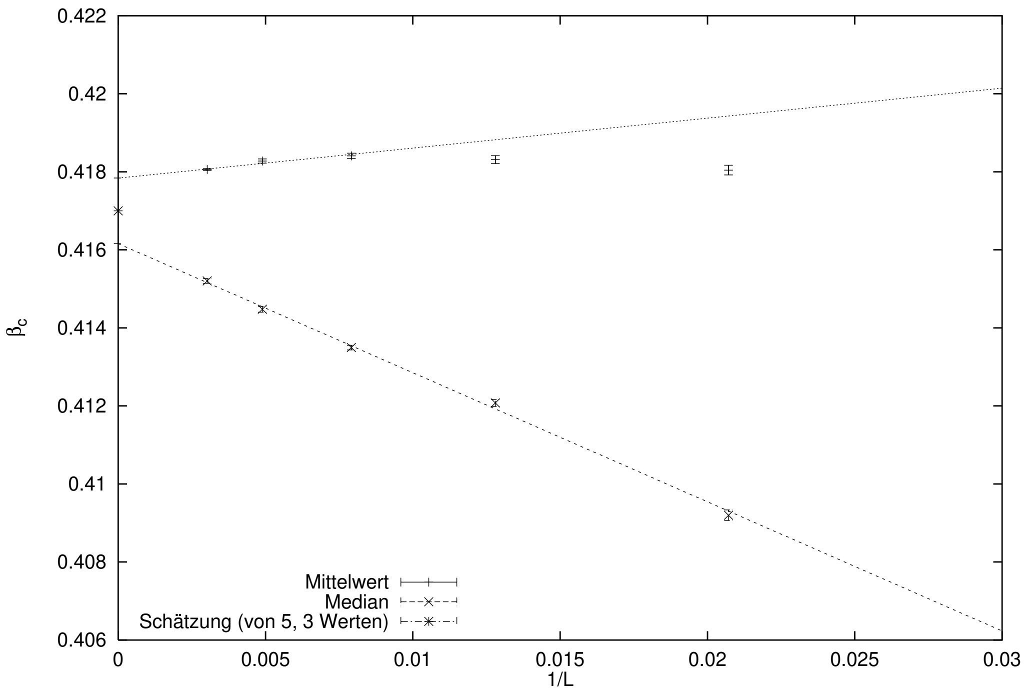


Abbildung 2.11: Finite-Size-Scaling der inversen kritischen Temperatur β_c für die Penrose-Parkettierung

$\lambda = 1 + \sqrt{2} \simeq 2.414$, die silberne Zahl[4], ist jedoch zu groß, als daß man genug Approximanten im Bereich $90 < L < 300$, in dem wir bisher die Ausgleichgerade gebildet haben, zur Verfügung hätte. Deshalb wurde zusätzlich eine zweiter Satz von Approximanten verwendet. Dafür wurde jeweils ein Approximant des ersten Satzes genommen und um 0°, 90°, 180° und 270° gedrehte Kopien davon aneinandergesetzt. So erhält man auch Größen $L \simeq 21.9, 52.8, 127.4$. Durch die Verwendung von vier kleinen Approximanten verdoppelt man zwar den „Rand" des Approximanten, an denen die Anlageregeln der Parkettierung verletzt sind, aber dies führt nur in einem Fall zu deutlich vom unendlichen Muster verschiedenen mittleren Koordinationszahlen, vgl. Tabelle 2.2. Dieser Approximant ist auch im Finite-Size-Scaling in Abbildung 2.12 deutlich zu erkennen und wurde bei der Bestimmung der kritischen Temperatur nicht verwendet. Man sieht hier, wie empfindlich der Invaded-Cluster-Algorithmus auf Änderungen schon der zweiten mittleren Koordinationszahl reagiert. Das Ergebnis $\beta_c \simeq 0.4191(7)$ stimmt wieder gut mit den bekannten Werten überein. Auch die Größe des Fehlers ist mit der beim anderen Monte-Carlo-Verfahren [LLT95] vergleichbar.

Die kritische Temperatur auf der Ammann-Beenker-Parkettierung ist kleiner als die auf der Penrose-Parkettierung. Dies ist mit der kleineren zweiten mittleren Koordinationszahl konsistent, vgl. Tabelle 2.2 und die Argumentation in Abschnitt

[4] Die goldene Zahl $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ hat die Kettenbruchentwicklung $[1; 1, 1, 1, \ldots]$. Bei λ ist sie $[2; 2, 2, 2, \ldots]$, woraus sich die „olympische" Terminologie ableitet.

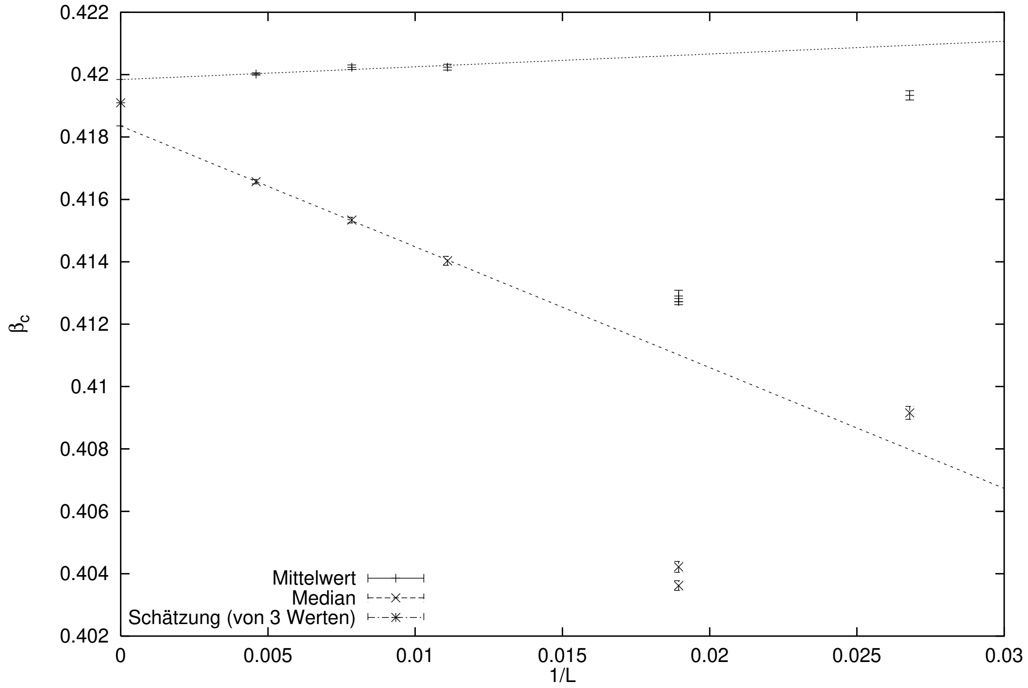


Abbildung 2.12: Finite-Size-Scaling der inversen kritischen Temperatur β_c für die Ammann-Beenker-Parkettierung

2.2.2. Beide Werte sind in der Nähe der kritischen Temperatur auf dem Quadratgitter, da die erste mittlere Koordinationszahl beider Parkettierungen wie beim Quadratgitter 4 ist.

2.2.5 Tübinger Dreieck-Parkettierung

Für die Tübinger Dreieck-Parkettierung (Tübingen triangle tiling, TTT) [BKSZ90] ist kein Wert der kritischen Temperatur bekannt. Wegen der vorzüglichen Übereinstimmung der von IC gefundenen Werte für die kritische Temperatur bei der Penrose- und der Ammann-Beenker-Parkettierung scheint es sinnvoll zu sein, den Invaded-Cluster-Algorithmus auch auf diese Parkettierung anzuwenden.

Die periodischen Approximanten wurden durch die in [BKSZ90] angegebene Inflationsregel mittels eines MATHEMATICA®-Programms erzeugt. Die verwendete Ausgangskonfiguration sowie die ersten zwei durch Inflation daraus hervorgehenden Approximanten können Abbildung 2.13 entnommen werden. Die inflationierten Approximanten wurden auf eine quadratische Form transformiert. Weiterhin mußten bei jedem dritten Approximanten (z.B. dem mittleren in Abbildung 2.13) bestimmte Randpunkte etwas verschoben werden, um ein periodisches Schließen zu ermöglichen. Auf die mittleren Koordinationszahlen dieser Approximanten im Vergleich zum unendlichen Graphen hat dies keinen negativen Einfluß.

Der Skalierungsfaktor ist wie bei der Penrose-Parkettierung der goldene Schnitt

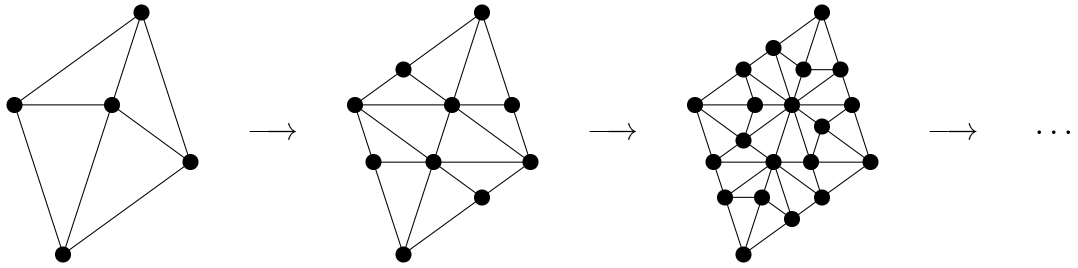


Abbildung 2.13: Ausgangskonfiguration für die Erzeugung periodischer Approximanten der Tübinger Dreieck-Parkettierung und die ersten beiden durch Inflation daraus hervorgehenden Konfigurationen

$\tau = (1+\sqrt{5})/2 \simeq 1.618$, also ausreichend klein. Simuliert wurden die Systemgrößen $L \simeq 15.3, 24.7, 40.0, 64.7, 104.6, 169.3$. Das Finite-Size-Scaling birgt keine Überraschungen, unter Verwendung der Werte auf den vier größten Systemen erhält man für die inverse kritische Temperatur den Wert $\beta_c \simeq 0.2565(6)$. Dieser liegt in der Nähe des Werts für das Dreiecksgitter, $\beta_c \simeq 0.27465$, wie man aufgrund der Gleichheit der ersten Koordinationszahl erwartet. Er ist etwas niedriger als letzterer, was mit der höheren zweiten mittleren Koordinationszahl einhergeht, $\bar{c}_2^{\mathrm{TTT}} = 32 - 10\tau \simeq 15.82 > 12 = \bar{c}_2^{\triangle}$,[5] vgl. die Argumentation in Abschnitt 2.2.2.

2.2.6 Quadrat-Dreieck-Parkettierung

Auch für die zwölfzählig symmetrische Quadrat-Dreieck-Parkettierung [BKS92] existiert kein Wert für die kritische Temperatur. Eine Inflationsregel wurde in [HRB97] angegeben, sie ist in Abbildung 2.15 dargestellt. Es wurden zwei Sätze periodischer Approximanten mittels eines C++-Programms erzeugt. Der zweite Satz ist notwendig, da der Skalierungsfaktor $2+\sqrt{3} \simeq 3.732$ sehr groß ist. Auf diese Weise erhält man Approximanten der Größen $L \simeq 50.2, 187.4$ und $L \simeq 28.9, 107.9, 402.7$. Abbildung 2.14 zeigt die verwendeten Ausgangskonfigurationen und jeweils die zugehörigen ersten beiden Inflationsschritte. Das Finite-Size-Scaling macht keine Probleme, und man erhält für die inverse kritische Temperatur unter Verwendung der Werte für die drei größten Systeme $\beta_c \simeq 0.3364(5)$. Dieser Wert liegt zwischen den Werten des Dreieckgitters, $\beta_c \simeq 0.27465$, und des Quadratgitters, $\beta_c \simeq 0.44069$. Dies ist konsistent damit, daß die erste mittlere Koordinationszahl der Quadrat-Dreieck-Parkettierung aufgrund der Verwendung von Quadraten und Dreiecken als Kacheln zwischen denen beider Gitter liegt, $\bar{c}_1^{\square} = 4 < \bar{c}_1^{\square\triangle} = 12 - 4\sqrt{3} \simeq 5.072 < 6 = \bar{c}_1^{\triangle}$.[6]

[5] Unter der Annahme $\bar{c}_2^{\mathrm{TTT}} = p + q\tau$ mit ganzen Zahlen p und q ist der angegebene Wert im Bereich $|q| \leq 1000$ der einzige mit den numerischen Werten für große Approximanten konsistente.

[6] Der angegebene Wert für die erste mittlere Koordinationszahl der Quadrat-Dreieck-Parkettierung ist exakt. Als (sehr wahrscheinlich) exakter Wert für die zweite mittlere Koordinationszahl ergibt sich nach dem in Fußnote 5 beschriebenen Verfahren (mit $h = \sqrt{3}/2$ statt τ) $\bar{c}_2^{\square\triangle} = 24 - 15\sqrt{3}/2 \simeq 11.010$.

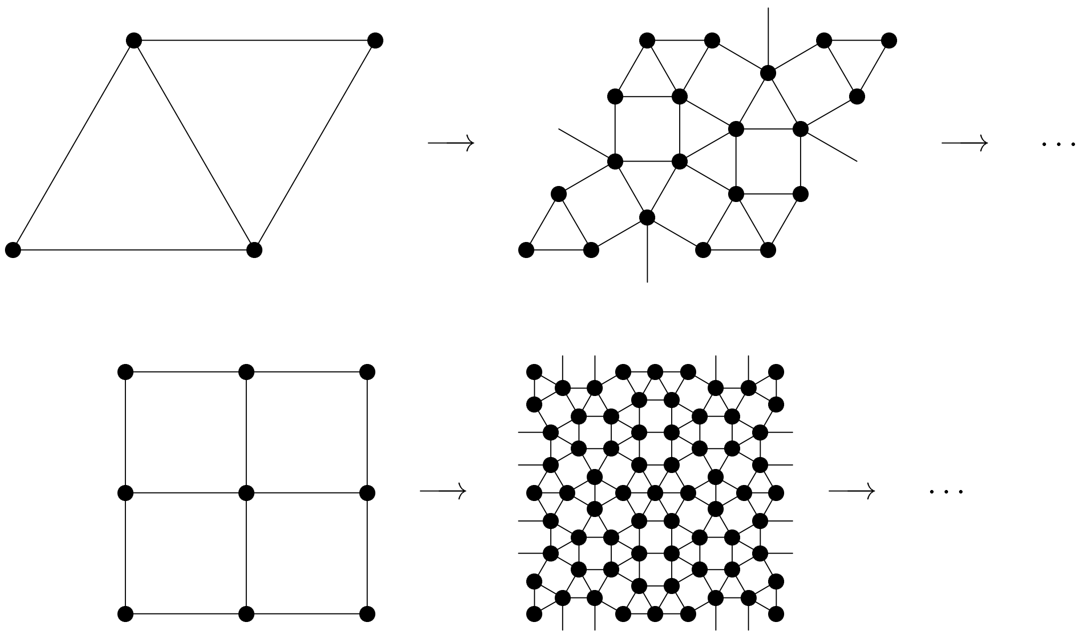


Abbildung 2.14: Ausgangskonfigurationen für die Erzeugung periodischer Approximanten der Quadrat-Dreieck-Parkettierung und die ersten durch die in Abbildung 2.15 dargestellte Inflation daraus hervorgehenden Konfigurationen

Parkettierung	Literaturwerte	Quelle	IC-Schätzung
Penrose	$\beta_c \simeq 0.417046(1)$	[RGS99b]	0.4170(8)
	$\beta_c \simeq 0.4181(7)$	[OkNi88]	
	$\beta_c \simeq 0.4165(9)$	[SJR91]	
duale Penrose	$\beta_c \simeq 0.465145(1)$	[RGS99b]	0.4652(8)
	$\beta_c \simeq 0.4640(7)$	[OkNi88]	
	$\beta_c \simeq 0.4657(10)$	[SJR91]	
Ammann-Beenker	$\beta_c \simeq 0.41887800(1)$	[RGS99b]	0.4191(7)
	$\beta_c \simeq 0.4186(7)$	[LLT95]	
duale Ammann-Beenker	$\beta_c \simeq 0.46318974(1)$	[RGS99b]	0.4634(10)
	$\beta_c \simeq 0.4635(7)$	[LLT95]	
Tübinger Dreieck			0.2565(6)
Quadrat-Dreieck			0.3364(5)

Tabelle 2.3: Werte der inversen kritischen Temperatur auf verschiedenen quasiperiodischen Parkettierungen. Die Literaturwerte der dualen Parkettierungen sind mittels der exakten Relation (2.9) und Fehlerfortpflanzung errechnet.

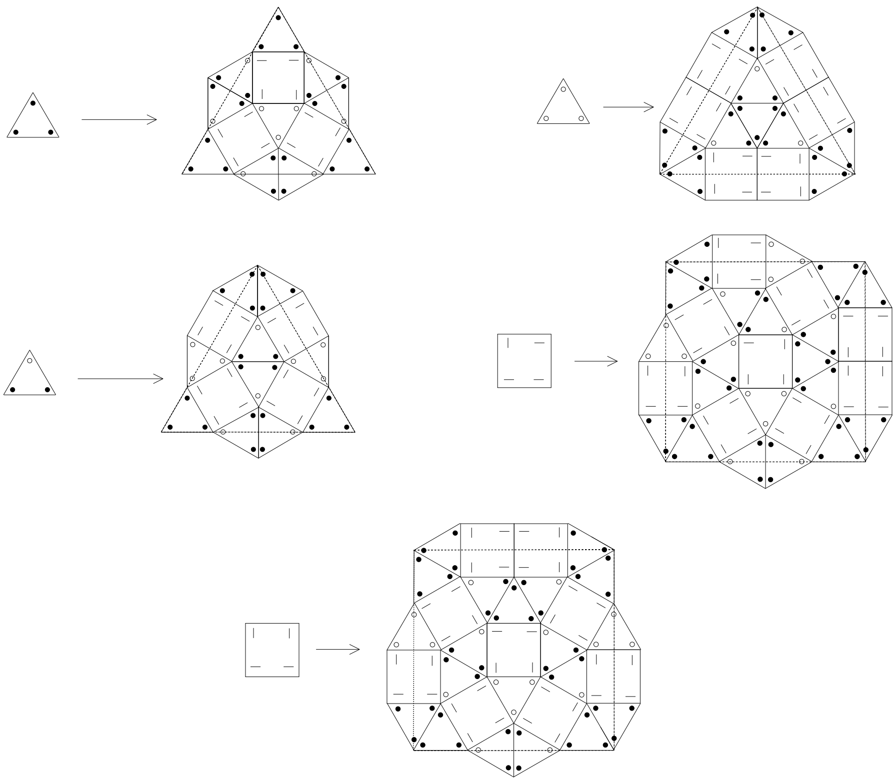


Abbildung 2.15: Inflationsregeln der Quadrat-Dreieck-Parkettierung [HRB97]

2.3 Kritische Temperatur und Dualität

Kennt man die kritische Temperatur des Ising-Modells auf irgendeinem Graphen, so ist es möglich, die kritische Temperatur auf solchen anderen Graphen zu erschließen, die durch bestimmte Transformationen aus dem ursprünglichen Graphen hervorgehen. Auf diese Weise lassen sich aus den hier untersuchten quasiperiodischen Parkettierungen weitere Graphen konstruieren, die sich zum Testen des Invaded-Cluster-Algorithmus eignen. Die wichtigste solche Transformation ist die Dualitätstransformation, auf die wir uns hier beschränken wollen. Weitere Transformationen werden in [Syo72, Bax82] beschrieben.

Unter einem *dualen Graphen* zu einem Graphen $G = (P, E)$ verstehen wir jeden Graphen $G^* = (P^*, E^*)$ mit folgenden Eigenschaften:

(a) In jeder der von den Kanten E umrandeten Flächen liegt genau ein Punkt aus P^*.

(b) Jede Kante in E wird genau von einer Kante in E^* gekreuzt und umgekehrt. Sich kreuzende Kanten werden auch zueinander *duale Kanten* genannt.

Wir wollen dabei voraussetzen, daß alle Flächen endlich sind, was bei periodisch geschlossenen Graphen und den hier betrachteten unendlichen Graphen immer der Fall ist.[7] Somit sind die Anzahl der Kanten des Graphen und seines Dualen gleich,

[7] für eine allgemeinere Definition s. [Vol91]

$|E^*| = |E|$. Ferner ist G immer auch ein dualer Graph zu G^*.

Wir betrachten nun das Ising-Modell mit identischen Kopplungsstärken J auf einem endlichen, periodisch geschlossenen Graphen $G = (P, E)$ und das auf einem dazu dualen Graphen $G^* = (P^*, E^*)$ mit Kopplungsstärken J^*. (Auf die Verallgemeinerung auf beliebige Kopplungstärken wird später eingegangen.) Als Abkürzungen definieren wir $N = |P|$, $N^* = |P^*|$, $S = |E| = |E^*|$. Die kanonischen Zustandssummen dieser Modelle sind dann nach (1.1)

$$Z = \sum_{\boldsymbol{\sigma} \text{ auf } G} \exp\Big(\sum_{\langle i,j\rangle \in E} K\sigma_i\sigma_j\Big) \qquad \text{mit } K = \beta J, \tag{2.1}$$

$$Z^* = \sum_{\boldsymbol{\sigma} \text{ auf } G^*} \exp\Big(\sum_{\langle i,j\rangle \in E^*} L\sigma_i\sigma_j\Big) \qquad \text{mit } L = \beta J^*. \tag{2.2}$$

Die Größen K und L heißen *reduzierte Kopplungen.*

Wie in [Syo72, Bax82] lassen sich nun Z und Z^* anders schreiben, so daß ein Bezug der beiden Zustandssummen offensichtlich wird, aus dem sich schließlich eine Relation der kritischen Temperaturen auf G und G^* ergibt.

2.3.1 Tieftemperatur-Bild von Z

Zu einer gegebenen Spin-Konfiguration $\boldsymbol{\sigma}$ sei unsat$(\boldsymbol{\sigma})$ die Anzahl der unerfüllten Bindungen ($\sigma_i \neq \sigma_j$). Dann läßt sich jeder Summand in (2.1) schreiben als

$$\exp(K(S - 2\,\text{unsat}(\boldsymbol{\sigma}))). \tag{2.3}$$

Nun betrachten wir jeden Spin aus G auf die korrespondierende Fläche in G^* gesetzt und wählen aus E^* die Kanten aus, die zwischen Flächen mit unterschiedlich gerichteten Spins liegen, also gerade alle die, die unerfüllte Bindungen in G kreuzen. So erhalten wir eine *Polygon-Konfiguration* ω auf G^*, d.h. eine Teilmenge $\omega \subset E^*$, in der jeden Punkt eine gerade Anzahl von Kanten verläßt. Es gilt $|\omega| = \text{unsat}(\boldsymbol{\sigma})$. Zu jeder Polygon-Konfiguration gehören genau zwei Spin-Konfigurationen. Aus (2.1) wird dann mit (2.3)

$$Z = 2\exp(KS) \sum_{\substack{\omega \text{ Poly.} \\ \text{auf } G^*}} (\exp(-2K))^{|\omega|}. \tag{2.4}$$

Der dominante Term in der Summe ist der für $|\omega| = 0$, speziell für kleine Temperaturen, also große K, denn dort geht $\exp(-2K)$ gegen Null. Daher kommt der Name Tieftemperatur-Bild.

2.3.2 Hochtemperatur-Bild von Z^*

Wegen $\sigma_i \in \{-1, 1\}$ gilt $\exp(L\sigma_i\sigma_j) = \cosh L + \sigma_i\sigma_j \sinh L$. Damit wird unter Benutzung der Identität $\sinh(x) = \tanh(x)\cosh(x)$ aus (2.2)

$$Z^* = (\cosh L)^S \sum_{\boldsymbol{\sigma} \text{ auf } G^*} \prod_{\langle i,j\rangle \in E^*} (1 + \sigma_i\sigma_j \underbrace{\tanh L}_{=:v}). \tag{2.5}$$

Multiplizieren wir das Produkt in (2.5) aus, so erhalten wir 2^S Terme. Zu jedem Term gehört eine Kanten-Konfiguration $\omega \subset E^*$, in der $\langle i, j\rangle$ genau dann enthalten ist, wenn der Faktor $v\sigma_i\sigma_j$ vorkommt. Jeder Term hat dann die Form

$$v^{|\omega|}\sigma_1^{n_1^{(\omega)}}\sigma_2^{n_2^{(\omega)}}\cdots\sigma_{N^*}^{n_{N^*}^{(\omega)}},$$

wobei $n_i^{(\omega)}$ die Anzahl der Kanten in ω bezeichne, die Punkt i verlassen.

Die Summation in (2.5) überleben aber nur solche Terme, bei denen alle $n_i^{(\omega)}$ gerade sind, d.h. nur die, die zu Polygon-Konfigurationen gehören. Damit wird aus (2.5)

$$Z^* = 2^{N^*}(\cosh L)^S \sum_{\substack{\omega \text{ Poly.} \\ \text{auf } G^*}} (\tanh L)^{|\omega|}. \tag{2.6}$$

Hier ist in der Summe wiederum der Term für $|\omega| = 0$ dominant, diesmal allerdings für hohe Temperaturen, also kleine L, wo $\tanh(L)$ gegen Null geht. Daher kommt der Name Hochtemperatur-Bild.

2.3.3 Dualitätsrelation

Vergleichen wir nun die gewonnenen Ausdrücke für die beiden Zustandssummen, (2.4) und (2.6). Es fällt ins Auge, daß für die Wahl

$$\tanh L = \exp(-2K) \quad \Leftrightarrow \quad \sinh 2K \sinh 2L = 1 \tag{2.7}$$

die beiden Zustandssummen sich gerade wie

$$Z^* = 2^{N^*}(\cosh L)^S \frac{1}{2}(\exp(-K))^S Z. \tag{2.8}$$

zueinander verhalten. Für jede andere Wahl statt (2.7) läßt sich sicherlich keine Beziehung der Form $Z^* = C_1 C_2^{N^*} C_3^S Z$ erhalten, da dann die Summen Beiträge liefern, die sich nicht in den Konstanten C_1 bis C_3 absorbieren lassen.

Hat das Ising-Modell auf einem (unendlichen) Graphen G einen Phasenübergang bei $K_c = \beta_c J$, so ist nach Definition an dieser Stelle die in (1.3) definierte freie Energie nicht-analytisch. Seien nun G_N periodische Approximanten von G und entsprechend $G^*_{N^*}$ periodische Approximanten von G^*. Setzen wir (2.7) voraus, so ist (2.8) für alle N erfüllt (S und N^* können wir dabei als Funktionen von N betrachten). Ist K_c ein Nicht-Analytizitätspunkt der freien Energie des Ising-Modells auf G, dann wird auch die freie Energie des Modells auf G^* einen Nicht-Analytizitätspunkt bei

$$L_c = -\frac{1}{2}\ln\tanh K_c \tag{2.9}$$

haben, das Modell also an dieser Stelle einen Phasenübergang. Dies sieht man leicht durch Einsetzen von (2.8) in (1.3):

$$\begin{aligned}
f^*(T,H) &= \lim_{N^*\to\infty} N^{*-1} \log Z^*(N^*,T,H) \\
&= \lim_{N\to\infty} (N^*(N))^{-1} \log \left(\frac{1}{2} 2^{N^*(N)} (\exp(-K(T)) \cosh L(T))^{S(N)} Z(N,T,H) \right) \\
&= \log 2 + \bar{c}_1^* \left(-K(T) + \log\cosh L(T)\right) + f(T,H)
\end{aligned}$$

Dabei wurde die Definition der ersten mittleren Koordinationszahl des dualen Graphen benutzt, $\bar{c}_1^* = \lim_{N^*\to\infty} S(N^*)/N^*$. Bei $K(T)$ und $\log\cosh L(T)$ handelt es sich um analytische Funktionen. Die Nicht-Analytizitätspunkte von f^* entsprechen also genau denen von f.

Die Erweiterung auf beliebige Kopplungen J_{ij} und J^*_{ij} ergibt sich folgendermaßen. In den obigen Gleichungen treten statt der Potenzen $X^{|M|}$ nun Produkte $\prod_{\langle i,j\rangle\in M} X_{ij}$ auf. Dabei ist M eine Menge von Kanten, entweder E^* oder ω, und X bzw. X_{ij} eine von den Kopplungen abhängige Größe, z.B. $\tanh L$. Aus (2.7) wird dann

$$\sinh(2K_{ij})\sinh(2L_{kl}) = 1 \qquad \text{mit } K_{ij} = \beta J_{ij},\ L_{kl} = \beta J^*_{kl},$$

wobei $\langle i,j\rangle \in E$ und $\langle k,l\rangle \in E^*$ sich überkreuzende, also zueinander duale Kanten sind.

Besonders einfach sind die Verhältnisse übrigens auf dem Quadratgitter. Dieses ist nämlich zu sich selbst dual, wenn man es um die halbe Diagonale eines Quadrats verschiebt. Unter der zusätzlichen Annahme, daß der Phasenübergang eindeutig ist, also die freie Energie nur einen (reellen) Nicht-Analytizitätspunkt hat,[8] ergibt sich die kritische Temperatur bereits aus der Relation (2.7). Wegen der Eindeutigkeit muß nämlich $K_\mathrm{c} = L_\mathrm{c}$ gelten, also wird aus (2.7) $(\sinh K_\mathrm{c})^2 = 1$. Auf diese Weise bestimmten Kramers und Wannier [KrWa41] erstmals die kritische Temperatur des Ising-Modells auf dem Quadratgitter zu $K_\mathrm{c} \simeq 0.4407$ noch vor der vollständigen Lösung durch Onsager.

Von den anderen vier in Abschnitt 2.1 betrachteten periodischen Graphen sind jeweils das Dreiecksgitter und die Sechseckpackung, sowie der Kagomé- und der Diced-Graph zueinander dual. Die in Tabelle 2.1 angegebenen Werte der kritischen Temperatur genügen dementsprechend der Dualitätsrelation (2.7).

2.3.4 Anwendung von IC auf duale Graphen

Aus dem vorhergehenden Abschnitt ergibt sich, daß man bei Kenntnis der kritischen Temperatur des Ising-Modells auf einem Graphen G über (2.9) auch die kritische Temperatur des Modells auf einem dazu dualen Graphen G^* erhält. Damit gibt es eine weitere Möglichkeit zum Testen des Invaded-Cluster-Algorithmus

[8] In [ABF87] wird eine hinreichende Bedingung für die Eindeutigkeit des Phasenübergangs angegeben, die für periodische Modelle trivialerweise erfüllt ist.

Graph (dazu dualer)	$\sinh(2\beta_c)\sinh(2\beta_c^*)$
Dreiecksgitter (Sechseckpackung)	0.9999(14)
Kagomé-Graph (Diced-Graph)	0.9999(12)
Penrose-Parkettierung	0.9999(13)
Ammann-Beenker-Parkettierung	1.0011(14)

Tabelle 2.4: Erfülltsein der Dualitätsrelation $\sinh(2\beta_c)\sinh(2\beta_c^*) = 1$ beim Invaded-Cluster-Algorithmus. Für die inversen kritischen Temperaturen auf dem Graphen und einem dazu dualen, β_c und β_c^*, wurden die in den Tabellen 2.1 und 2.3 zusammengestellten Werte und deren Fehler genommen.

auf dualen Graphen zur Penrose- und Ammann-Beenker-Parkettierung, deren kritische Temperaturen ja numerisch bekannt sind, vgl. Abschnitte 2.2.3 und 2.2.4. Die periodischen Approximanten der dualen Graphen wurden mittels eines C++-Programms aus den Daten der oben verwendeten Approximanten erzeugt. Auch hier stimmen die Ergebnisse von IC gut mit den bekannten Werten überein. Die Ergebnisse aller untersuchten quasiperiodischen Parkettierungen sind in Tabelle 2.3 auf Seite 46 zusammengestellt.

Unabhängig davon kann man überprüfen, ob die mit dem Invaded-Cluster-Algorithmus erhaltenen kritischen Temperaturen auf einem Graphen und einem dazu dualen, β_c und β_c^*, die Dualitätsrelation $\sinh(2\beta_c)\sinh(2\beta_c^*) = 1$ erfüllen. Das ist im Rahmen der Fehler tatsächlich der Fall, wie Tabelle 2.4 zeigt.

2.4 Graphen mit relevanter Unordnung

Bisher haben wir uns in diesem Kapitel nur mit einer nicht-universellen Eigenschaft des Ising-Modells auf verschiedenen periodischen und quasiperiodischen Graphen beschäftigt, seiner kritischen Temperatur. Wie sieht es mit den universellen Eigenschaften aus? Auf allen bisher untersuchten zweidimensionalen periodischen Graphen gehört das Ising-Modell zur Onsager-Universalitätsklasse. Eine anschauliche Begründung der Vermutung, daß dies tatsächlich für alle zweidimensionalen periodischen Graphen der Fall ist, benutzt die Tatsache, daß die Korrelationslänge am kritischen Punkt divergiert. Speziell ist sie ab einer gewissen Nähe zum kritischen Punkt sehr groß gegenüber der Periodenlänge. Damit sollte der Einfluß der Beschaffenheit der Fundamentalzelle am kritischen Punkt verschwinden, und also das kritische Verhalten aller periodischen Graphen gleich sein, speziell deren kritische Exponenten.

In den quasiperiodischen Parkettierungen ist nun eine gewisse Art von Unordnung eingeführt. Man könnte also annehmen, daß sich dadurch kritische Exponenten ergeben, die von denen der Onsager-Klasse abweichen. Numerisch bestätigte sich diese Vermutung nicht. Auch die mit dem Invaded-Cluster-Algorithmus gewonnenen Schätzungen in Tabelle 2.5 stimmen mit dem Onsager-Wert gut überein. Es gibt tatsächlich sehr gute Gründe, warum das Ising-Modell auf diesen Parkettie-

Parkettierung	IC-Schätzung
Penrose	$y_h \simeq 1.8735(24)$
duale Penrose	$y_h \simeq 1.8764(22)$
Ammann-Beenker	$y_h \simeq 1.8739(25)$
duale Ammann-Beenker	$y_h \simeq 1.8722(21)$
Tübinger Dreieck	$y_h \simeq 1.8751(10)$
Quadrat-Dreieck	$y_h \simeq 1.8728(17)$
Onsager-Wert	$y_h = 1.875$

Tabelle 2.5: Der kritische Exponent y_h des Ising-Modells auf verschiedenen quasiperiodischen Parkettierungen. Die Ergebnisse wurden mit dem in Abschnitt 1.5.6 beschriebenen Verfahren erhalten.

rungen zur Onsager-Klasse gehört. Einer davon soll im folgenden Abschnitt anhand eines relativ allgemeinen Kriteriums angegeben werden. Das Kriterium sucht, die Frage zu beantworten, in welchen Fällen Unordnung relevant ist, also zu anderen Werten der kritischen Exponenten führen kann.

2.4.1 Harris-Luck-Relevanzkriterium

Ein heuristisches Kriterium für die Relevanz von Unordnung für das kritische Verhalten von ferromagnetischen Spinsystemen wurde erstmals von Harris [Har74] für den Fall unabhängig verteilter Unordnung gegeben und später von Luck [Luc93] auf quasiperiodische Unordnung ausgedehnt. Eine gute Darstellung mit ausführlicher Diskussion und einigen Anwendungen findet sich in [Her99].

Man betrachtet ein ungestörtes Modell mit bekanntem Korrelationslängenexponenten ν und ein (schwach) gestörtes Modell, für dessen Exponenten man sich interessiert. Die mittlere Kopplungsstärke J_0 und die mittlere erste Koordinationszahl $\bar{c}_1$ des gestörten Modells sollen existieren. Für (ungefähr kugelförmige) Teilvolumen V mit N Spins definiert man die Abweichung der Summe der Kopplungsstärken vom Mittelwert über das ganze System

$$G_V(N) = \sum_{\langle i,j\rangle \in V} \left(J_{ij} - J_0 \frac{\bar{c}_1}{2} N \right) . \tag{2.10}$$

Es wird angenommen, daß sich die Standardabweichung dieser Größe für große N wie N^ω verhält. Der Exponent ω heißt *Fluktuationsexponent*. Die Unordnung soll d_m der d Dimensionen betreffen.

Das Harris-Luck-Kriterium besagt nun, daß die Unordnung dann *relevant* ist, also zu einem anderen Korrelationslängenexponenten als im ungestörten Fall führt, wenn der Fluktuationsexponent größer als der kritische Wert

$$\omega_\mathrm{c} = 1 - \frac{1}{d_\mathrm{m}\nu} \tag{2.11}$$

ist. Im Fall $\omega = \omega_c$ spricht man von *marginaler Unordnung*, das Kriterium kann dann keine Aussage über eine Änderung der kritischen Exponenten machen. Im Fall *irrelevanter Unordnung*, $\omega < \omega_c$, erwartet man keine Änderung der kritischen Exponenten.

Die Gültigkeit dieses Kriteriums wurde für eindimensionale Ising-Quantenketten mit nach Substitutionsregeln (vgl. den nächsten Abschnitt) variierenden Kopplungen im Rahmen einer exakten Ortsraumrenormierung explizit gezeigt. Diese Modelle sind zu zweidimensionalen Ising-Modellen mit Unordnung in einer Dimension äquivalent. Mit derselben Methode war dies auch für eine weitere Klasse eindimensionaler Modelle möglich. Für zweidimensionale Ising-Modelle mit ebenfalls nach Substitutionsregeln variierenden Kopplungen ergibt sich das Kriterium zumindest im Rahmen einer Approximation [Her99]. Für das im nächsten Kapitel behandelte Beispiel mit variierenden Kopplungen lassen sich Fälle konstruieren, bei denen das Kriterium relevante Unordnung voraussagt, die Modelle aber für spezielle (nichttriviale) Wahlen der Kopplungsstärken zur Onsager-Universalitätsklasse gehören. Für alle anderen Werte der Kopplungsstärken erwartet man aber tatsächlich von der Onsager-Klasse abweichende kritische Exponenten.

2.4.2 Topologische Unordnung

Aus (2.10) ist zu erkennen, daß wir zwei verschiedene Möglichkeiten haben, beim Ising-Modell Unordnung einzuführen. Zum einen können wir die Kopplungsstärken variieren – dies wird im nächsten Kapitel geschehen –, zum anderen können wir den Graphen verändern und so Koordinationszahlen erhalten, die um die mittlere Koordinationszahl fluktuieren. Im folgenden soll auf diese Art ein Beispiel konstruiert werden, das nach dem Harris-Luck-Kriterium relevante Unordnung enthält. Dazu werden wir einige durch eine Substitutionsregel festgelegte Bindungen des Quadratgitters entfernen. Im Anschluß daran sollen die oben betrachteten quasiperiodischen Parkettierungen kurz diskutiert werden.

Ein Beispiel relevanter Unordnung

Wir betrachten zweidimensionale Buchstabenfelder auf dem Alphabet $\mathcal{A} = \{a, b\}$. Auf diesem führen wir die Substitution

$$\rho: \qquad a \to \begin{pmatrix} b & b \\ a & b \end{pmatrix}, \qquad b \to \begin{pmatrix} a & a \\ a & a \end{pmatrix}$$

ein. Beginnend mit dem Buchstabenfeld (a) iterieren wir die Substitutionsregel. So erhalten wir nach und nach immer größere Buchstabenfelder. Jeden Buchstaben davon fassen wir nun als einen Punkt des Quadratgitters auf. Indem wir alle Bindungen des Quadratgitters weglassen, die zwei Punkte mit Buchstaben b verbinden, erhalten wir ein ausgedünntes Quadratgitter, bei dem die Koordinationszahlen relevant schwanken.

Um dies zu zeigen, folgen wir [Her99, Abschnitt 3.3.3] und betrachten die durch ρ auf den Bindungen $a{-}a$, $a{-}b$, $b{-}a$, $b{-}b$ induzierte Substitution

$$\hat{\rho}: \quad \begin{array}{ll} a{-}a \to \begin{array}{c} b{-}b{-}b \\ a{-}b{-}a \end{array}, & a{-}b \to \begin{array}{c} b{-}b{-}a \\ a{-}b{-}a \end{array}, \\ b{-}a \to \begin{array}{c} a{-}a{-}b \\ a{-}a{-}a \end{array}, & b{-}b \to \begin{array}{c} a{-}a{-}a \\ a{-}a{-}a \end{array}. \end{array}$$

(Die Substitution für die vertikalen Bindungen ist identisch wegen der Symmetrie der Substitution ρ.) Zu $\hat{\rho}$ gehört die *Substitutionsmatrix*

$$M_{\hat{\rho}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

die die für das Harris-Luck-Kriterium nötige Information enthält. Ihre Einträge zählen die Anzahl der Bindungen vom der jeweiligen Zeile entsprechenden Typ, die unter der Substitution aus einer Bindung vom der jeweiligen Spalte entsprechenden Typ hervorgehen. (Die erste Zeile bzw. Spalte entspricht Typ $a{-}a$, die zweite $a{-}b$ usw.) Das Spektrum dieser Matrix ist $\{4, -3, 1, -1\}$. $\lambda_1 = 4$ ist der Perron-Frobenius-Eigenwert. Er bezeichnet einfach die Anzahl der Bindungen, in die jede Bindung unter einem Substitutionsschritt übergeht. Der Betrag von $\lambda_2 = -3$ quantifiziert die Stärke der Fluktuationen. Den Zusammenhang zum Fluktuationsexponenten des Harris-Luck-Kriteriums gibt nun [Her99, (3.121)]:

$$\omega = \frac{\log|\lambda_2|}{\log \lambda_1} = \frac{\log 3}{\log 4} \simeq 0.792 > \omega_{\mathrm{c}} = \frac{1}{2}$$

Dabei ergibt sich ω_{c} nach (2.11) unter Verwendung des Korrelationslängenexponenten des Ising-Modells auf dem Quadratgitter, $\nu = 1$, und der Anzahl der von der Unordnung betroffenen Dimensionen, $d_{\mathrm{m}} = 2$. Das Kriterium sagt also tatsächlich relevante Fluktuationen voraus.

Auf Probleme bei der Simulation solcher Modelle mit relevanter Unordnung wird in Abschnitt 2.4.3 eingegangen.

Irrelevanz der Unordnung bei den betrachteten Parkettierungen

Auch das Ising-Modell auf zweidimensionalen quasiperiodischen Parkettierungen kann man als Störung des Modells auf dem Quadratgitter betrachten. Die Unordnung betrifft ebenfalls beide Dimensionen, wir erhalten also für den kritischen Fluktuationsexponenten wieder $\omega_{\mathrm{c}} = 1/2$. Um die Relevanz quasiperiodischer Parkettierungen zu überprüfen, müssen wir deren Fluktuationsexponent ω bestimmen. Dies wurde meines Wissens bisher noch nicht systematisch getan, und es hier zu tun, würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Es ist jedoch davon auszugehen, daß es ausreichend ist, statt der Substitutionsmatrix der Bindungssubstitution die der Kachel-Inflation zu benutzen, da erstere alle Eigenwerte der letzteren erbt und vermutlich nur Eigenwerte hinzukommen, die schlimmstenfalls marginale Unordnung bewirken [Her99, Abschnitt 3.3.3].

Als Beispiel sei hier nur die Tübinger Dreieck-Parkettierung vorgeführt. Das Ergebnis ist bei den anderen hier betrachteten Parkettierungen qualitativ dasselbe. Wie Abbildung 2.13 zu entnehmen ist, geht unter Inflation ein kleines Dreieck in ein großes und ein kleines Dreieck über, ein großes dagegen in zwei große und ein kleines. Damit erhält man die Substitutionsmatrix $M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ mit den Eigenwerten $\lambda_1 = (3+\sqrt{5})/2 \simeq 2.618$ und $\lambda_2 = (3-\sqrt{5})/2 \simeq 0.382$. Als Fluktuationsexponent ergibt sich $\omega = -1 < \omega_\mathrm{c} = 1/2$ und somit irrelevante Unordnung.

2.4.3 Simulation von Modellen mit relevanter Unordnung

Bei einem Modell mit Fluktuationsexponent ω erwarten wir für ein endliches Teilvolumen mit L^d Spins typische Abweichungen der kritischen Temperatur vom Wert auf dem unendlichen System in der Größenordnung $L^{-d(1-\omega)}$ [Her99, (2.4)]. Für die hier betrachteten zweidimensionalen Modelle mit Systemgrößen bis ca. $L = 288$ ergibt sich also schon im Fall marginaler Unordnung $\omega = \omega_\mathrm{c} = 1/2$ vermutlich eine Abweichung in der zweiten oder dritten Nachkommastelle. Um einigermaßen verläßliche Werte der geschätzten kritischen Temperatur für endliche Systemgrößen zu erhalten, mit denen Finite-Size-Scaling sinnvoll ist, sollte man entweder über verschiedene Approximanten gleicher Größe mitteln oder solche Approximanten benutzen, deren mittlere Koordinationszahl und mittlere Kopplungsstärke möglichst dicht beim unendlichen System liegen.

Kapitel 3

Anwendung von IC auf Modelle mit verschiedenen Kopplungen

In Abschnitt 1.5.1 wurde der Invaded-Cluster-Algorithmus für Ising-Modelle mit identischen Kopplungen eingeführt. Bevor wir uns einem konkreten Modell mit verschiedenen Kopplungsstärken zuwenden, wollen wir untersuchen, wie der Algorithmus auf solche Modelle erweitert werden kann. Eine derartige Erweiterung ist nicht schwierig, wurde aber bisher noch nicht veröffentlicht [Mac98].

3.1 Erweiterung des Invaded-Cluster-Algorithmus

3.1.1 IC für beliebige Kopplungsstärken

Schauen wir uns die Beziehung zwischen dem Swendsen-Wang- und dem Invaded-Cluster-Algorithmus noch einmal genauer an. Bei SW wird für jede Bindung $\langle i, j \rangle$ eine Zufallszahl $0 \leq t_{ij} < 1$ gezogen und die Bindung ausgewählt, wenn die Bedingung

$$t_{ij} < p_{ij} = 1 - e^{-2\beta J_{ij}} \tag{3.1}$$

erfüllt ist, wobei J_{ij} die Kopplungsstärke der Bindung bezeichnet. Bei IC wollen wir dagegen die Bindungen in zufälliger Reihenfolge auswählen, bis eine Abbruch-Bedingung erfüllt ist. Wir erniedrigen also gewissermaßen die Temperatur in der Bindungswahrscheinlichkeit p_{ij} Schritt für Schritt, denn durch das Auswählen einer Bindung wird die Konfiguration typischer für eine kleinere Temperatur. Die Temperatur, die der zuletzt ausgewählten Bindung entspricht, liefert dann eine Schätzung für die (im Fall der Perkolation als Abbruch-Bedingung) kritische Temperatur. Lösen wir (3.1) nach β auf,

$$\beta < -\frac{1}{2J_{ij}} \ln(1 - t_{ij}) =: \beta_{ij}, \tag{3.2}$$

so sehen wir, wie der Invaded-Cluster-Algorithmus modifiziert werden muß.

Bindungsschritt:

1. Ziehe für jede Bindung $\langle i,j\rangle$ eine Zufallszahl $0 \le t_{ij} < 1$ und berechne $\beta_{ij} := -\frac{1}{2J_{ij}}\ln(1-t_{ij})$.
2. Wähle die erfüllten Bindungen in aufsteigender Reihenfolge bezüglich der Werte β_{ij} aus, bis die Abbruch-Bedingung erfüllt ist. Der Wert β_{ij} der zuletzt ausgewählten Bindung $\langle i,j\rangle$ ist die Schätzung β_{est} der inversen Temperatur.

Die Zufallszahlen t_{ij} haben hier zweierlei Funktion. Zum einen bestimmen sie über die Werte β_{ij} die Reihenfolge, in der die Bindungen ausgewählt werden, zum anderen gibt das β_{kl} der zuletzt ausgewählten Bindung $\langle k,l\rangle$ die Schätzung der inversen Temperatur. Als einziger Zahlenwert ist dabei der von t_{kl} relevant, alle übrigen t_{ij} dienen nur der Festlegung der Reihenfolge. Die Zufallszahlen müssen also gar nicht unabhängig voneinander sein, wie dies beim Swendsen-Wang-Algorithmus unbedingt der Fall sein muß. Es darf nur keine Bindung $\langle i,j\rangle$ ausgezeichnet sein, die t_{ij} müssen also gleichverteilt sein. Damit β_{kl} eine sinnvolle Schätzung ist, muß weiterhin gewährleistet sein, daß jede einzelne Zufallszahl gleichmäßig über das Intervall $[0,1[$ verteilt ist oder zumindest eine Gleichverteilung durch eine endliche diskrete Verteilung möglichst gut angenähert wird. Wir können also, statt die Zufallszahlen t_{ij} gleichverteilt aus dem Intervall $[0,1[$ zu ziehen, eine zufällige (gleichverteilte) Permutation der Zahlen $\{\frac{1}{2|E|},\frac{3}{2|E|},\ldots,\frac{2|E|-1}{2|E|}\}$ verwenden. (Dabei bezeichnet $|E|$ die Anzahl der Bindungen.)

Sind alle Kopplungen identisch, ist das hier vorgestellte Verfahren äquivalent zu dem in Abschnitt 1.5.1 beschriebenen.[1] Ein großer Unterschied hinsichtlich der Ausführungsgeschwindigkeit des Algorithmus ergibt sich jedoch daraus, daß die für den Fall identischer Kopplungen nötige zufällige Permutation mit einem Aufwand in der Größenordnung $\mathcal{O}(|E|)$ möglich ist, gemessen beispielsweise in Rechenschritten. Das Sortieren der β_{ij} mit Quick-Sort, dem schnellsten bekannten, allgemein anwendbaren Sortier-Verfahren, jedoch nur mit Aufwand $\mathcal{O}(|E|\log|E|)$, vgl. z.B. [Sed95]. Im speziellen Fall, daß wir nur eine kleine Zahl n verschiedener Kopplungsstärken haben, läßt sich das Sortieren allerdings mit Aufwand $\mathcal{O}(n|E|)$ bewerkstelligen, wie jetzt beschrieben werden soll.

3.1.2 IC für wenige verschiedene Kopplungsstärken

Wir beschränken uns auf den Fall, daß die Kopplungsstärken J_{ij} nur n verschiedene Werte annehmen, wobei n eine kleine Zahl sein soll, $n \ll |E|$. Dann ist das Erstellen der für den Bindungsschritt des Invaded-Cluster-Algorithmus nötigen Permutation mit einem Aufwand in der Größenordnung $\mathcal{O}(n|E|)$ möglich. Hierfür soll nun ein

[1] Das in Abschnitt 1.5.1 beschriebene Verfahren entspricht allerdings der Verwendung einer Permutation der Zahlen $\{\frac{1}{|E|},\frac{2}{|E|},\ldots,1\}$. Dies hat die Nachteile, daß einerseits der Mittelwert der Zahlen nicht genau $1/2$ ist und andererseits der Logarithmus in (3.2) für $t_{ij}=1$ nicht definiert ist. Für große $|E|$ sind diese Unterschiede aber vernachlässigbar klein.

geeignetes Verfahren angegeben werden. Dazu denken wir uns die Bindungen $\langle i,j\rangle$ mit $1,\ldots,|E|$ durchnumeriert.

Bindungsschritt:

1. Erzeuge eine Hilfs-Permutation π der Zahlen $\{1,\ldots,|E|\}$.
2. Definiere für jede Bindung einen Wert der inversen Temperatur,
$$\beta_{\pi(i)} := -\frac{1}{2J_{\pi(i)}}\ln\left(1-\frac{2i-1}{2|E|}\right), \quad i=1,\ldots,|E|.$$
3. Erzeuge die für den Bindungsschritt nötige Permutation Π der Zahlen $\{1,\ldots,|E|\}$ in den folgenden Schritten. Führe dazu eine Liste $(k_t)_{1\le t\le n}$ der kleinsten Indizes in π, für die $\pi(k_t)$ zu den noch nicht bearbeiteten Bindungen vom Typ t gehört.
   (a) Initialisiere die k_t mit den Indizes der ersten in π auftauchenden Bindungen des jeweiligen Typs t.
   (b) Führe nun die folgenden Schritte für $i=1,\ldots,|E|$ aus.
      i. Bestimme den Wert von t, für den $\beta_{\pi(k_t)}$ minimal wird.
      ii. Setze $\Pi(i) := \pi(k_t)$.
      iii. Erhöhe k_t, bis $\pi(k_t)$ wieder eine Bindung vom Typ t erreicht.
4. Wähle die erfüllten Bindungen in der Reihenfolge der Permutation Π aus, bis die Abbruch-Bedingung erfüllt ist. Der Wert β_l der zuletzt ausgewählten Bindung l ist die Schätzung β_{est} der inversen Temperatur.

Die Schritte 1 und 2 sind sicherlich mit Aufwand $\mathcal{O}(|E|)$ möglich. In Schritt 3 durchläuft jeder der n Zähler k_t schlimmstenfalls alle Zahlen $1,\ldots,|E|$. Dieser Schritt ist also mit Aufwand $\mathcal{O}(n|E|)$ möglich. Damit kann das Erstellen der Permutation Π mit einem Aufwand in der Größenordnung $\mathcal{O}(n|E|)$ erfolgen.

3.2 Das Ising-Modell auf dem Labyrinth

Wir wenden uns nun dem Ising-Modell auf einem speziellen Graphen mit verschiedenen Arten von Kanten zu, dem sog. Labyrinth [SMS89]. Dieser Graph ist im wesentlichen ein verzerrtes Quadratgitter. Man konstruiert ihn durch Anwendung einer Substitutionsregel für Buchstabenketten auf dem Alphabet $\mathcal{A}=\{a,b\}$. Wir betrachten hier speziell die Substitution

$$\rho: \begin{array}{ccc} a & \to & b \\ b & \to & bab \end{array}.$$

Durch iterierte Anwendung der Substitution auf die Buchstabenkette a erhält man zunächst eine beidseitig unendliche Buchstabenkette (dazu muß man strenggenommen in der Substitution noch festlegen, wo sich jeweils der Ursprung befindet). In unserem Fall ist dies $\ldots babbbabbabbabbbab\ldots$, die sog. *silberne Kette*. Diese Bezeichnung ergibt sich daraus, daß der Perron-Frobenius-Eigenwert der zugehörigen Substitutionsmatrix $M=\left(\begin{smallmatrix}0&1\\1&2\end{smallmatrix}\right)$ die silberne Zahl $\lambda=1+\sqrt{2}$ ist.

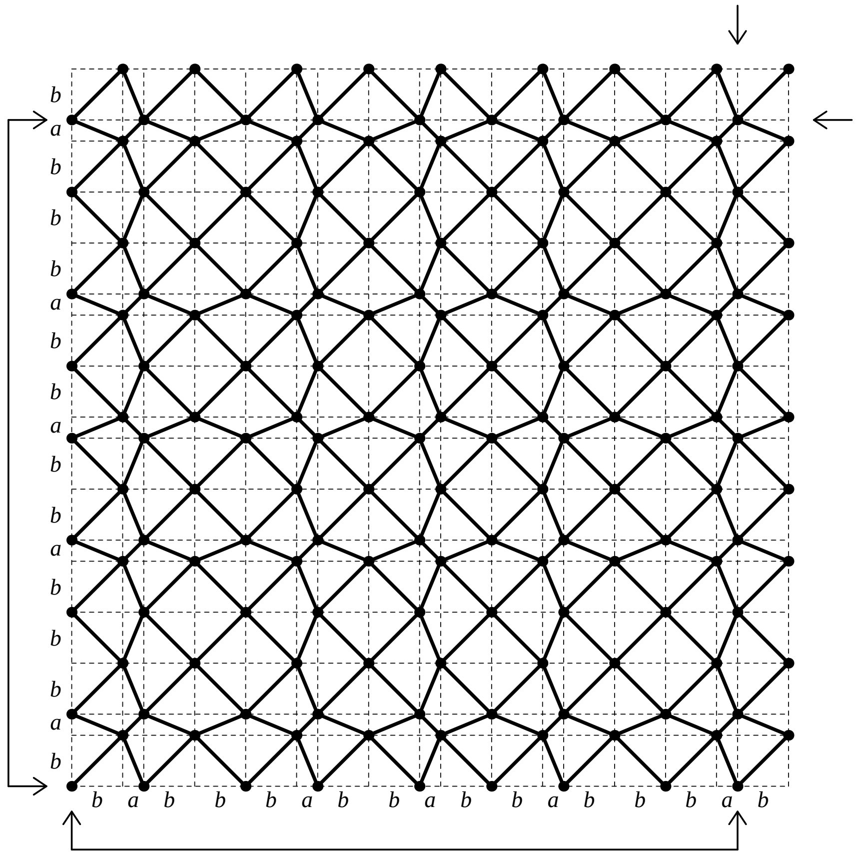


Abbildung 3.1: Ein Approximant der Labyrinths [BGB94]. Die Pfeile bezeichnen einen Satz möglicher Stellen, an denen er abgeschnitten werden kann, um ein periodisches Schließen zu ermöglichen.

Nun ordnet man jedem Buchstaben eine Intervall-Länge zu, bei der silbernen Kette üblicherweise dem Buchstaben a die Länge 1 und dem Buchstaben b die Länge λ. Durch Bildung des kartesischen Produkts zweier unendlicher Buchstabenketten in solch einer Darstellung erhält man ein verzerrtes Quadratgitter. In diesem wählt man, beginnend vom Ursprung, schachbrettartig jeden zweiten Punkt aus und verbindet über die Diagonalen des Quadratgitters nächste Nachbarn durch eine Kante. Auf diese Weise erhält man das *Labyrinth*.

Abbildung 3.1 ist zu entnehmen, wie sich periodische Approximanten des Labyrinths konstruieren lassen. Man entnimmt jeweils den Graphen, der den zentralen $l \times l$ Fundamentalzellen entspricht, und schließt ihn periodisch. Dies ist genau dann möglich, wenn l eine gerade Zahl ist. Auf diese Weise erhält man einen periodischen Approximanten mit $l^2/2$ Punkten.

Das Labyrinth hat acht verschiedene Arten von Kanten. Es treten nämlich alle vier Kombinationen beider Intervalle als Seiten der Elementarzellen des verzerrten Quadratgitters auf, und wir können zwischen aufsteigenden und absteigenden Kanten unterscheiden. Das Ising-Modell auf dem Labyrinth erhält man, indem jedem

Kantentyp eine Kopplungsstärke zugeordnet wird.

Es stellt sich heraus, daß für bestimmte Wahlen der Kopplungsstärken das Modell exakt lösbar ist [BGB94]. Gehen wir wie in (2.1) und (2.2) zu reduzierten Kopplungen über und bezeichnen die der aufsteigenden Kanten mit K_{xy} und die der absteigenden mit L_{xy} $(x, y \in \{a, b\})$, so lauten vier Bedingungen [BGB94, (4.6)]

$$\sinh(2K_{xy})\sinh(2L_{xy}) = 1, \quad x, y \in \{a, b\}. \tag{3.3}$$

Diese haben die Form der Dualitätsbedingung (2.7). Für inversionssymmetrische (*palindromische*) Ketten wie die silberne Kette kann man diese Bedingungen folgendermaßen interpretieren. Aus jedem Approximanten des Labyrinths, der auf einer inversionssymmetrischen Kette basiert (wie der in Abbildung 3.1 dargestellte), entsteht durch eine geeignete Spiegelung oder Drehung ein zu diesem dualer Graph, und zwar genau so, daß sich immer eine aufsteigende und eine absteigende Kante mit gleicher Buchstabenkombination kreuzen.

Eine fünfte Bedingung ist durch

$$\begin{aligned}
&\frac{\sinh(2K_{aa})^2\cosh(-L_{aa}+K_{ba}+L_{bb}+K_{ab})}{\cosh(-K_{aa}+L_{ba}+K_{bb}+L_{ab})}\times\\
&\qquad\times\frac{\cosh(K_{aa}-L_{ba}+K_{bb}+L_{ab})}{\sinh(2K_{ba})^2\cosh(L_{aa}-K_{ba}+L_{bb}+K_{ab})}\times\\
&\qquad\times\frac{\sinh(2K_{bb})^2\cosh(L_{aa}+K_{ba}-L_{bb}+K_{ab})}{\cosh(K_{aa}+L_{ba}-K_{bb}+L_{ab})}\times\\
&\qquad\qquad\times\frac{\cosh(K_{aa}+L_{ba}+K_{bb}-L_{ab})}{\sinh(2K_{ab})^2\cosh(L_{aa}+K_{ba}+L_{bb}-K_{ab})}=1
\end{aligned} \tag{3.4}$$

gegeben [BGB94, (4.5)]. Mit der kritischen Temperatur und den 8 Kopplungsstärken haben wir 9 zu bestimmende Größen, die durch die 5 Bedingungen (3.3) und (3.4) eingeschränkt werden. Wir können also 4 der noch unabhängigen Größen vorgeben und erhalten die übrigen durch Lösen der Gleichungen. Letzteres kann nur numerisch geschehen, da es sich um transzendente Gleichungen handelt.

Schränken wir das Problem auf den isotropen Unterfall ein, daß wir nur zwischen kurzen, mittleren und langen Kanten (mit reduzierten Kopplungen K_k, K_m, K_ℓ) unterscheiden, so existiert eine exakte Lösung nur für den Fall, daß alle Kopplungen identisch sind. Dies entspricht gerade dem gewöhnlichen Ising-Modell auf dem Quadratgitter. Wir wollen den Fall nicht-identischer Kopplungen nun mit dem Invaded-Cluster-Algorithmus numerisch untersuchen.

l	Kopplungs-Häufigkeiten (n_k, n_m, n_ℓ)
16	$(0.0976562, 0.429688, 0.472656)$
40	$(0.09, 0.42, 0.49)$
98	$(0.0875677, 0.416701, 0.495731)$
238	$(0.0865052, 0.415225, 0.49827)$
22	$(0.0743802, 0.396694, 0.528926)$
34	$(0.0865052, 0.415225, 0.49827)$
46	$(0.0798677, 0.405482, 0.51465)$
68	$(0.0865052, 0.415225, 0.49827)$
90	$(0.0834568, 0.410864, 0.505679)$

l	Kopplungs-Häufigkeiten (n_k, n_m, n_ℓ)
136	$(0.0865052, 0.415225, 0.49827)$
158	$(0.0847621, 0.412754, 0.502484)$
182	$(0.0848026, 0.412812, 0.502385)$
226	$(0.0852847, 0.413501, 0.501214)$
272	$(0.0865052, 0.415225, 0.49827)$
316	$(0.0866147, 0.415378, 0.498007)$
362	$(0.0857422, 0.414151, 0.500107)$
408	$(0.0865052, 0.415225, 0.49827)$
∞	$(0.0858, 0.4142, 0.5)$

Tabelle 3.1: Kopplungs-Häufigkeiten der verwendeten Approximanten des isotropen Labyrinths. Für die Approximanten wurden jeweils die ersten l Buchstaben der silbernen Kette verwendet. Dies entspricht der linearen Systemgröße $L = l/\sqrt{2}$.

3.3 Das Labyrinth mit 3 Kopplungen

Für das Ising-Modell auf dem isotropen Labyrinth mit drei verschiedenen Kopplungen stellt sich heraus, daß die freie Energie genau dann mit der des Modells auf einem dazu dualen Graphen übereinstimmt, wenn die Bedingung

$$(\sinh 2K_k)^{n_k}(\sinh 2K_m)^{n_m}(\sinh 2K_\ell)^{n_\ell} = 1 \tag{3.5}$$

erfüllt ist. Dabei bezeichnen die n_x die relativen Häufigkeiten der verschiedenen Kopplungen, für die silberne Kette sind dies $n_k = 5/2 - \lambda \simeq 0.0858$, $n_m = \lambda - 2 \simeq 0.4142$, $n_\ell = 1/2$. Durch (3.5) ist eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit $\mathcal{I}$ im dreidimensionalen Kopplungsraum definiert. Die Menge $\mathcal{M}$ der Nicht-Analytizitätspunkte der freien Energie (als Funktion der drei reduzierten Kopplungen) ist ebenfalls eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit, da nach der üblichen, auf Peierls [Pei36] zurückgehenden Argumentation zu jeder Wahl der Kopplungen $\boldsymbol{J}$ eine kritische Temperatur existiert. Beide Mengen haben sicherlich den kritischen Punkt bei identischen Kopplungen, $K_k = K_m = K_\ell = \ln(1+\sqrt{2})/2$, gemeinsam. Eine interessante Frage ist, wie die Mengen $\mathcal{I}$ und $\mathcal{M}$ relativ zueinander liegen. Diese Frage soll nun für einige Werte der Kopplungsstärken mit Hilfe des Invaded-Cluster-Algorithmus numerisch untersucht werden.

Dazu sollen systematisch die Abweichungen der kritischen reduzierten Kopplungen von der Fläche $\mathcal{I}$ studiert werden. Da alle reduzierten Kopplungen dieselbe Temperatur enthalten, wurden im folgenden die Kopplungsstärken so normiert, daß die mittlere Kopplung des unendlichen Systems 1 beträgt, $J_k n_k + J_m n_m + J_\ell n_\ell = 1$. Eine Kopplung wurde jeweils gegenüber dem homogenen Fall $\boldsymbol{J} = (1, 1, 1)$ verändert, eine weitere belassen und die letzte entsprechend der Normierungsbedingung gewählt.

Um Fehler bei der Implementation der in Abschnitt 3.1.2 angegebenen Erweiterung des Invaded-Cluster-Algorithmus auszuschließen, wurde zunächst überprüft,

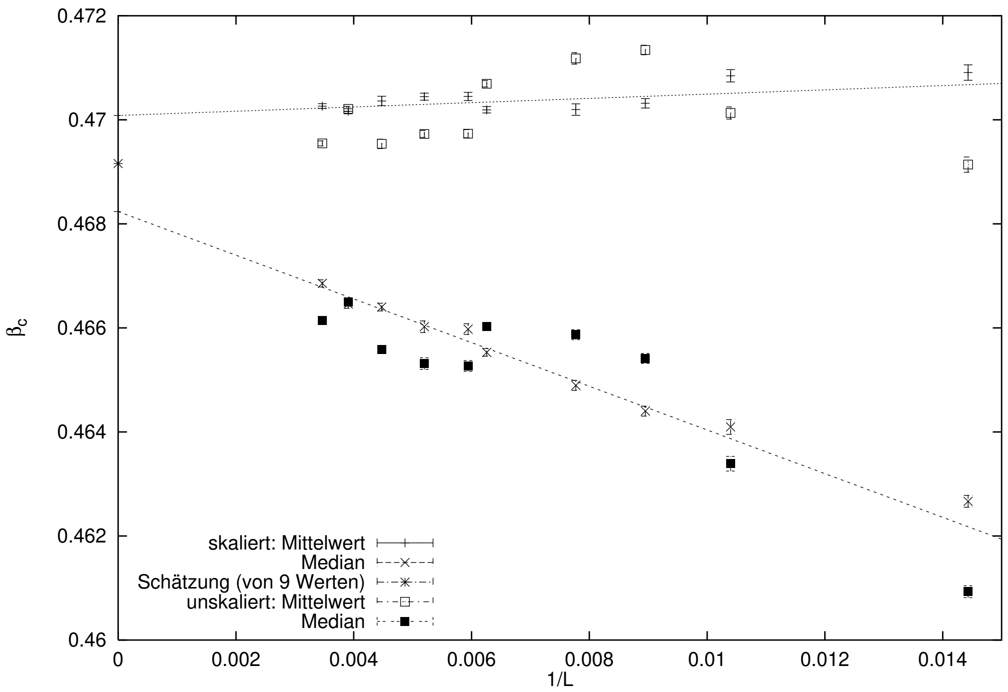


Abbildung 3.2: Finite-Size-Scaling der inversen kritischen Temperatur β_c für das Labyrinth mit drei verschiedenen Kopplungen, $\boldsymbol{J} = (2.5, 1, 0.742641)$

daß im homogenen Fall die Temperaturwerte des nicht modifizierten Ising-Modells auf dem Quadratgitter reproduziert werden. Für die Wahl $\boldsymbol{J} = (J_k, J_m, J_\ell) = (2.5, 1, 0.742641)$ ist das Finite-Size-Scaling der kritischen Temperatur in Abbildung 3.2 dargestellt. Es fällt sofort auf, daß die erhaltenen Werte (in der Abbildung mit „unskaliert“ bezeichnet) deutlich stärker schwanken als die Werte im letzten Kapitel. Dies liegt an der Tatsache, daß die Kopplungs-Häufigkeiten der verwendeten Approximanten von denen des unendlichen Systems teilweise beträchtlich abweichen, wie Tabelle 3.1 zu entnehmen ist. Deshalb wurden die erhaltenen Werte für β_c mit der tatsächlichen mittleren Kopplungsstärke skaliert. Auf diese Weise läßt sich die Extrapolation der kritischen Temperatur wie gewohnt durchführen. In den Abbildungen 3.3 bis 3.5 findet sich das Finite-Size-Scaling für drei weitere Wahlen der Kopplungsstärken.

Die Ergebnisse sind in Tabelle 3.2 zusammen mit der Angabe ihrer Lage bezüglich der Fläche $\mathcal{I}$ dargestellt. Durch die Normierung der drei Kopplungsstärken sind nur zwei Kopplungsstärken unabhängig. Dafür können wir beispielsweise (J_k, J_m) wählen. Zu jedem Paar gehört eindeutig ein Wert $\beta_\mathcal{I}$, so daß die zugehörigen reduzierten Kopplungen $(K_k, K_m, K_\ell) = \beta_\mathcal{I}(J_k, J_m, J_\ell)$ die Gleichung (3.5) erfüllen, also auf der Fläche $\mathcal{I}$ liegen. Als Umkehrfunktion einer beliebig oft differenzierbaren Funktion ist $\beta_\mathcal{I}(J_k, J_m)$ wiederum beliebig oft differenzierbar. Weiterhin existiert zu jedem Paar (J_k, J_m) eine eindeutige kritische Temperatur β_c. Aller Erwartung nach ist $\beta_c(J_k, J_m)$ ebenfalls eine zumindest stetige Funktion. Um nun die Frage der re-

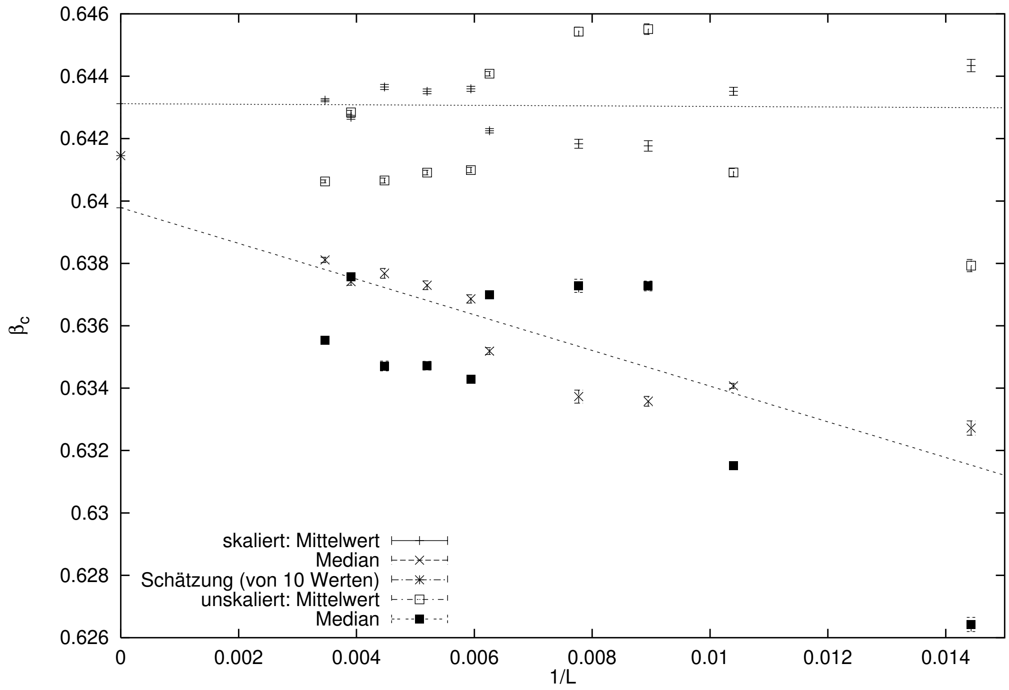


Abbildung 3.3: Finite-Size-Scaling der inversen kritischen Temperatur β_c für das Labyrinth mit drei verschiedenen Kopplungen, $\boldsymbol{J} = (5, 1, 0.313708)$

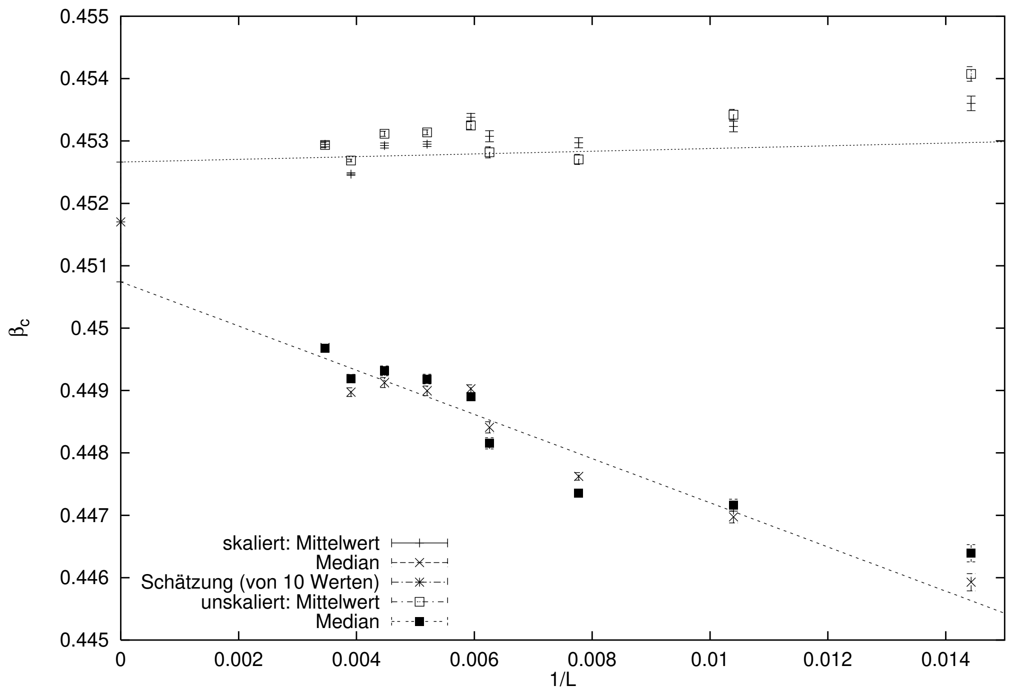


Abbildung 3.4: Finite-Size-Scaling der inversen kritischen Temperatur β_c für das Labyrinth mit drei verschiedenen Kopplungen, $\boldsymbol{J} = (0.179167, 1.17, 1)$

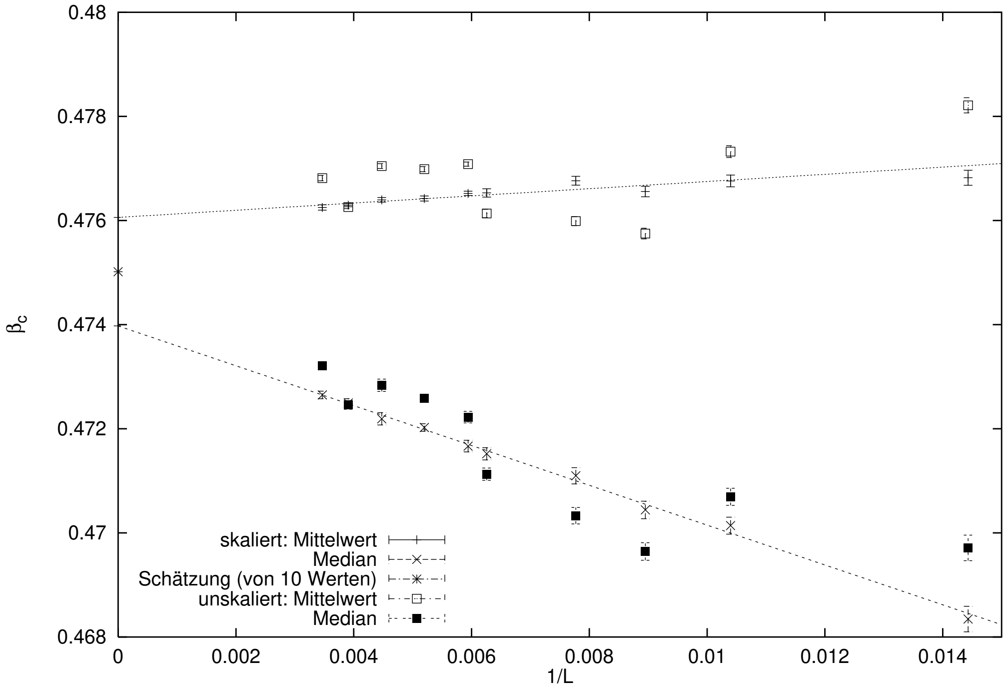


Abbildung 3.5: Finite-Size-Scaling der inversen kritischen Temperatur β_c für das Labyrinth mit drei verschiedenen Kopplungen, $\boldsymbol{J} = (1, 0.517157, 1.4)$

lativen Lage der Flächen $\mathcal{I}$ und $\mathcal{M}$ zu klären, betrachten wir Tabelle 3.2. Man sieht zunächst, daß $\mathcal{I}$ und $\mathcal{M}$ sicherlich nicht identisch sind. Ferner liegt keine Fläche ganz auf einer Seite der anderen. Letzteres ergibt sich aus der Ungleichheit beider Flächen schon durch die Tatsache, daß für jeden kritischen Punkt (K_k, K_m, K_ℓ) durch die dualen Kopplungen (L_k, L_m, L_ℓ) gemäß (2.7) ein kritischer Punkt auf der anderen Seite von $\mathcal{I}$ gegeben ist.[2] Ist $\beta_c(J_k, J_m)$ wirklich stetig, so folgt daraus, daß sich die beiden Flächen in einer Kurve kritischer Punkte schneiden, die die freie Energie invariant lassen, nicht nur im kritischen Punkt des homogenen Falls.

Um dieser Frage numerisch auf den Grund zu gehen, müßte man versuchen, durch geschickte Interpolation zwischen den bisher untersuchten Kopplungsstärken kritische Punkte zu finden, die im Rahmen der Genauigkeit auf der Fläche $\mathcal{I}$ liegen. Dies würde jedoch den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

[2]Aus (3.5) als Ungleichung, $(\sinh 2K_k)^{n_k}(\sinh 2K_m)^{n_m}(\sinh 2K_\ell)^{n_\ell} \lesseqgtr 1$, folgt mit (2.7) $(\sinh 2L_k)^{-n_k}(\sinh 2L_m)^{-n_m}(\sinh 2L_\ell)^{-n_\ell} \lesseqgtr 1$, also $(\sinh 2L_k)^{n_k}(\sinh 2L_m)^{n_m}(\sinh 2L_\ell)^{n_\ell} \gtreqless 1$.

Kopplungen	IC-Schätzung	Lage bzgl. $\mathcal{I}$
$(2.5, 1, 0.742641)$	$\beta_c \simeq 0.4692(9)$	$> \beta_{\mathcal{I}} \simeq 0.457475$
$(5, 1, 0.313708)$	$\beta_c \simeq 0.6415(17)$	$> \beta_{\mathcal{I}} \simeq 0.546434$
$(0.179167, 1.17, 1)$	$\beta_c \simeq 0.4517(10)$	$< \beta_{\mathcal{I}} \simeq 0.467098$
$(1, 0.517157, 1.4)$	$\beta_c \simeq 0.4750(10)$	$> \beta_{\mathcal{I}} \simeq 0.470538$

Tabelle 3.2: Werte der inversen kritischen Temperatur auf dem isotropen Labyrinth für verschiedene Wahlen der Kopplungsstärken. Die Lage der entsprechenden Punkte $\beta_{\mathcal{I}}$ auf der Fläche $\mathcal{I}$ wurde durch numerische Lösung von (3.5) erhalten.

3.4 Das Labyrinth mit 8 Kopplungen

Es wurden auch zwei exakt lösbare Fälle des Ising-Modells auf dem anisotropen Labyrinth mit acht verschiedenen Kopplungsstärken betrachtet, um die mit dem Invaded-Cluster-Algorithmus gewonnen Resultate mit einer genauen numerischen Lösung vergleichen zu können. Die Kopplungsstärken wurden gemäß (3.3) und (3.4) jeweils so gewählt, daß die inverse kritische Temperatur wie im homogenen Fall $\beta_c \simeq 0.44069$ ist. Das Finite-Size-Scaling ist in den Abbildungen 3.6 und 3.7 dargestellt. Die Schwankungen sind hier nicht so groß wie im Fall mit drei verschiedenen Kopplungen, es wurde aber dennoch eine Skalierung durchgeführt. In beiden Fällen ist die Übereinstimmung mit dem vorgegebenen Wert sehr gut, $\beta_c \simeq 0.4408(7)$ bzw. $\beta_c \simeq 0.4409(7)$.

Eine systematische Untersuchung der kritischen Temperatur für Kopplungsstärken, die nicht exakt lösbaren Fällen entsprechen, scheint wegen der großen Anzahl der Freiheitsgrade im Rahmen dieser Arbeit nicht sinnvoll zu sein.

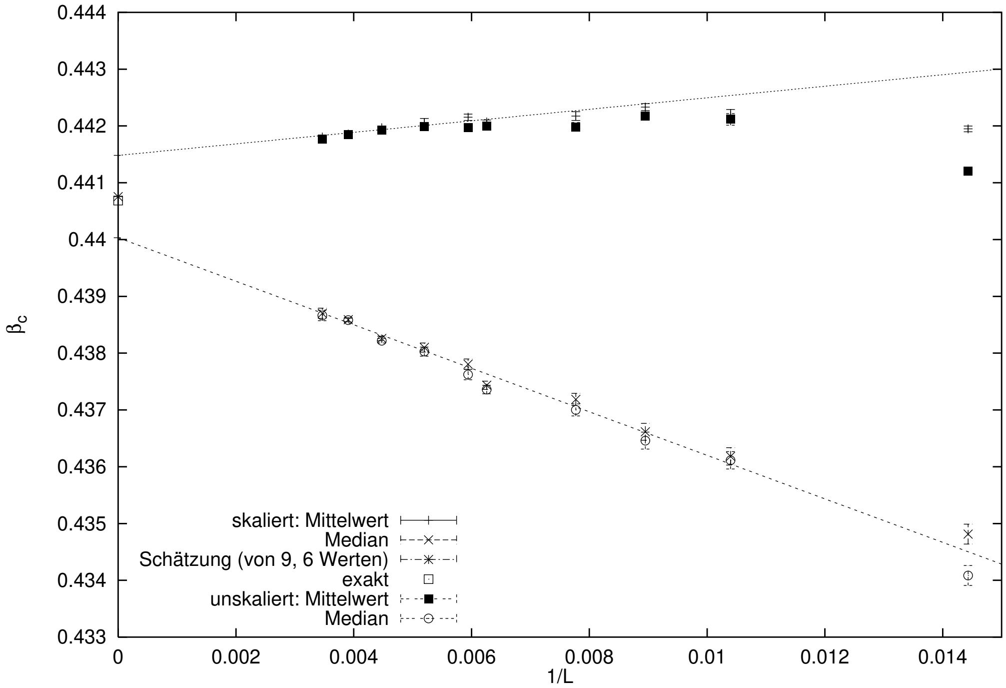


Abbildung 3.6: Finite-Size-Scaling von β_c für das Labyrinth mit acht verschiedenen Kopplungen, $\boldsymbol{J} = (1.34038, 1, 0.773081, 1.06704, 0.719495, 1, 1.26447, 0.935654)$

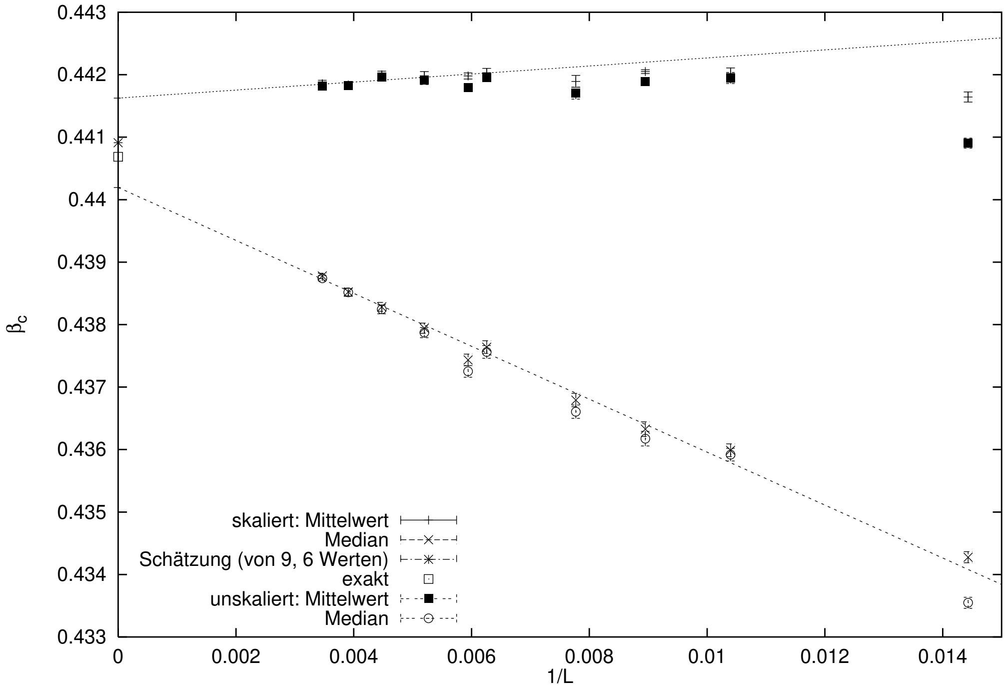


Abbildung 3.7: Finite-Size-Scaling von β_c für das Labyrinth mit acht verschiedenen Kopplungen, $\boldsymbol{J} = (1.61268, 1, 0.63693, 1.11856, 0.558767, 1, 1.47078, 0.889606)$

Zusammenfassung und Ausblick

Die Simulation von Ising-Modellen mit Monte-Carlo-Verfahren stellt eine wichtige Methode dar, um Information über (noch) nicht exakt lösbare Modelle zu gewinnen. Das erste solche Verfahren ist der 1953 von Metropolis et al. [MRRTT53] vorgestellte Algorithmus. Bei diesem Verfahren wird in jedem Schritt ein Spin des Ising-Modells mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit umgedreht. Ist man speziell an der Untersuchung des kritischen Verhaltens interessiert, so ergibt sich das Problem der kritischen Verlangsamung: der notwendige Rechenaufwand divergiert am kritischen Punkt mit der Systemgröße nach einem Potenzgesetz. Der sogenannte dynamische Exponent, der diese Divergenz beschreibt, ist beim Metropolis-Algorithmus etwa 2 und damit zu groß, um sinnvoll das kritische Verhalten zu untersuchen. Erst 1987 gelang Swendsen und Wang [SwWa87] die Konstruktion eines Algorithmus, der durch simultanes Umdrehen ganzer Gruppen von Spins, sogenannter Cluster, einen deutlich kleineren dynamischen Exponenten aufweist, in zwei Dimensionen circa 1/4. Wolff stellte zwei Jahre später [Wol89] eine abgewandelte Version dieses Algorithmus vor, deren dynamischer Exponent in drei und mehr Dimensionen noch unter dem des Swendsen-Wang-Algorithmus liegt. Aber auch bei diesen beiden Cluster-Algorithmen ist die kritische Verlangsamung weiterhin ein Problem, daß die Untersuchung des kritischen Verhaltens drastisch erschwert.

Von Machta, Chayes et al. [MCLSC95] wurde vor einigen Jahren ein Algorithmus entwickelt, der nicht nur einen nochmals kleineren dynamischen Exponenten aufweist als der Wolff-Algorithmus, sondern auch in der Lage ist, durch ein Selbst-Organisations-Verfahren die Lage des kritischen Punkts selbständig zu ermitteln. Aufgrund seiner Funktionsweise wird er Invaded-Cluster-Algorithmus genannt. Das theoretische Verständnis dieses Verfahrens steckt jedoch noch in den Anfängen, es existiert beispielsweise keine rigorose Begründung der empirischen Beobachtung, daß das kritische Verhalten richtig simuliert wird.

Diese Arbeit liefert einerseits einen Beitrag zur weiteren Untersuchung des Invaded-Cluster-Algorithmus. Andererseits wurde dieses Verfahren angewendet, um das Ising-Modell auf quasiperiodischen Parkettierungen zu simulieren und für diese Modelle bisher nicht bekannte Zahlenwerte der kritischen Temperatur zu ermitteln.

Nach der Darstellung der Grundlagen der Phasenübergänge beim Ising-Modell und seiner Simulation mit Monte-Carlo-Verfahren im ersten Kapitel folgte im zweiten Kapitel eine Untersuchung von Ising-Modellen mit identisch gewählten Kopplungsstärken auf zweidimensionalen Graphen. Zunächst wurde ein „Kochrezept“

angegeben, mit dem die Extrapolation der kritischen Temperatur in zwei Dimensionen besonders einfach ist. Dann wurden die Ergebnisse auf solchen periodischen Graphen präsentiert, auf denen die kritische Temperatur exakt bekannt ist. Die durch den Invaded-Cluster-Algorithmus gewonnenen Zahlenwerte stimmen mit den exakten Werten auf drei und mehr Nachkommastellen überein. Im Hinblick auf den vergleichsweise geringen Rechenaufwand von circa einem Tag pro betrachtetem (unendlichen) Graphen auf einem gewöhnlichen Pentium-Rechner läßt sich diese gute Übereinstimmung konkurrenzlos einfach erhalten.

Im Anschluß daran wurden zwei quasiperiodische Parkettierungen betrachtet, für die bereits numerische Werte der kritischen Temperatur vorlagen, die Penrose-Rauten-Parkettierung und die oktagonale Ammann-Beenker-Parkettierung. Am genauesten sind die kürzlich [RGS99b] aus der Betrachtung großer endlicher Ausschnitte mittels Kac-Ward-Determinanten gewonnenen Zahlenwerte, von denen die ersten fünf oder sechs Nachkommastellen korrekt sind. Die mit dem Invaded-Cluster-Algorithmus ermittelten Zahlenwerte stimmen mit diesen sogar deutlich besser überein als die aus anderen Monte-Carlo-Simulationen erhaltenen. Dies legt die Vermutung nahe, daß auch die ermittelten Werte der kritischen Temperatur auf zwei bisher in dieser Hinsicht nicht untersuchten Parkettierungen, der Tübinger Dreieck-Parkettierung und der zwölfzähligen Quadrat-Dreieck-Parkettierung, auf mindestens drei Nachkommastellen genau sind. Eine Zusammenstellung der Ergebnisse auf allen betrachteten quasiperiodischen Parkettierungen ist in Tabelle 2.3 gegeben. Eine zusätzliche Prüfung des Invaded-Cluster-Algorithmus ergibt sich durch die Tatsache, daß die kritischen Temperaturen auf zueinander dualen Graphen einer exakten Relation folgen. Diese wird von den numerischen Ergebnissen im Rahmen der Genauigkeit sehr gut erfüllt.

Eine Abhängigkeit der kritischen Temperatur von der ersten mittleren Koordinationszahl des zugrundeliegenden Graphen in dem Sinne, daß eine größere Koordinationszahl eine höhere kritische Temperatur zur Folge hat, ist in allen bekannten Fällen bestätigt. Im zweiten Kapitel dieser Arbeit wurde bei einigen Graphen mit gleicher erster mittlerer Koordinationszahl die Abhängigkeit von der zweiten mittleren Koordinationszahl untersucht. Auch hier führt eine größere Koordinationszahl zu einer höheren kritischen Temperatur, wenn auch der Effekt weniger stark ist. Es ist aber deutlich, daß keine einfache Abhängigkeit zu erwarten ist. Denn auch bei Gleichheit der ersten beiden mittleren Koordinationszahlen, aber unterschiedlichen höheren mittleren Koordinationszahlen ist eine Abweichung in der kritischen Temperatur zu beobachten, die in der Größenordnung der Änderungen liegt, die für unterschiedliche zweite mittlere Koordinationszahlen typisch sind.

Im dritten Kapitel wurde eine Modellklasse mit verschiedenen Kopplungsstärken untersucht, das Ising-Modell auf dem Labyrinth. Dazu wurde der Invaded-Cluster-Algorithmus zunächst auf diese Klasse erweitert und in bestimmten exakt lösbaren Fällen erfolgreich getestet. Dann wurde die kritische Temperatur für verschiedene Fälle bestimmt, die nicht exakt lösbar sind. Für einen Unterfall mit drei verschiedenen Kopplungstypen konnte die in [BGB94] aufgeworfene Frage genauer untersucht werden, wie die Menge der reduzierten Kopplungen, die die freie Energie invariant lassen, relativ zur Menge der kritischen reduzierten Kopplungen liegen. Die numerischen Resultate stützen unter der plausiblen Annahme einer stetigen Abhängigkeit der kritischen Temperatur die Vermutung, daß sich beide Mengen in einer Kurve schneiden und nicht nur den kritischen Punkt identischer Kopplungen gemeinsam haben.

Mit dem heuristischen Kriterium von Harris und Luck [Har74, Luc93] ist eine Möglichkeit gegeben, in vielen Fällen die Relevanz quasiperiodischer Unordnung für das universelle Verhalten zu prüfen. Das Ising-Modell zeigt auf allen hier betrachteten Parkettierungen dasselbe kritische Verhalten wie auf dem Quadratgitter im Einklang mit den Voraussagen des Kriteriums. Am Ende des zweiten Kapitels wurde mit Hilfe einer Substitutionsregel ein Beispiel konstruiert, das dem Kriterium nach relevante Unordnung enthält. Eine numerische Untersuchung ist jedoch aufgrund der starken Fluktuationen in den mittleren Koordinationszahlen aufwendiger als in den hier untersuchten Fällen und steht noch aus.

Auch bei den Labyrinthen lassen sich Fälle konstruieren, bei denen das Harris-Luck-Kriterium relevante Unordnung voraussagt. Von den lösbaren Unterfällen weiß man, daß sie kritisches Verhalten vom Onsager-Typ zeigen. Es wäre interessant zu erfahren, inwieweit sich das kritische Verhalten bei Entfernen von diesen Unterfällen verändert. Der Invaded-Cluster-Algorithmus scheint gut geeignet, um dieses Verhalten zu untersuchen.

Einen wichtigen und relativ leicht zu realisierenden nächsten Schritt stellt die Simulation des Ising-Modells auf quasiperiodischen Graphen in drei Dimensionen dar. Dazu liegen bisher nur rudimentäre numerische Untersuchungen vor [OkNi90].

Als weitere Aufgabe bleibt die Konstruktion eines effizienten Algorithmus für die Simulation von Ising-Modellen mit Feldern am kritischen Punkt. Erste Schritte in Richtung eines Invaded-Cluster-Algorithmus für solche Modelle wurden bereits unternommen [RMC98, CMR98], es fehlt jedoch noch ein funktionierender Selbst-Organisations-Mechanismus.

Diese Arbeit und die bestehenden Vorarbeiten zeigen, daß weiterentwickelte Monte-Carlo-Techniken ein großes Potential zur Untersuchung von Spin-Systemen und verwandten Modellen haben. Ein Beispiel ist der hier näher untersuchte Invaded-Cluster-Algorithmus. Im Hinblick auf die Simulation des kritischen Punkts, speziell mit Hilfe selbstorganisierender Algorithmen, besteht jedoch nach wie vor Bedarf an einem besseren theoretischen Verständnis. Die weitere Beschäftigung mit diesem Themengebiet scheint also wichtig, um die Grundlagen zu verbessern und gegebenenfalls weitere Algorithmen zu finden, die eine noch effizientere Simulation kritischer Phänomene ermöglichen, besonders auch in Gegenwart äußerer Felder.

Anhang A

Eigenschaften der SWES-Verteilung

A.1 Randverteilungen

Hier soll die in Abschnitt 1.4.5 ausgelassene Ableitung der Randverteilungen (1.15) und (1.16) der SWES-Verteilung (1.13) vorgeführt werden, zunächst für gleiche Kopplungen.

Für die Randverteilung der Spins (1.15) nutzen wir die Normiertheit der Binomialverteilung aus:

$$\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{\omega}} P(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) &= \sum_{\boldsymbol{\omega}} \frac{1}{Z'} \left(1 - e^{-2\beta J}\right)^{|\boldsymbol{\omega}|} \left(e^{-2\beta J}\right)^{|E|-|\boldsymbol{\omega}|} \Delta(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega}) \\
&= \frac{1}{Z'} \left(e^{-2\beta J}\right)^{|E|-\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})} \underbrace{\sum_{k=0}^{\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})} \binom{\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})}{k} \left(1 - e^{-2\beta J}\right)^{k} \left(e^{-2\beta J}\right)^{\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})-k}}_{=1} \\
&= \frac{1}{Z'} \exp(-2\beta J \,\mathrm{unsat}(\boldsymbol{\sigma})) \\
&= \frac{1}{Z'} \exp(-\beta \mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})) \exp(-\beta J |E|) \\
&= \frac{1}{Z} \exp(-\beta \mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})) \\
&= P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}) \qquad \text{(A.1)}
\end{aligned}$$

Dabei bezeichne $\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})$ die Anzahl der in $\boldsymbol{\sigma}$ erfüllten Bindungen, d.h. die Anzahl der gleichgerichteten nächsten Nachbarn, $\mathrm{unsat}(\boldsymbol{\sigma}) = |E| - \mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})$ entsprechend die Anzahl der nicht erfüllten Bindungen. Für das zweite Gleichheitszeichen beachten wir, daß in die Summanden der ersten Zeile nur jeweils die Anzahl $|\boldsymbol{\omega}|$ der in der entsprechenden Bindungskonfiguration $\boldsymbol{\omega}$ ausgewählten Bindungen eingeht, die wegen des Faktors $\Delta(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\omega})$ im Bereich $0 \leq |\boldsymbol{\omega}| \leq \mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})$ liegen muß. Beim vierten

Gleichheitszeichen wurde $\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma}) = -J(\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma}) - \mathrm{unsat}(\boldsymbol{\sigma})) = -J|E| + 2J\,\mathrm{unsat}(\boldsymbol{\sigma})$ benutzt.

Die Anzahl aller mit einer gegebenen Bindungskonfiguration verträglichen Spin-Konfigurationen ist gerade $2^{C(\boldsymbol{\omega})}$, wobei $C(\boldsymbol{\omega})$ die Anzahl der Cluster in $\boldsymbol{\omega}$ bezeichne. Damit ergibt sich sofort die Randverteilung der Bindungen (1.16):

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{\sigma}} P(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) &= \frac{1}{Z'} B_p(\boldsymbol{\omega}) \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) \\ &= \frac{1}{Z'} B_p(\boldsymbol{\omega}) 2^{C(\boldsymbol{\omega})} \\ &= P_{\mathrm{RC}}(\boldsymbol{\omega}) \end{aligned} \tag{A.2}$$

Bei beliebigen Kopplungsstärken J_{ij} muß statt $B_p(\boldsymbol{\omega})$ aus (1.13) die verallgemeinerte Form $B_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{\omega})$ aus (1.14) benutzt werden. (A.2) bleibt ansonsten unverändert. In (A.1) geht der ausgeklammerte Faktor in der zweiten Zeile in das Produkt von $\left(e^{-2\beta J_{ij}}\right)$ über alle nicht erfüllten Bindungen $\langle i,j\rangle$ über. Für die Summe gilt weiterhin

$$\sum_{\boldsymbol{\omega}} \Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) \prod_{\substack{\langle i,j\rangle \text{ erfüllt} \\ \text{mit } \omega_{ij}=1}} p_{ij} \prod_{\substack{\langle i,j\rangle \text{ erfüllt} \\ \text{mit } \omega_{ij}=0}} (1-p_{ij}) = 1,$$

da jede erfüllte Bindung einmal ausgewählt und einmal nicht ausgewählt auftritt. Damit gelten die weiteren Schritte analog.

A.2 Bedingte Wahrscheinlichkeiten

Hier soll die in Abschnitt 1.4.5 ausgelassene Ableitung der Gleichungen (1.17) und (1.18) gegeben werden. Ich beginne wieder mit gleichen Kopplungen. Definitionsgemäß gilt

$$P(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\sigma}) P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}) = \Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) p^{|\boldsymbol{\omega}|} (1-p)^{\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})-|\boldsymbol{\omega}|} \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})}.$$

Mit $e^{-\beta\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})} = (e^{2\beta J})^{\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})} e^{-\beta J|E|} = (1-p)^{-\,\mathrm{sat}(\boldsymbol{\sigma})} e^{-\beta J|E|}$ wird daraus

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\sigma}) P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}) &= \Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) p^{|\boldsymbol{\omega}|} (1-p)^{-|\boldsymbol{\omega}|} \frac{1}{Z} e^{-\beta J|E|} \\ &= \Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) p^{|\boldsymbol{\omega}|} (1-p)^{|E|-|\boldsymbol{\omega}|} \frac{1}{Z} e^{+\beta J|E|} \end{aligned}$$

und unter Ausnutzung der Definition von Z'

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\sigma}) P_{\mathrm{KE}}(\boldsymbol{\sigma}) &= \frac{1}{Z'} p^{|\boldsymbol{\omega}|} (1-p)^{|E|-|\boldsymbol{\omega}|} \Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) \\ &= P(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}). \end{aligned} \tag{A.3}$$

Damit ist (1.17) gezeigt. (1.18) ist sofort klar:

$$
\begin{aligned}
P(\boldsymbol{\sigma}|\boldsymbol{\omega})P_{\mathrm{RC}}(\boldsymbol{\omega}) &= \Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega})2^{-C(\boldsymbol{\omega})}\frac{1}{Z'}B_p(\boldsymbol{\omega})2^{C(\boldsymbol{\omega})} \\
&= \frac{1}{Z'}B_p(\boldsymbol{\omega})\Delta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) \\
&= P(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\omega}) \qquad \text{(A.4)}
\end{aligned}
$$

Bei beliebigen Kopplungsstärken J_{ij} muß wieder $B_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{\omega})$ aus (1.14) statt $B_p(\boldsymbol{\omega})$ aus (1.13) verwendet werden. (A.4) bleibt ansonsten unverändert. In (A.3) dagegen müssen alle Potenzen der Form p^n und $(1-p)^n$ durch die entsprechenden Produkte über p_{ij} bzw. $(1-p_{ij})$ ersetzt werden. Entsprechendes gilt für die Umformung von $e^{-\beta\mathcal{H}(\boldsymbol{\sigma})}$.

Literaturverzeichnis

[ABF87] M. Aizenman, D. J. Barsky, R. Fernández, *The Phase Transition in a General Class of Ising-Type Models is Sharp*, J. Stat. Phys. **47** (1987), 343–374.

[AiWe89] M. Aizenman, J. Wehr, *Rounding of First-Order Phase Transitions in Systems with Quenched Disorder*, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 2503–2506.

[AGS92] R. Ammann, B. Grünbaum, G. Shephard, *Aperiodic Tiles*, Discrete Comput. Geom. **8** (1992), 1–25.

[BaGa99] E. Baake, W. Gabriel, *Biological evolution through mutation, selection and drift: An introductory review*, Ann. Rev. Comp. Phys. **7** (1999), im Druck.

[BGB94] M. Baake, U. Grimm, R. J. Baxter, *A Critical Ising Model on the Labyrinth*, Int. J. Mod. Phys. **B 8** (1994), 3579–3600.

[BGRJ98] M. Baake, U. Grimm, P. Repetowicz, D. Joseph, *Coordination Sequences and Critical Points*, in:
S. Takeuchi, T. Fujiwara (Hrsg.), *Proc. 6th Int. Conf. Quasicrystals*, World Scientific, Singapore (1998), 124–127.

[BJK93] M. Baake, D. Joseph, P. Kramer, *Transitions between quasiperiodic and periodic phases by one-parameter Schur rotations*, in:
M. J. Yacamán, M. Torres (Hrsg.), *Crystal-Quasicrystal Transitions*, Elsevier, Amsterdam (1993), 173–191.

[BKS92] M. Baake, R. Klitzing, M. Schlottmann, *Fractally shaped acceptance domains of quasiperiodic square-triangle tilings with dodecagonal symmetry*, Physica **A 191** (1992), 554–558.

[BKSZ90] M. Baake, P. Kramer, M. Schlottmann, D. Zeidler, *Planar patterns with fivefold symmetry as sections of periodic structures in 4-space*, Int. J. Mod. Phys. **B 4** (1990), 2217–2268.

[BGP95] M. Baake, U. Grimm, C. Pisani, *Partition function zeros for aperiodic systems*, J. Stat. Phys. **78** (1995), 285–297.

[Bar83] M. N. Barber, *Finite-size Scaling*, in:
C. Domb, J. L. Lebowitz (Hrsg.), *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Band 8, Academic Press, London (1983), 146–266.

[BaNe99] G. T. Barkema, M. E. J. Newman, *New Monte Carlo algorithms for classical spin systems*, Preprint: cond-mat/9703179, in:
D. Ferguson, J. I. Siepmann, D. G. Truhlar (Hrsg.), *Monte Carlo Methods in Chemical Physics*, Wiley, New York (1999), 483–517.

[BDJZ81] R. Bausch, V. Dohm, H. K. Janssen, R. K. P. Zia, *Critical Dynamics of an Interface in $1+\epsilon$ Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **47** (1981), 1837–1840.

[Bax82] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Physics*, Academic Press, London (1982).

[Bee82] F. P. M. Beenker, *Algebraic theory of non-periodic tilings of the plane by two simple building blocks: a square and a rhombus*, Techn. Univ. Eindhoven, TH-report 82-WSK-04 (1982).

[BDFN92] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1992).

[BAS77] R. J. Birgenau, J. Als-Nielsen, G. Shirane, *Critical behavior of pure and site-random two-dimensional antiferromagnets*, Phys. Rev. **B 16** (1977), 280–292.

[BSSG92] U. Bismayer, W. Schmahl, C. Schmidt, L. A. Groat, *Linear Birefringence and X-Ray Diffraction Studies of the Structural Phase Transition in Titanite, $CaTiSiO_5$*, Phys. Chem. Min. **19** (1992), 260–266.

[Bra92] S. Brandt, *Datenanalyse*, 3. Aufl., BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim (1992).

[Car96] J. Cardy, *Scaling Theory and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (1996).

[CMR98] L. Chayes, J. Machta, O. Redner, *Graphical Representations for Ising Systems in External Fields*, J. Stat. Phys. **93** (1998), 17–32.

[CMTC99] Y. S. Choi, J. Machta, P. Tamayo, L. X. Chayes, *Parallel Invaded Cluster Algorithm for the Ising Model*, Int. J. Mod. Phys. **C 10** (1999), 1–16.

[CoBa92] P. D. Coddington, C. F. Baillie, *Empirical Relations between Static and Dynamic Exponents for Ising Model Cluster Algorithms*, Phys. Rev. Lett. **68** (1992), 962–965.

[DuAu94] M. Duneau, M. Audier, *Approximant phases of quasicrystals*, in: F. Hippert, D. Gratias (Hrsg.), *Lectures on quasicrystals*, Les Editions de Physique, Les Ulis (1994), 283–333.

[EdSo88] R. G. Edwards, A. D. Sokal, *Generalization of the Fortuin-Kasteleyn-Swendsen-Wang representation and Monte Carlo algorithm*, Phys. Rev. **D 38** (1988), 2009–2012.

[Ein87] T. Einstein, *Critical Properties of Adsorbed Atoms and Crystal Surfaces*, in:
K. Dietz, V. Rittenberg (Hrsg.), *Infinite Lie Algebras and Conformal Invariance in Condensed Matter and Particle Physics*, World Scientific, Singapore (1987), 17–50.

[Fel68] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*, Band 1, 3. Aufl., Wiley, New York (1968).

[FeLa91] A. M. Ferrenberg, D. P. Landau, *Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resulution Monte Carlo study*, Phys. Rev. **B 44** (1991), 5081–5091.

[FLW92] A. M. Ferrenberg, D. P. Landau, Y. J. Wong, *Monte Carlo Simulations: Hidden Errors from "Good" Random Number Generators*, Phys. Rev. Lett. **69** (1992), 3382–3384.

[Fis65] M. Fisher, *The Nature of Critical Points*, in:
W. Brittin (Hrsg.), *Lectures in Theoretical Physics, Vol. VII c: Statistical Physics, Weak Interactions, Field Theory*, University of Colorado Press, Boulder (1965), 1.

[FoKa72] C. M. Fortuin, P. W. Kasteleyn, *On the random-cluster model*, Physica **57** (1972), 536–564.

[Geo88] H.-O. Georgii, *Gibbs Measures and Phase Transitions*, de Gruyter, Berlin (1988).

[Gri64] R. B. Griffiths, *Peierls' proof of spontaneous magnetization in a two-dimensional Ising ferromagnet*, Phys. Rev. **136 A** (1964), 437–439.

[Gri99] G. Grimmett, *Percolation*, 2. Aufl., Springer, Berlin (1999).

[GrSh87] B. Grünbaum, G. C. Shephard, *Tilings and patterns*, Freeman, New York (1987).

[GrSh89] B. Grünbaum, G. C. Shephard, *Tilings and patterns: an introduction*, Freeman, New York (1989).

[GuEn96] A. J. Guttmann, I. G. Enting, *Solvability of Some Statistical Mechanical Systems*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996), 344–347.

[Har74] A. Harris, *Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models*, J. Phys. **C 7** (1974), 1671–1692.

[Her99] J. Hermisson, *Aperiodische Ordnung und magnetische Phasenübergänge*, Dissertation, Universität Tübingen (1999).

[HRB97] J. Hermisson, C. Richard, M. Baake, *A Guide to the Symmetry Structure of Quasiperiodic Tiling Classes*, J. Phys. I France **7** (1997), 1003–1018.

[IkHi74] H. Ikeda, K. Hirakawa, *Neutron scattering study of two-dimensional Ising nature of K_2CoF_4*, Solid State Commun. **14** (1974), 529–532.

[Isi25] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Physik **31** (1925), 253–258.

[KaFo69] P. W. Kasteleyn, C. M. Fortuin, *Phase transitions in lattice systems with random local properties*, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26s** (1969), 11–14.

[Kel98] G. Keller, *Equilibrium States in Ergodic Theory*, Cambridge University Press, Cambridge (1998).

[KBJ93] P. Kramer, M. Baake, D. Joseph, *Schur rotations, transitions between quasiperiodic and periodic phases, and rational approximants*, J. Non-Cryst. Solids **153&154** (1993), 650–653.

[KrWa41] H. A. Kramers, G. H. Wannier, *Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I*, Phys. Rev. **60** (1941), 252–262.

[LLT95] D. Ledue, D. P. Landau, J. Teillet, *Static critical behavior of the ferromagnetic Ising model on the quasiperiodic octagonal tiling*, Phys. Rev. **B 51** (1995), 15523–15530.

[LeYa52] T. Lee, C. Yang, *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model*, Phys. Rev. **87** (1952), 410–419.

[Len20] W. Lenz, *Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern*, Phys. Z. **21** (1920), 613–615.

[LiSo89] X.-J. Li, A. D. Sokal, *Rigorous Lower Bound on the Dynamic Critical Exponents of the Swendsen-Wang Algorithm*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989), 827–830.

[Luc93] J. M. Luck, *A classification of critical phenomena on quasi-crystals and other aperiodic structures*, Europhys. Lett. **24** (1993), 359–364.

[Luc95] A. Lucke, *Invaded cluster algorithm: a self-organized algorithm for equilibrium phase transitions and its implementation on Potts models*, Master's Thesis, University of Massachusetts, Amherst (1995).

[Mac98] J. Machta, private Mitteilung (1998).

[MCLSC95] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer, L. M. Chayes, *Invaded cluster algorithm for equilibrium critical points*, Phys. Rev. Lett. **75** (1995), 2792–2795.

[MCLSC96] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer, L. M. Chayes, *Invaded cluster algorithm for Potts models*, Phys. Rev. **E 54** (1996), 1332–1345.

[MRRTT53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys. **21** (1953), 1087–1092.

[MMC99] K. Moriarty, J. Machta, L. Y. Chayes, *Dynamic and Static Properties of the Invaded Cluster Algorithm*, Phys. Rev. **E 59** (1999), 1425–1434.

[NaSc92] K. Nagel, M. Schreckenberg, *A cellular automaton for freeway traffic*, J. Phys. I France **2** (1992), 2221–2229.

[Nat97] T. Nattermann, *Theory of the Random Field Ising Model*, Preprint: cond-mat/9705295, in:
A. P. Young (Hrsg.), *Spin Glasses and Random Fields*, World Scientific, Singapore (1997).

[NeBa96] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, *Monte Carlo study of the random-field Ising model*, Phys. Rev. **E 53** (1996), 393–404.

[NiBl96] M. P. Nightingale, H. W. J. Blöte, *Dynamic Exponent of the Two-Dimensional Ising Model and Monte Carlo Computation of the Subdominant Eigenvalue of the Stochastic Matrix*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996), 4548–4551.

[OkNi88] Y. Okabe, K. Niizeki, *Monte Carlo simulation of the Ising model on the Penrose lattice*, J. Phys. Soc. Jap. **57** (1988), 16–19.

[OkNi90] Y. Okabe, K. Niizeki, *Ising model on an icosahedral quasilattice*, J. Phys. **A 23** (1990), L733–L738.

[Ons44] L. Onsager, *Crystal statistics, I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*, Phys. Rev. **65** (1944), 117–149.

[Pat77] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, korr. Nachdruck, Pergamon Press, Oxford (1977).

[Pei36] R. Peierls, *On Ising's Model of Ferromagnetism*, Proc. Cambr. Phil. Soc. **32** (1936), 477–481.

[Pen74] R. Penrose, *The rôle of aesthetics in pure and applied mathematical research*, Bull. Int. Math. Appl. **10** (1974), 266–271.

[Pet83] K. Petersen, *Ergodic Theory*, Cambridge University Press, Cambridge (1983).

[RTK89] T. S. Ray, P. Tamayo, W. Klein, *Mean-field study of the Swendsen-Wang dynamics*, Phys. Rev. **A 39** (1989), 5949–5953.

[RMC98] O. Redner, J. Machta, L. Chayes, *Graphical representations and cluster algorithms for critical points with fields*, Phys. Rev. **E 58** (1998), 2749–2752.

[RGS99a] P. Repetowicz, U. Grimm, M. Schreiber, *High-temperature expansion for Ising models on quasiperiodic tilings*, J. Phys. **A 32** (1999), 4397–4418.

[RGS99b] P. Repetowicz, U. Grimm, M. Schreiber, *Planar quasiperiodic Ising models*, Preprint: cond-mat/9908088, Mat. Sci. Eng. **A** (1999), in Vorbereitung.

[SaSo97] J. Salas, A. D. Sokal, *Dynamic Critical Behavior of the Swendsen-Wang Algorithm: The Two-Dimensional 3-State Potts Model Revisited*, J. Stat. Phys. **87** (1997), 1–36.

[Sed95] R. Sedgewick, *Algorithmen*, 2. korr. Nachdruck, Addison-Wesley, Bonn (1995).

[SBGC84] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. Cahn, *Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry*, Phys. Rev. Lett. **53** (1984), 1951–1953.

[Sim93] B. Simon, *The Statistical Mechanics of Lattice Gases*, Band I, Princeton University Press, Princeton (1993).

[Sim97] H. Simon, *Ferromagnetische Spinsysteme auf aperiodischen Strukturen*, Dissertations Druck, Darmstadt (1997).

[SiBa97] H. Simon, M. Baake, *Lee-Yang zeros in the scaling region of a two-dimensional quasiperiodic Ising model*, J. Phys. **A 30** (1997), 5319–5327.

[SBG95] H. Simon, M. Baake, U. Grimm, *Lee-Yang zeros for substitutional systems*, in:
C. Janot, R. Mosseri (Hrsg.), *Proc. 5th Int. Conf. Quasicrystals*, World Scientific, Singapore (1995), 100–103.

[SMS89] C. Sire, R. Mosseri, J.-F. Sadoc, *Geometric study of a 2D tiling related to the octagonal quasiperiodic tiling*, J. Phys. France **50** (1989), 3463–3476.

[SJR91] E. S. Sørensen, M. V. Jarić, M. Ronchetti, *Ising model on Penrose lattices: Boundary conditions*, Phys. Rev. **B 44** (1991), 9271–9282.

[StAh95] D. Stauffer, A. Aharony, *Perkolationstheorie: eine Einführung*, VCH, Weinheim (1995).

[SwWa87] R. H. Swendsen, J.-S. Wang, *Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 86–88.

[Syo72] I. Syozi, *Transformation of Ising Models*, in:
C. Domb, M. S. Green (Hrsg.), *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Band 1, Academic Press, London (1972), 269–329.

[TBK90] P. Tamayo, R. C. Brower, W. Klein, *Single-Cluster Monte Carlo Dynamics for the Ising Model*, J. Stat. Phys. **58** (1990), 1083–1094.

[Tho72] C. J. Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*, Princeton University Press, Princeton (1972).

[Tho88] C. J. Thompson, *Classical Equilibrium Statistical Mechanics*, Clarendon Press, Oxford (1988).

[Vol91] L. Volkmann, *Graphen und Digraphen*, Springer, Wien (1991).

[WNS92] S. O. Warnaar, B. Nienhuis, K. A. Seaton, *New Construction of Solvable Lattice Models Including an Ising Model in a Field*, Phys. Rev. Lett. **69** (1992), 710–712.

[Wol89] U. Wolff, *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 361–364.

[YaLe52] C. Yang, T. Lee, *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation*, Phys. Rev. **87** (1952), 404–409.

[ZSBUWS95] M. Zhang, E. K. H. Salje, U. Bismayer, H.-G. Unruh, B. Wruck, C. Schmidt, *Phase Transition(s) in Titanite $CaTiSiO_5$: An Infrared Spectroscopic, Dielectric Response and Heat Capacity Study*, Phys. Chem. Min. **22** (1995), 41–49.

Mein spezieller Dank gilt Jonathan Machta, der mich während meines Aufenthalts in Amherst in den Invaded-Cluster-Algorithmus eingeführt hat und mir danach per E-Mail für viele Diskussionen zur Verfügung stand.

Besonders danke ich auch Michael Baake für eine Betreuung, die keine Wünsche übrig ließ. Christoph Richard möchte ich für die geduldige Durchsicht dieser Arbeit und zahlreiche Anregungen sehr danken. Joachim Hermisson danke ich für viele gewinnbringende Diskussionen. Für die angenehme Arbeitsatmosphäre bedanke ich mich bei Moritz Höffe und den drei Letztgenannten.

Weiterhin möchte ich Uwe Grimm für Diskussionen und die Überlassung seiner Programme danken. Auch Franz Gähler und Przemysław Repetowicz danke ich für das Zurverfügungstellen ihrer Programme.