

Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main
Fachbereich Physik
Institut für Theoretische Physik

Bachelorarbeit

Phasenübergänge und kritisches Verhalten dreidimensionaler Potts-Modelle

Andreas Bäuerle

Vorgelegt am: 11. Dezember 2015

Erstgutachter: Prof. Dr. Owe Philipsen
Zweitgutachter: Prof. Dr. Marc Wagner

Zusammenfassung

Es wird ein Cluster-Algorithmus vorgestellt mit dem in einer Monte-Carlo Simulation dreidimensionale Potts-Modelle mit effektiv nichtganzzahliger Anzahl an Spinzuständen q simuliert werden können. Durch die Untersuchung des Skalenverhaltens der magnetischen Suszeptibilität χ wird der kritische Wert $2 < q < 3$ abgeschätzt, bei dem der Phasenübergang des entsprechenden Modells von zweiter Ordnung zu erster Ordnung wechselt.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Physikalische Grundlagen	3
2.1. Phasenübergänge	3
2.2. Kritische Phänomene	5
2.3. Skalenverhalten von Systemen endlicher Ausdehnung	8
2.3.1. Phasenübergänge zweiter Ordnung	9
2.3.2. Phasenübergänge erster Ordnung	11
3. Das Potts-Modell	13
3.1. Definition	13
3.2. Allgemeine Eigenschaften	15
3.3. Phasenübergänge im Standard Potts-Modell	17
3.4. Zustandssumme nach Fortuin und Kasteleyn	19
4. Simulation des Modells am Computer	23
4.1. Die Monte-Carlo Methode	23
4.2. Importance Sampling	24
4.3. Algorithmen	26
4.3.1. Metropolis-Algorithmus	26
4.3.2. Algorithmus von Swendsen und Wang	28
4.3.3. Algorithmus von Barkema und de Boer	31
4.4. Beschreibung des Programms	33
4.4.1. Thermalisierung	34
4.4.2. Nachbarschaftsrelationen	35
4.4.3. Spinvektoren	36
4.5. Fehleranalyse	38
4.5.1. Autokorrelationszeit	38
4.5.2. Jackknife, Binggröße	39

Inhaltsverzeichnis

5. Auswertung	41
5.1. Dynamik des Modells in zwei Dimensionen	41
5.2. Bestimmung des trikritischen Punktes in drei Dimensionen	43
6. Einordnung der Arbeit und Ausblick	51
6.1. Zusammenfassung und Einordnung der Ergebnisse	51
6.2. Algorithmus von Wolff	52
6.3. Zusammenhang mit Gitter-QCD	54
6.4. Weiterführende Arbeiten	57
A. Anhang: Mathematische Grundlagen	59
A.1. Graphentheorie	59
A.2. Grundlagen der Wahrscheinlichkeitstheorie	60
A.3. Mathematische Statistik	63
A.4. Die Jackknife-Methode	67
A.5. Markov-Ketten	69
Literatur	74

Abbildungsverzeichnis

2.1. Übersicht über die Ordnung des Phasenübergangs in dem Modell für Trikritikalität [Hua87, S. 430].	9
3.1. Spinvektoren als symmetrische Achsen eines $(q-1)$ -dimensionalen Hyper-tetraeders für $q = 2$ (links), $q = 3$ (mitte) und $q = 4$ (rechts).	16
3.2. Ordnung des Phasenübergangs in Abhängigkeit von der Dimension d und der Zahl der Zustände q [Wu82, S. 239]. Der Phasenübergang ist zweiter Ordnung unterhalb der Kurve und erster Ordnung darüber.	18
4.1. Absolutbetrag der Magnetisierung $\ s\ $ im Verlauf der Simulation für ein Gitter mit 32^2 Punkten.	35
4.2. Jackknife-Fehler für den SW-Algorithmus (links) mit $n_m = 10.000$ und den Metropolis-Algorithmus (rechts) mit $n_m = 1.000.000$	40
5.1. Lineare Regression von $\langle E \rangle_{RG}$ für $q' = 3.6$ (oben links) und kritische Temperatur in zwei Dimensionen für $q = 4$ (oben rechts). Beispiel für Renormierung eines 4^2 -Gitters mit $q = 3$ (unten), links die Konfiguration σ und rechts die renormierte Konfiguration $\sigma^{(1)}$	42
5.2. Absolutbetrag der Magnetisierung $\ s\ $ für verschiedene Gittergrößen . . .	44
5.3. Binder Kumulante B_4 (oben), modifizierte Suszeptibilität χ' (mitte) und Fit der Maxima $\chi'_L(T_C)$ (unten) für $(q, q') = (2, 2)$ und $(q, q') = (3, 3)$. . .	46
5.4. Modifizierte Suszeptibilität χ' und Fit der Maxima $\chi'_L(T_C)$ (oben) und echte Suszeptibilität χ (mit L^b reskaliert) und Fit der kritischen Werte $\chi(T_C)$ (unten) für $(q, q') = (3, 2)$	48
5.5. Skalenexponent b in Abhängigkeit von q' (links) und kritische Temperatur für $2 \leq q' \leq 3$ (rechts).	49
6.1. T_C ermittelt mit Wolff-Algorithmus (oben links), Wahrscheinlichkeit des letzten Spinzustands (oben rechts) und mittlere Clustergröße (unten). . .	53

1. Einleitung

Potts-Modelle in d Dimensionen mit q Spinzuständen besitzen dieselbe globale Symmetrie wie $SU(q)$ -Gittereichtheorien in $d + 1$ Dimensionen, somit liegen diese Modelle häufig in derselben Universalitätsklasse. Insbesondere das dreidimensionale Potts-Modell mit drei Spinzuständen und externem Magnetfeld ist für die Untersuchung der Gitter-Quantenchromodynamik mit schweren Quarks bei endlicher Temperatur von Interesse, da beide Modelle dasselbe kritische Verhalten aufweisen. Es gibt jedoch auch Beispiele für Potts-Modelle und Gittereichtheorien, die nicht dasselbe kritische Verhalten aufweisen, obwohl Dimension und globale Symmetrie übereinstimmen.

Der Phasenübergang des dreidimensionalen Potts-Modells mit drei Zuständen (ohne externes Feld) ist, wie auch der Übergang in der QCD mit unendlich schweren Quarks, erster Ordnung, jedoch besitzt das Potts-Modell mit zwei Spinzuständen einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Wird die Anzahl der Spinzustände q als kontinuierlicher Parameter angesehen, so gibt es ein $q_C \in (2, 3)$, für welches das entsprechende Modell trikritisches Verhalten aufweisen sollte. Es stellt sich die Frage, wie weit das Potts-Modell mit $q = 3$ von diesem trikritischen Punkt entfernt liegt. Befindet es sich nämlich in der Nähe dieses Punktes, so wird das Verhalten am Phasenübergang durch den trikritischen Punkt beeinflusst, der Übergang wäre also nur schwach erster Ordnung.

In der vorliegenden Arbeit werden dreidimensionale Potts-Modelle mit Hilfe eines Cluster-Algorithmus simuliert, der effektiv nichtganzzahlige Werte von q realisiert. Durch die Untersuchung des Skalenverhaltens der magnetischen Suszeptibilität wird der kritische Wert q_C der dreidimensionalen Potts-Modelle abgeschätzt. Die Arbeit ist wie folgt strukturiert:

Kapitel 2 bietet eine Einführung in die Theorie der Phasenübergänge und das Skalenverhalten endlich großer Systeme. Anschließend wird in Kapitel 3 die Klasse der Potts-Modelle vorgestellt und grundlegende Eigenschaften sowie Phasenübergänge und kritisches Verhalten der Modelle diskutiert. Kapitel 4 beschäftigt sich mit der Simulation der Modelle am Computer. Dort wird zunächst der Begriff der Monte-Carlo Methode erklärt, bevor dann verschiedene Algorithmen vorgestellt werden, mit denen die Dynamik des Modells simuliert werden kann. In Abschnitt 4.3 wird erklärt, wie Potts-Modelle mit

1. Einleitung

einer nichtganzzahligen Anzahl an Spinzuständen in der Simulation realisiert werden. In Kapitel 5 werden die Ergebnisse der Simulation ausgewertet. Kapitel 6 beschäftigt sich mit der Einordnung der Ergebnisse in bereits bekannte Resultate und bietet einen Ausblick, wie auf die Ergebnisse dieser Arbeit aufgebaut werden kann. Auch wird in diesem Kapitel der Zusammenhang zwischen dem dreidimensionalen Potts-Modell mit drei Spinzuständen und der Quantenchromodynamik auf dem Gitter genauer untersucht. Im Anhang A sind Grundlagen aus der Mathematik zusammengetragen, die für diese Arbeit relevant sind aber über den Inhalt der Pflichtveranstaltungen des Physik-Grundstudiums hinausgehen.

2. Physikalische Grundlagen

In diesem Kapitel werden einige Aspekte über Phasenübergänge und kritisches Verhalten zusammengetragen, die für die spätere Untersuchung der Potts-Modelle relevant sind. Abschnitt 2.1 bietet eine Einführung in den Begriff der Phasenübergänge, die Grundlagen der Thermodynamik und statistischen Mechanik werden hierbei als bekannt vorausgesetzt und können z.B. in [Hua87] nachgelesen werden. Abschnitt 2.2 stellt die kritischen Phänomene vor, die bei Phasenübergängen zweiter Ordnung auftreten können. Auch werden dort die zentralen Konzepte der Universalitätsklassen und der kritischen Exponenten vorgestellt. Da Phasenübergänge nur im thermodynamischen Limes auftreten, wird in Abschnitt 2.3 das Verhalten von endlich großen physikalischen Systemen untersucht. Dieses Kapitel richtet sich inhaltlich und strukturell nach [Hua87], [LL80] und [LB14].

2.1. Phasenübergänge

Reale thermodynamische Systeme können in verschiedenen Aggregatzuständen auftreten. Die unterschiedlichen makroskopischen Erscheinungsformen eines thermodynamischen Systems werden *Phasen* genannt, der Wechsel von einer Phase in eine andere heißt *Phasenübergang*. Ein Phasenübergang ist charakterisiert durch eine qualitative Änderung der makroskopischen Eigenschaften des Systems. Außer den offensichtlichen Erscheinungsformen eines Systems wie fest, flüssig und gasförmig gibt es noch weitere, wie z.B. die spontane Magnetisierung eines ferromagnetischen Systems oder den Übergang zwischen Graphit und Diamant, welche zurückzuführen sind auf innere Symmetrien des Systems.

Am Punkt des Übergangs können zwei Phasen koexistieren, es stellt sich ein Gleichgewicht der beiden Phasen ein. Der Zustand eines abgeschlossenen thermodynamischen Systems im Gleichgewicht lässt sich durch Angabe von drei thermodynamischen Größen, z.B. (S, V, N) , vollständig beschreiben. Die gesamte Teilchenzahl der beiden koexistierenden Phasen sei konstant, die beiden Untersysteme können aber Teilchen austauschen. Dann ist die notwendige Bedingung des Phasengleichgewichts, dass $T_1 = T_2$, $p_1 = p_2$

2. Physikalische Grundlagen

und $\mu_1 = \mu_2$. Das chemische Potential kann also als Funktion der Temperatur und des Drucks geschrieben werden. Die Bedingung für Phasenkoexistenz lautet somit

$$\mu_1(T, p) = \mu_2(T, p).$$

Diese Gleichung definiert eine Kurve in der (p, T) -Ebene, die sogenannte *Koexistenzkurve*. Sie trennt die Bereiche in denen jeweils nur eine der beiden Phasen vorliegt.

Die Koexistenzkurve kann an einem Punkt enden. Dieser wird *kritischer Punkt* genannt, die zugehörigen Werte für T und p heißen *kritische Temperatur*, bzw. *kritischer Druck*. Oberhalb dieses kritischen Punktes gibt es keinen qualitativen Unterschied mehr zwischen den beiden Phasen. Der kritische Punkt ist dadurch charakterisiert, dass im Gegensatz zu einem gewöhnlichen Koexistenzpunkt Singularitäten in thermodynamischen Funktionen auftreten.

Phasenübergänge sind durch Nichtanalytizitäten in den thermodynamischen Potentialen charakterisiert. Da ein thermodynamisches System aber durch das großkanonische Ensemble beschrieben wird und die entsprechende Zustandssumme für endliche Teilchenzahlen und Volumina ein Polynom in der *Fugazität* $z = e^{\mu/T}$ und damit eine analytische Funktion ist, können solche Nichtanalytizitäten nur im thermodynamischen Limes auftreten. Es sei also ein thermodynamisches System gegeben, das auf ein endliches Volumen V beschränkt sei. Aufgrund dieser Einschränkung ist die Teilchenzahl nach oben beschränkt, setze also $N_{max} = M$. Die großkanonische Zustandssumme lautet

$$Z_{gk}(\mu, V, T) = \sum_{N \leq M} Z_k(N, V, T) z^N.$$

Der Koeffizient $Z_k(N, V, T)$ ist die kanonische Zustandssumme des Systems mit fester Teilchenzahl N und somit positiv, physikalisch sinnvolle Zustände sind auf den Bereich $z > 0$ beschränkt. Nach dem Fundamentalsatz der Algebra besitzt das Polynom Z_{gk} aber M Nullstellen z_i , $i = 1, \dots, M$. Für diese muss also gelten $z_i \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_{>0}$. Lee und Yang haben bewiesen, dass ein gegebenes System einen Phasenübergang besitzt, wenn komplexe Nullstellen der großkanonischen Zustandssumme Z_{gk} im thermodynamischen Limes auf der positiven reellen Achse liegen: Sie haben gezeigt, dass die Grenzfunktion

$$f_\infty(z) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln Z_{gk}(z, V)$$

für alle $z > 0$ existiert, stetig ist und in allen Teilintervallen $[x, y] \subset \mathbb{R}_{>0}$, in denen keine Nullstelle von Z_{gk} liegt, analytisch ist (vgl. [Hua87, S. 208]).

Liegt also im thermodynamischen Limes eine Nullstelle z_0 von Z_{gk} auf der positiven reellen Achse, so zerfällt diese in zwei Regionen G_1 und G_2 , in denen jeweils das thermodynamische Potential f_∞ analytisch ist. Diese Regionen beschreiben die verschiedenen Phasen des Systems. f_∞ ist an dem Übergang von G_1 nach G_2 stetig aber nicht analytisch, also ist eine ihrer Ableitungen nach den thermodynamischen Größen unstetig in z_0 . Der Phasenübergang heißt *erster Ordnung*, falls eine der ersten partiellen Ableitungen des thermodynamischen Potentials eine Unstetigkeit in z_0 aufweist, ansonsten heißt er *zweiter Ordnung*.

Die verschiedenen Phasen werden durch einen *Ordnungsparameter* charakterisiert. Dies ist eine thermodynamische Observable, welche in der einen Phase exakt Null ist und in der anderen Phase von Null verschieden. Bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung ist der Ordnungsparameter am Phasenübergang stetig, bei einem Phasenübergang erster Ordnung weist dieser dort eine Unstetigkeit auf.

2.2. Kritische Phänomene

Kritische Phänomene beschreiben das Verhalten thermodynamischer Observablen in der Umgebung eines kritischen Punktes, d.h. dem Ende einer Koexistenzkurve von Phasenübergängen erster Ordnung. An diesem Punkt liegen Singularitäten in thermodynamischen Funktionen vor. Diese können zerlegt werden in einen divergenten (singulären) Anteil und einen (möglicherweise unstetigen) endlichen Anteil. Sei $t = \frac{T-T_C}{T}$ die relative Temperatur, dann divergieren die singulären Anteile der Thermodynamischen Funktionen gemäß Potenzgesetzen in t . Die entsprechenden Potenzen werden *kritische Exponenten* genannt und mit griechischen Buchstaben α, β, γ etc. bezeichnet. Beispielsweise gilt für ein magnetisches System (vgl. [Hua87, S. 396], [Bax89, S. 19]):

$$\text{Spezifische Wärme: } C \sim |t|^{-\alpha} \quad (2.1)$$

$$\text{Ordnungsparameter: } M \sim |t|^\beta \quad (2.2)$$

$$\text{Suszeptibilität: } \chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (2.3)$$

$$\text{Korrelationsfunktion: } G(r) \sim r^{-d+2-\eta} \quad (2.4)$$

$$\text{Korrelationslänge: } \xi \sim |t|^{-\nu} \quad (2.5)$$

$$\text{Zustandsgleichung: } M \sim H^{1/\delta} \quad (2.6)$$

Die ersten fünf Zeilen gelten für den Fall, dass $H = 0$, in der letzten Zeile ist $H \neq 0$ und $t = 0$. Diese Beziehungen implizieren, dass das Verhalten der Größen dasselbe ist,

2. Physikalische Grundlagen

unabhängig davon, ob man sich von unten oder oben der kritischen Temperatur nähert. Ausgenommen davon ist der Ordnungsparameter, da dieser oberhalb von T_C identisch Null ist.

Die *Korrelationsfunktion* G und die *Korrelationslänge* ξ aus Gl. 2.4 und 2.5 wurden seither nicht definiert, dies möchte ich nun nachholen (vgl. [Hua87, S. 395], [Bax89, S. 18]). Es sei ein thermodynamisches System mit Ordnungsparameter M gegeben und es existiere eine Dichte m , sodass

$$M = \left\langle \int_{\mathbb{R}^3} m(r) dr \right\rangle.$$

Dann ist die *räumliche Korrelationsfunktion* G definiert als Kovarianz der Ordnungsparmeterdichte zu verschiedenen Orten bezüglich der Ensemble-Verteilung

$$G(r) = \langle m(R+r)m(R) \rangle - \langle m(R+r) \rangle \langle m(R) \rangle. \quad (2.7)$$

Sie ist also ein Maß dafür, wie stark die Zufallsvariablen $m(R)$ und $m(R+r)$ korreliert sind. Für $T > T_C$ ist $\langle m(r) \rangle = 0$ und die Korrelationsfunktion vereinfacht sich zu

$$G(r) = \langle m(R+r)m(R) \rangle.$$

Abseits des kritischen Punktes nimmt die Korrelation exponentiell ab $G(r) \sim e^{-r/\xi}$. Die Größe ξ , die hier im Exponenten auftaucht ist die Korrelationslänge. Als Faustregel kann man sagen, dass die Zufallsvariablen $m(r_1)$ und $m(r_2)$ unkorreliert sind, wenn die Orte r_1 und r_2 mindestens die Korrelationslänge ξ voneinander entfernt sind. Am kritischen Punkt selbst existiert die Korrelationsfunktion, ihr asymptotisches Verhalten ist nun aber durch Gl. 2.4 gegeben, wobei d die Dimension des Systems bezeichnet. Wie an Gl. 2.5 zu sehen ist, divergiert die Korrelationslänge am kritischen Punkt, dies führt zu dem Phänomen des *Critical slowing down*, welches die Simulation von Phasenübergängen erschwert und in Abschnitt 4.5.1 ausführlicher diskutiert wird.

Die kritischen Exponenten erfüllen folgende Gleichungen (vgl. [Hua87, S. 397]):

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 \\ \gamma &= \beta(\delta - 1) \\ \gamma &= \nu(2 - \eta) \\ \nu d &= 2 - \alpha, \end{aligned}$$

dabei bezeichnet d die Dimension des Systems. Folglich können nur zwei der sechs Exponenten frei gewählt werden, alle weiteren sind durch diese Gleichungen festgelegt.

Die kritischen Exponenten sind aufgrund ihrer Universalität besonders wichtig. Augenscheinlich komplett verschiedene Systeme können dasselbe kritische Verhalten aufweisen, d.h. die kritischen Exponenten haben dieselben Werte. Der Grund dafür ist, dass das Verhalten eines Systems in der Umgebung eines kritischen Punktes nicht mehr von den Details der Wechselwirkung abhängt, sondern maßgeblich von der Symmetrie des Ordnungsparameters, der Reichweite der Wechselwirkung und der Dimension des Systems bestimmt wird. Systeme, deren kritische Exponenten dieselben Werte haben werden einer *Universalitätsklasse* zugeordnet.

Als Beispiel möchte ich das *Ising-Modell* auf einem zweidimensionalen quadratischen Gitter vorstellen. Das eindimensionale Modell wurde ursprünglich 1924 von Ernst Ising zur Beschreibung von Ferromagnetismus vorgeschlagen (vgl. [Isi25]). An jedem Gitterpunkt eines endlichen zweidimensionalen quadratischen Gitters befinde sich eine Spinvariable s_i , welche die Werte 1 und -1 annehmen kann $s_i \in \{-1, 1\}$. Die Energie einer Spinkonfiguration $\sigma = (s_1, \dots, s_n)$ sei gegeben durch

$$E(\sigma) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_{i=1}^n s_i,$$

Hierbei bezeichnet $\langle ij \rangle$ alle nächsten Nachbarn, $J \in \mathbb{R}$ heißt Kopplungskonstante und $H \in \mathbb{R}$ beschreibt den Effekt eines externen magnetischen Feldes. Weiter seien periodische Randbedingungen angenommen. Das System befinde sich in einem Wärmebad der Temperatur T , sodass

$$Z(T) = \sum_{\sigma \in S} e^{-E(\sigma)/T}.$$

Dieses Modell wurde zuerst von Lars Onsager exakt gelöst (vgl. [Ons44]). Für $H = 0$ und $J > 0$ findet der Übergang von der ungeordneten zur geordneten Phase statt bei $T_C = \frac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.27J$ und die kritischen Exponenten lauten

$$\alpha = 0 \quad \beta = \frac{1}{8} \quad \gamma = \frac{7}{4} \quad \delta = 15 \quad \eta = \frac{1}{4} \quad \nu = 1.$$

Als weiteres Beispiel, das besonders in Hinblick auf die dreidimensionalen Potts-Modelle von Interesse ist, sei der Punkt betrachtet, an dem die Koexistenzkurve von drei oder mehr Phasen endet. Dieser Punkt wird als *trikritischer Punkt* bezeichnet. Das Verhalten eines Systems in der Umgebung eines trikritischen Punktes unterscheidet sich

2. Physikalische Grundlagen

von dem Verhalten bei einem „gewöhnlichen“ kritischen Punkt. Auch Systeme, bei denen sich die Ordnung des Phasenübergangs ändert weisen an diesem Punkt trikritisches Verhalten auf, obwohl die kritischen Exponenten in den beiden Szenarien nicht unbedingt dieselben sind. Qualitativ kann trikritisches Verhalten untersucht werden, indem die Landau Freie Energie Ψ im Ordnungsparameter m bis zur sechsten Ordnung entwickelt wird und deren Minima untersucht werden (vgl. [Hua87, S. 428]):

$$\Psi(m) = \frac{1}{2}a(t, p)m^2 + \frac{1}{4}b(t, p)m^4 + \frac{1}{6}cm^6.$$

Im Gleichgewicht nimmt die freie Energie ein Minimum an. Die Funktion $\frac{\partial\Psi}{\partial m}$ besitzt fünf potentielle Nullstellen, $\bar{m} = 0$ und

$$\bar{m}_{\pm}^2 = -\frac{b}{2c} \pm \sqrt{\frac{b^2}{4c^2} - \frac{a}{c}},$$

welche von den Funktionen a und b abhängig sind. Für $a = 0$ und $b > 0$ ist der Phasenübergang zweiter Ordnung, auf der Kurve $b = -4\sqrt{\frac{ca}{3}}$ ist er erster Ordnung (vgl. Abb. 2.1). Diese Bereiche treffen sich in dem trikritischen Punkt $a = b = 0$. Die trikritischen Exponenten lauten

$$\alpha = \frac{1}{2} \quad \beta = \frac{1}{4} \quad \gamma = 1 \quad \delta = 5 \quad \eta = 0 \quad \nu = \frac{1}{2}.$$

Die kritische Dimension d_c dieses Modells ist $d_c = 3$. Das bedeutet, dass Systeme trikritisches Verhalten aufweisen können, falls sie mindestens dreidimensional sind. Zum Vergleich: Für die klassische Landau-Theorie ist $d_c = 4$.

2.3. Skalenverhalten von Systemen endlicher Ausdehnung

Wie bereits besprochen, können Phasenübergänge nur im thermodynamischen Limes und damit bei Systemen unendlicher Größe auftreten. Nichtsdestotrotz kann durch das Verhalten thermodynamischer Größen in endlichen Systemen auf die Lage des Phasenübergangs und die Universalitätsklasse des Systems geschlossen werden. Da am Pseudophasenübergang das thermodynamische Verhalten von Systemen sowohl mit Übergang zweiter Ordnung als auch von Systemen mit Übergang erster Ordnung stetig ist, soll hier von besonderem Interesse sein, wie die Ordnung des Phasenübergangs anhand des Verhaltens von endlichen Systemen bestimmt werden kann.

2.3. Skalenverhalten von Systemen endlicher Ausdehnung

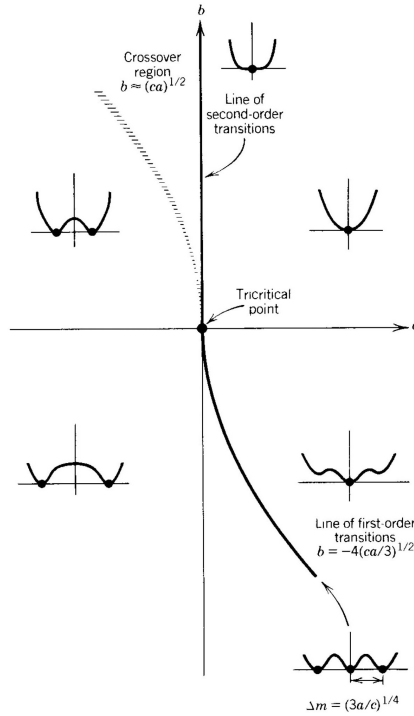


Abb. 2.1.: Übersicht über die Ordnung des Phasenübergangs in dem Modell für Trikritikalität [Hua87, S. 430].

2.3.1. Phasenübergänge zweiter Ordnung

Die Werte von dimensionsbehafteten Größen ändern sich, wenn die Einheit, in der die Größe angegeben ist, geändert wird, d.h. wenn eine Reskalierung vorgenommen wird. Die *Skalenhypothese* besagt, dass in der Nähe eines kritischen Punktes die Korrelationslänge ξ die einzige charakteristische Längeneinheit des Systems ist, alle Längen müssen bezüglich ξ angegeben werden (vgl [Hua87, S. 399]). In endlichen Systemen sind alle Längen durch die lineare Ausdehnung L des Systems beschränkt. Betrachte ein System, welches ein würfelförmiges Volumen V mit Kantenlänge L einnimmt, $V = L^3$. Der singuläre Anteil der freien Energie F in der Nähe des kritischen Punktes ist eine verallgemeinerte homogene Funktion, d.h. es existieren Zahlen e_T und e_L , sodass

$$\lambda F(t, L) = F(\lambda^{e_T} t, \lambda^{e_L} L), \quad (2.8)$$

wobei $t = \frac{T-T_C}{T_C}$ die reduzierte Temperatur bezeichnet. Insbesondere kann man $\lambda = t^{-1/e_T}$ wählen und es gibt eine Funktion $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, sodass $f(x) = F(1, x)$ für alle $x \in \mathbb{R}$;

2. Physikalische Grundlagen

damit folgt

$$F(T, L) = t^{1/e_t} f(t^{-e_L/e_t} L).$$

Da $T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = C \sim t^{-\alpha}$ kann man leicht nachrechnen, dass

$$\alpha = 2 - \frac{1}{e_t}$$

und auf ähnliche Weise kann man e_L mit den kritischen Exponenten in Verbindung bringen

$$\gamma = \frac{2e_L - 1}{e_t}.$$

Wählt man in Gl. 2.8 stattdessen $\lambda = L^{-1/e_L}$, so findet man

$$F(T, L) = L^{-(2-\alpha)/\nu} g(L^{1/\nu} t)$$

für eine entsprechende Funktion $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. In der Nähe des kritischen Punktes ist die Korrelationslänge endlich. Ist das System groß genug, sodass $L \approx \xi$, dann ist nach Gl. 2.5 $L^{1/\nu} t \approx \text{const}$ und $F(T, L) \sim L^{-(2-\alpha)/\nu}$. Durch die entsprechenden partiellen Ableitungen der freien Energie findet man folgende Relationen für den Ordnungsparameter M , die Suszeptibilität χ und die spezifische Wärme C (vgl. [LB14, S. 77]):

$$M \sim L^{\beta/\nu}, \quad (2.9)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (2.10)$$

$$C \sim L^{\alpha/\nu}. \quad (2.11)$$

Diese Relationen gelten nur für hinreichend große Systeme, für kleine Systeme müssen noch höhere Potenzen in L betrachtet werden, die sich aus der Reihenentwicklung der Funktion g ergeben. Diese führen zu einer Abweichung des Skalenverhaltens Gln. 2.9-2.11. Diese Abweichungen werden als *Finite-Size-Effects* bezeichnet. Die Tatsache, dass in endlichen Systemen kein echter Phasenübergang stattfindet, spiegelt sich auch darin wieder, dass die *pseudokritische Temperatur* von der Systemgröße abhängt. Es gilt (vgl. [LB14, S. 80])

$$T_C(L) = T_C + \lambda L^{-1/\nu} (1 + bL^{-w}), \quad (2.12)$$

dabei sind λ und b modellabhängige Konstanten und der Exponent w im Korrekturterm muss numerisch bestimmt werden. Je nach Modell kann λ positiv oder negativ sein.

2.3.2. Phasenübergänge erster Ordnung

Das Verhalten endlicher Systeme bei einem Phasenübergang erster Ordnung soll durch ein Beispiel motiviert werden. Betrachte ein magnetisches System ohne externes Feld mit der spontanen Magnetisierung M als Ordnungsparameter. In der ungeordneten Phase bei hohen Temperaturen ist $M = 0$ und in der geordneten Phase bei tiefen Temperaturen ist $M \neq 0$. Da es sich um einen Phasenübergang erster Ordnung handelt, ist M unstetig am Punkt des Phasenübergangs T_{PT} , es gilt also

$$\lim_{T \rightarrow T_{PT}^+} M(T, L) = 0,$$

$$\lim_{T \rightarrow T_{PT}^-} M(T, L) = \tilde{M}(L) \neq 0.$$

Da es sich bei der Magnetisierung um eine extensive Größe handelt, ist $\tilde{M}(L) = L^d M_0$, wobei d die Dimension des Systems ist und M_0 eine Konstante. Damit skaliert auch die Suszeptibilität $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$ mit dem Systemvolumen L^d . In endlichen Systemen sind zwar sowohl M als auch χ stetig, das Skalenverhalten bleibt aber erhalten, d.h. $\chi \sim L^d$. Diese Proportionalität kann mathematisch rigoros hergeleitet werden, indem die Wahrscheinlichkeitsverteilungen in der geordneten und ungeordneten Phase in der Nähe des Phasenübergangs analysiert werden, siehe z.B. [LB14] oder [BL84].

3. Das Potts-Modell

In diesem Kapitel wird die Klasse der Potts-Modelle vorgestellt. Nach einer allgemein gehaltenen Definition in Abschnitt 3.1 wird der Rahmen für die Modelle gesteckt, die in dieser Arbeit untersucht werden sollen. Anschließend werden in Abschnitt 3.2 und 3.3 grundlegende und insbesondere thermodynamische Eigenschaften dieser Modelle diskutiert. Die Abschnitte 3.1 bis 3.3 orientieren sich an [Wu82]. In Abschnitt 3.4 wird dann die Arbeit von Fortuin und Kasteleyn [FK72] vorgestellt, deren Ergebnisse grundlegend sind für die Entwicklung von Cluster-Algorithmen zur Simulation von Spin-Modellen.

3.1. Definition

Das Potts-Modell kann als Verallgemeinerung des Ising-Modells zu Spinvariablen mit mehr als zwei Zuständen angesehen werden. Es wurde zuerst von dessen Namensgeber Renfrey Potts in seiner Arbeit [Pot52] aus dem Jahre 1952 untersucht. Zunächst blieb es unbeachtet, stellt heute aber ein wichtiges Modell in der Theorie der Phasenübergänge dar. Dies liegt einerseits daran, dass diese Klasse von Modellen eine große Vielfalt an kritischen Phänomenen aufweist und andererseits, dass das Potts-Modell ein „Sandkasten-Modell“ darstellt, an dem neue numerische Methoden erprobt werden können.

In der Sprache der Graphentheorie kann das Potts-Modell wie folgt definiert werden:

Definition 3.1 (Potts-Modell). *Es sei $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ ein endlicher Graph, $\mathcal{V} = \{1, \dots, n\}$ für ein $n \in \mathbb{N}$. Das Potts-Modell (über G) mit q Zuständen, $q \in \mathbb{N}$, assoziiert mit jedem Knoten $v \in \mathcal{V}$ einen Spin $s_v \in \{1, \dots, q\}$. Ein Tupel $\sigma = (s_1, \dots, s_n) \in S = \{1, \dots, q\}^n$ heißt Konfiguration des Systems G . Für alle $T \in \mathbb{R}_{>0}$ wird ein Wahrscheinlichkeitsmaß $\mu_T : S \rightarrow [0, 1]$ auf S definiert durch*

$$\mu_T(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z(T)} e^{-E(\sigma)/T},$$

3. Das Potts-Modell

mit der kanonischen Zustandssumme

$$Z(T) = \sum_{\sigma \in S} e^{-E(\sigma)/T}$$

und der Energie einer Konfiguration

$$E(\sigma) = - \sum_{\{v,w\} \in \mathcal{E}} W(s_v, s_w) - \sum_{v \in \mathcal{V}} H(s_v).$$

Die Funktion $W : \{1, \dots, q\}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ beschreibt die Wechselwirkung zwischen den Knoten $v, w \in V$ und die Funktion $H : \{1, \dots, q\} \rightarrow \mathbb{R}$ beschreibt den Effekt eines externen Feldes.

In dem von Potts zunächst untersuchten Modell hatte die Wechselwirkungsfunktion W folgende Gestalt

$$W(v, w) = J_{vw} \cos\left(\frac{2\pi}{q}(s_w - s_v)\right), \quad (3.1)$$

wobei $J_{vw} \in \mathbb{R}$ die *Kopplungskonstanten* sind. Typischerweise werden Modelle mit homogener Kopplung betrachtet und $J_{vw} = J \in \mathbb{R}$ für alle $v, w \in \mathcal{V}$ gesetzt. Dies ist heute als das *Planare Potts-Modell* bekannt (vgl. [Wu82, S. 236]). Besonders viel Aufmerksamkeit wurde Potts-Modellen gewidmet mit folgender Wechselwirkungsfunktion

$$W(v, w) = J\delta_{s_v, s_w}, \quad (3.2)$$

wobei δ das Kronecker-Delta bezeichnet. Dies wird das *Standard Potts-Modell* genannt (vgl. [Wu82, S. 236]).

Modelle mit $J > 0$ heißen *ferromagnetisch*, solche mit $J < 0$ heißen *antiferromagnetisch*. Für das externe Feld H wird häufig eine lineare Funktion angesetzt, etwa $H(s_v) = h_v s_v$ mit $h_v \in \mathbb{R}$ für alle $v \in \mathcal{V}$. Werden die q Spinzustände als Vektoren $u_1, \dots, u_q \in \mathbb{R}^{q-1}$ interpretiert (vgl. Abschnitt 3.2), so kann das externe Feld parallel zu einem der Spinzustände gewählt werden, z.B. $H(s_v) = \langle H, u_{s_v} \rangle$ mit $H = hu_1$, $h \in \mathbb{R}$. Diese Definition des externen Feldes wird auch in Abschnitt 3.3 verwendet.

Als Graph $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ werden meist reguläre Gitter in d Dimensionen betrachtet, wobei Kanten $e \in \mathcal{E}$ ausschließlich zwischen benachbarten Gitterpunkten gezogen werden. Prominente Beispiele sind das primitiv quadratische Gitter, das Dreiecksgitter oder das hexagonale Gitter.

Werden Systeme endlicher Ausdehnung betrachtet, müssen zusätzliche Randbedingungen festgelegt werden. Bei quadratischen Gittern bieten sich periodische Randbedingungen an, wodurch das System topologisch einem Torus entspricht.

In dieser Arbeit werden ferromagnetische Standard Potts-Modelle auf hyperkubischen Gittern in d Dimensionen mit periodischen Randbedingungen ohne externe Felder untersucht, das heißt die Energie einer Spinkonfiguration σ ist gegeben durch

$$E(\sigma) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j}, \quad (3.3)$$

wobei $J \in \mathbb{R}_{>0}$. Die Notation $\langle ij \rangle$ bedeutet, dass die Summe über alle nächsten Nachbarn $\{i, j\}$ läuft. Wie in Definition 3.1 befinden sich die Systeme in einem Wärmebad der Temperatur T , sodass die Wahrscheinlichkeiten der Konfigurationen durch das kanonische Ensemble gegeben sind.

Es wäre natürlich möglich gewesen, das Potts-Modell direkt auf einem hyperkubischen Gitter zu definieren, anstatt auf beliebigen endlichen Graphen wie in Definition 3.1, jedoch wird die allgemeinere Definition in Abschnitt 3.4 von Nutzen sein.

3.2. Allgemeine Eigenschaften

Die Energie pro Teilchen in einer gegebenen Konfiguration σ ist

$$e(\sigma) = \frac{1}{Nd} E(\sigma) = -\frac{J}{Nd} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i, s_j}.$$

Sie ist minimal, wenn jedes Teilchen ausschließlich nächste Nachbarn parallelen Spins hat und maximal, wenn je zwei nächste Nachbarn verschiedenen Spin haben. Es gilt also allgemein

$$-dJ \leq e(\sigma) \leq 0.$$

Da die Grenzen unabhängig von N sind, ist die Energie pro Teilchen für alle Gittergrößen und auch im Limes eines unendlichen Gitters endlich. Weiter sei bemerkt, dass das System invariant ist unter Verschieben des Energienullpunktes. Ergänzt man also die Energiefunktion um einen konstanten additiven Term E_0

$$E'(\sigma) = E(\sigma) + E_0,$$

so bleibt das Maß unverändert:

$$Z'(T) = \sum_{\sigma \in S} e^{-E'(\sigma)/T} = \sum_{\sigma \in S} e^{-E(\sigma)/T - E_0/T} = e^{-E_0/T} Z(T)$$

3. Das Potts-Modell

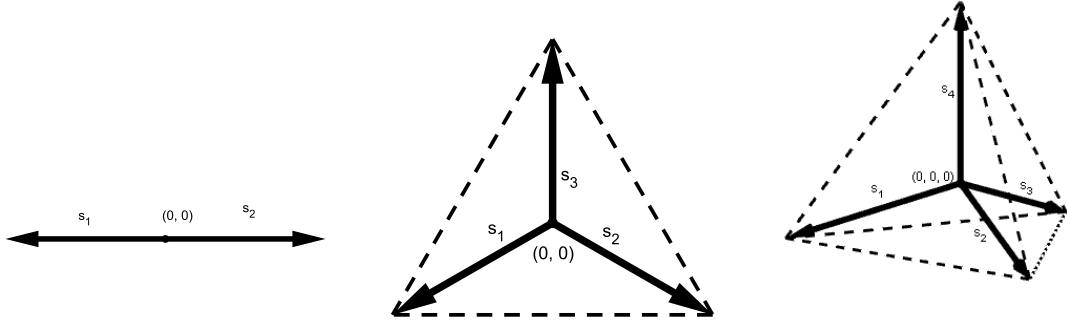


Abb. 3.1.: Spinvektoren als symmetrische Achsen eines $(q - 1)$ -dimensionalen Hypertetraeders für $q = 2$ (links), $q = 3$ (mitte) und $q = 4$ (rechts).

und damit ist

$$\mu'_T(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z'(T)} e^{-E'(\sigma)/T} = \frac{e^{-E_0/T}}{e^{-E_0/T} Z(T)} e^{-E(\sigma)/T} = \mu_T(\{\sigma\}).$$

Der Wechselwirkungsterm der Hamiltonfunktion Gl. 3.2 lässt eine geometrische Interpretation der q Spinzustände zu (vgl. [Wu82, S. 236]). Für gegebenes $q \in \mathbb{N}$ seien v_1, \dots, v_q die symmetrischen Achsen eines regulären $(q - 1)$ -Simplex, dessen Ecken auf der $(q - 1)$ -dimensionalen Einheitskugel liegen (vgl. Abb. 3.1). Zum Beispiel sind für $q = 3$ die Vektoren v_1, v_2, v_3 die Achsen eines gleichschenkligen Dreiecks, dessen Mittelpunkt im Ursprung und dessen Ecken auf dem Einheitskreis liegen. Für $q = 4$ beschreiben v_1, v_2, v_3 und v_4 die Achsen eines regulären Tetraeders, etc. Für diese Vektoren gilt

$$\langle v_i, v_j \rangle = \begin{cases} 1, & \text{falls } i = j, \\ -\frac{1}{q-1} & \text{sonst.} \end{cases}$$

Identifiziert man nun die Spins s_i mit diesen Vektoren v_i , lässt sich das Kronecker-Delta umschreiben

$$\delta_{s_i, s_j} = \frac{1}{q} (1 + (q - 1) \langle v_i, v_j \rangle).$$

Mit dieser Interpretation ist das Standard Potts-Modell äquivalent zu einem Modell mit Energie

$$E(\sigma) = -J' \sum_{\langle ij \rangle} \langle v_i, v_j \rangle = -J' \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\vartheta_{ij})$$

mit der neuen Kopplungskonstante $J' = \frac{q-1}{q} J$. ϑ_{ij} bezeichnet den Winkel, den die Vektoren v_i und v_j einschließen. Damit sind für $q = 2$ oder $q = 3$ das Planare Potts-Modell

3.3. Phasenübergänge im Standard Potts-Modell

und das Standard Potts-Modell bis auf die Kopplungskonstante identisch. Für $q \geq 4$ ist das nicht mehr richtig, da die Vektoren v_i nicht in einer Ebene liegen. Für $q = 2$ entspricht das Standard Potts-Modell und auch das Planare Potts-Modell dem Ising-Modell. Im Folgenden werden die Spins s_i stets mit den Vektoren v_i identifiziert.

3.3. Phasenübergänge im Standard Potts-Modell

Die freie Energie pro Teilchen ist

$$f(T, N, H) = \frac{1}{N^d} T \ln Z(T, N, H)$$

und die mittlere Magnetisierung des Gitters ist

$$\langle m \rangle(T) = \frac{\partial f}{\partial H} = \frac{T}{N^d Z} \sum_{\sigma \in S} \frac{\partial}{\partial H} e^{-E(\sigma)/T} = \frac{1}{N^d Z} \sum_{\sigma \in S} e^{-E(\sigma)/T} \left(\sum_{i=1}^{N^d} s_i \right) = \langle s \rangle(T),$$

wobei $s = \frac{1}{N^d} \sum_{i=1}^{N^d} s_i$ den mittleren Spin einer Konfiguration bezeichnet. s ist der Ordnungsparameter des Systems. Die Suszeptibilität χ ist gegeben durch

$$\chi = \frac{\partial^2 f}{\partial H^2} = \frac{\partial}{\partial H} \langle s \rangle = \frac{N^d}{T} (\langle \|s\|^2 \rangle - \|\langle s \rangle\|^2).$$

Die Hamiltonfunktion Gl. 3.3 besitzt die Symmetrie des Hypertetraeders der Spinvektoren s_i , $i = 1, \dots, q$. Ist nämlich $\mathcal{S} \subset O(q-1)$ die Gruppe der Symmetrien des Hypertetraeders (diese entspricht bis auf Isomorphie der Permutationsgruppe S_q einer q -elementigen Menge) und $A \in \mathcal{S}$, so gilt

$$E'(\sigma) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{As_i As_j} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j} = E(\sigma)$$

für alle Konfigurationen $\sigma \in S$. Der Ordnungsparameter s besitzt für hohe Temperaturen ebenfalls diese Symmetrie, für tiefe Temperaturen ist die Symmetrie jedoch gebrochen. Für hohe Temperaturen ist $e^{-E(\sigma)/T} \approx 1$ und alle Konfigurationen sind in etwa gleich gewichtet. Damit ist $\lim_{T \rightarrow \infty} \langle s \rangle(T) = 0$ und $\langle As \rangle = A \langle s \rangle = 0 = \langle s \rangle$. Jedoch haben für tiefe Temperaturen, dh. für T nahe Null, die Konfigurationen mit ausschließlich parallelen Spins deutlich größeres Gewicht, denn für diese ist $e^{-E(\sigma)/T} = e^{dJN^d/T} \gg 1$. Die mittlere Magnetisierung ist von Null verschieden und tendiert spontan zu einer der Ecken des

3. Das Potts-Modell

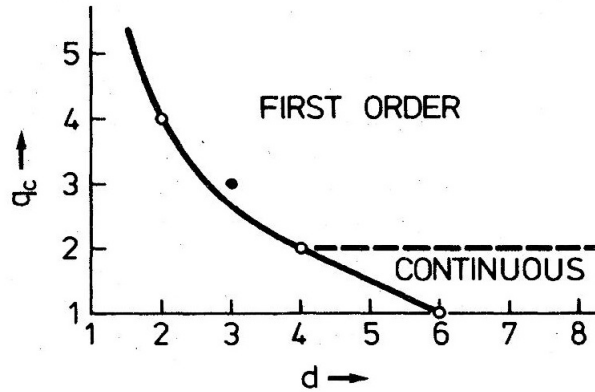


Abb. 3.2.: Ordnung des Phasenübergangs in Abhängigkeit von der Dimension d und der Zahl der Zustände q [Wu82, S. 239]. Der Phasenübergang ist zweiter Ordnung unterhalb der Kurve und erster Ordnung darüber.

Hypertetraeders. Im Falle ausschließlich paralleler Spins ist

$$s = \frac{1}{N^d} \sum_{i=1}^{N^d} s_i = \frac{1}{N^d} N^d s_k = s_k$$

für ein $k \in \{1, \dots, q\}$ und $As = As_k \neq s_k$ für alle nichttrivialen $A \in \mathcal{S}$. Das System durchläuft also bei einer kritischen Temperatur T_C einen Übergang zwischen der symmetrischen Phase und der Phase spontaner Symmetriebrechung.

Der Wert der kritischen Temperatur und die Ordnung des Phasenübergangs sind abhängig von der Anzahl der Zustände q und der Dimension d des Gitters (vgl. Abb. 3.2). Im Falle eines zweidimensionalen Gitters ist das System exakt lösbar und man kann zeigen, dass der Phasenübergang erster Ordnung ist für alle $q > 4$, für $q \leq 4$ ist der Phasenübergang zweiter Ordnung (vgl. [Bax73], [BKW76]). Die kritische Temperatur der zweidimensionalen Modelle ist gegeben durch

$$T_C = \frac{J}{\ln(1 + \sqrt{q})}. \quad (3.4)$$

In drei Dimensionen gibt es keine exakte Lösung, eine Vielzahl von sehr genauen Computersimulationen legt aber nahe, dass der Phasenübergang für $q = 3$ und $d = 3$ erster Ordnung ist. Werden q und d als stetige Parameter angesehen, so existiert eine kritische Kurve $d \mapsto q_C(d)$, die die Region von Phasenübergängen zweiter Ordnung von denen

erster Ordnung trennt. Bekannte Werte sind $q_C(2) = 4$, $q_C(4) = 2$ sowie $q_C(6) = 1$. Der Phasenübergang des dreidimensionalen Ising-Modells ist zweiter Ordnung, somit ist $2 \leq q_C(3) \leq 3$. Da sich an dieser Kurve die Ordnung des Phasenübergangs ändert, sollte das entsprechende dreidimensionale Potts-Modell dort trikritisches Verhalten aufweisen. Die Kurve geht aber bis auf wenige Ausnahmen nicht durch ganzzahlige Punkte, deshalb wird eine konsistente Definition von Potts-Modellen mit nichtganzzahligen q benötigt. Ein großer Schritt in diese Richtung wurde geleistet von Fortuin und Kasteleyn in ihrer Arbeit [FK72] aus dem Jahre 1972. Die Ergebnisse dieser Arbeit werden im folgenden Abschnitt vorgestellt.

3.4. Zustandssumme nach Fortuin und Kasteleyn

Zunächst werden die Operationen des Löschens und Kontrahierens von Kanten eines Graphen definiert (für eine kurze Einführung in die Graphentheorie vgl. Anhang A.1). Sei $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ ein endlicher Graph. Für $\mathcal{E}' \subset \mathcal{E}$ definiert $\mathcal{D}_{\mathcal{E}'}G = (\mathcal{V}, \mathcal{E} \setminus \mathcal{E}')$ einen aufspannenden Untergraphen, der aus G hervorgeht, indem die Kanten von \mathcal{E}' aus G gelöscht werden. Der Graph $\mathcal{C}_{\mathcal{E}'}G = (\bar{\mathcal{V}}, \bar{\mathcal{E}})$ mit

$$\bar{\mathcal{V}} = \{[v]_{\mathcal{E}'} : v \in \mathcal{V}\} \text{ und } \bar{\mathcal{E}} = \{[v]_{\mathcal{E}'}, [w]_{\mathcal{E}'}\} : \{v, w\} \in \mathcal{E} \setminus \mathcal{E}', v \notin [w]_{\mathcal{E}'}\}$$

geht aus G hervor, indem die Kanten von \mathcal{E}' in G kontrahiert und die dadurch verbundenen Knoten identifiziert werden. Die Bedingung $v \notin [w]_{\mathcal{E}'}$ stellt sicher, dass keine Schleifen entstehen, das heißt Kanten, die an ein und demselben Knoten beginnen und enden. Sind $\mathcal{E}', \mathcal{E}'' \subset \mathcal{E}$ zwei disjunkte Teilmengen von \mathcal{E} , dann gilt

$$\mathcal{D}_{\mathcal{E}''}(\mathcal{D}_{\mathcal{E}'}G) = \mathcal{D}_{\mathcal{E}'}(\mathcal{D}_{\mathcal{E}''}G) = \mathcal{D}_{\mathcal{E}' \cup \mathcal{E}''}G, \quad (3.5)$$

$$\mathcal{C}_{\mathcal{E}''}(\mathcal{C}_{\mathcal{E}'}G) = \mathcal{C}_{\mathcal{E}'}(\mathcal{C}_{\mathcal{E}''}G) = \mathcal{C}_{\mathcal{E}' \cup \mathcal{E}''}G, \quad (3.6)$$

$$\mathcal{D}_{\mathcal{E}''}(\mathcal{C}_{\mathcal{E}'}G) = \mathcal{C}_{\mathcal{E}'}(\mathcal{D}_{\mathcal{E}''}G). \quad (3.7)$$

Gl. 3.5 ist sofort einsichtig, zu Gl. 3.7 kann man sich überlegen, dass durch Löschen der Kanten von \mathcal{E}'' nicht der Zusammenhang bezüglich \mathcal{E}' zerstört wird, da $\mathcal{E}' \cap \mathcal{E}'' = \emptyset$. Die Gleichheit in Gl. 3.6 ist als Isomorphie zu lesen, für einen Beweis siehe [FK72, S. 544]. Insbesondere ist für $\mathcal{E}' = \{e_1, \dots, e_n\}$

$$\mathcal{D}_{\mathcal{E}'}G = \left(\prod_{i=1}^n \mathcal{D}_{e_i} \right) G$$

3. Das Potts-Modell

und

$$\mathcal{C}_{\mathcal{E}'}G = \left(\prod_{i=1}^n \mathcal{C}_{e_i} \right) G.$$

Betrachte nun die Zustandssumme des Standard Potts-Modells auf dem hyperkubischen Gitter $L_d = (V_d, E_d)$ (vgl. Anhang A.1) für den Fall, dass die Energie des ferromagnetischen Zustandes auf Null verschoben ist:

$$Z(L_d) = \sum_{\sigma \in S} \exp \left[K \sum_{\{v,w\} \in E_d} (\delta_{v,w} - 1) \right],$$

wobei $K = J/T$ gesetzt wurde und die Temperatur festgehalten wird. Sei $e = \{v', w'\} \in E_d$, die Zustandssumme kann aufgeteilt werden in die Summe über alle Konfigurationen σ mit $\delta_{v',w'} = 1$ und die Summe über alle Konfigurationen, für die $\delta_{v',w'} = 0$ ist:

$$Z(L_d) = \sum_{\sigma \in S: \delta_{v',w'}=1} \exp \left[K \sum_{\{v,w\} \in E_d \setminus e} (\delta_{v,w} - 1) \right] + e^{-K} \sum_{\sigma \in S: \delta_{v',w'}=0} \exp \left[K \sum_{\{v,w\} \in E_d \setminus e} (\delta_{v,w} - 1) \right]. \quad (3.8)$$

Die erste Summe entspricht gerade der Zustandssumme auf dem Graphen $\mathcal{C}_e L_d$. Betrachte nun den Graphen $\mathcal{D}_e L_d$. Dieser hat die gleiche Knotenmenge wie L_d und die Kantenmenge $E(\mathcal{D}_e L_d) = E_d \setminus e$. Die Zustandssumme kann wie oben aufgeteilt werden:

$$Z(\mathcal{D}_e L_d) = \sum_{\sigma \in S: \delta_{v',w'}=1} \exp \left[K \sum_{\{v,w\} \in E_d \setminus e} (\delta_{v,w} - 1) \right] + \sum_{\sigma \in S: \delta_{v',w'}=0} \exp \left[K \sum_{\{v,w\} \in E_d \setminus e} (\delta_{v,w} - 1) \right]. \quad (3.9)$$

Die Konfigurationen auf $\mathcal{D}_e L_d$ entsprechen denen auf L_d , mit dem Unterschied, dass in der Energiefunktion nicht über die Kante e summiert wird. Deshalb hat die zweite Summe in Gl. 3.8 den Koeffizienten e^{-K} , in Gl. 3.9 jedoch nicht. Kombiniert man die Gln. 3.8 und 3.9, so findet man

$$Z(L_d) = (1 - e^{-K})Z(\mathcal{C}_e L_d) + e^{-K}Z(\mathcal{D}_e L_d).$$

Diese Gleichung kann nun rekursiv auf die Graphen $\mathcal{C}_e L_d$ und $\mathcal{D}_e L_d$ angewandt werden, am Ende des Prozesses erhält man

$$Z(L_d) = \sum_{C \subset E_d} p^{|C|} (1-p)^{|D|} Z(\mathcal{C}_C \mathcal{D}_D L_d),$$

3.4. Zustandssumme nach Fortuin und Kasteleyn

wobei $p = (1 - e^{-K})$ und $D = E_d \setminus C$. Der Graph $\mathcal{C}_C \mathcal{D}_D L_d$ beschreibt ein System ohne Wechselwirkung, da alle Kanten aus E_d entweder gelöscht oder kontrahiert wurden. Die Anzahl der Knoten von $\mathcal{C}_C \mathcal{D}_D L_d$ entspricht der Zahl der Äquivalenzklassen in V_d unter Zusammenhang in C . Dies kann man sich überlegen, indem man zunächst alle Kanten in D aus L_d entfernt und anschließend die Zusammenhangskomponenten in dem verbleibenden Graphen zählt. Jeder der Knoten in $\mathcal{C}_C \mathcal{D}_D L_d$ kann einen der q Spinzustände einnehmen und aufgrund fehlender Wechselwirkung sind alle Konfigurationen gleich gewichtet, also ist $Z(\mathcal{C}_C \mathcal{D}_D L_d) = q^{|V(\mathcal{C}_C \mathcal{D}_D L_d)|}$. Es bezeichne $N_C = |V(\mathcal{C}_C \mathcal{D}_D L_d)|$ die Zahl der *geometrischen Cluster*, das heißt der Zusammenhangskomponenten in (V_d, C) , dann ist

$$Z(L_d) = \sum_{C \subset E_d} p^{|C|} (1-p)^{|D|} q^{N_C}. \quad (3.10)$$

In dieser Darstellung ist q nicht mehr an die Interpretation als Anzahl der Spinzustände gebunden und kann beliebige positive Werte annehmen.

Anschaulich wird auf dem Gitter zwischen zwei benachbarten Punkten eine Kante gezogen genau dann, wenn die beiden Spins gleich sind. Dadurch wird jeder Spinkonfiguration σ ein Untergraph $G_\sigma = (V_d, E_\sigma)$ des vollständigen Gittergraphen $L_d = (V_d, E_d)$, mit $E_\sigma \subset E_d$, zugeordnet (beachte jedoch, dass diese Zuordnung nicht injektiv ist). Dieser Untergraph hat dann das Wahrscheinlichkeitsmaß

$$\mathbb{P}(G_\sigma) = \frac{1}{Z(L_d)} p^{|E(\sigma)|} (1-p)^{|E_d \setminus E(\sigma)|} q^{N_C}.$$

Nun wird auch deutlich, weshalb es nötig war, das Potts-Modell zunächst abstrakt auf einem beliebigen endlichen Graphen zu definieren (vgl. Definition 3.1) und sich erst später auf den Spezialfall eines regulären Gitters zu beschränken. Andernfalls wäre nämlich die Zustandssumme auf den Graphen $\mathcal{C}_C \mathcal{D}_D L_d$ nicht definiert, da es sich bei diesen nicht um reguläre Gitter handelt. Diese Verallgemeinerung ist also notwendig, um die Zustandssumme des Modells in die Form 3.10 zu bringen.

4. Simulation des Modells am Computer

In diesem Kapitel möchte ich die wichtigsten Aspekte meiner Simulation vorstellen. Nach einer kurzen Einführung in den Begriff der Monte-Carlo Methode und das Importance Sampling (Abschnitte 4.1 und 4.2) werden verschiedene Algorithmen vorgestellt, mit denen in einer Monte-Carlo Simulation des Standard Potts-Modells Markov-Ketten über dem Zustandsraum generiert und nichtganzzahlige Werte für q realisiert werden können (Abschnitt 4.3). Anschließend wird in Abschnitt 4.4 die Funktionsweise des Programms beschrieben. Abschnitt 4.5 befasst sich mit der Fehleranalyse der Simulation.

4.1. Die Monte-Carlo Methode

Viele Probleme in der theoretischen Physik lassen sich nur sehr schwer oder gar nicht analytisch lösen, insbesondere Probleme aus der statistischen Mechanik erweisen sich als sehr widerstandsfähig gegenüber exakten Lösungen, da die Zustandssummen, die es zu berechnen gilt, unvorstellbar viele Summanden besitzen (für eine Auswahl an exakt lösbaaren Problemen der statistischen Mechanik vergleiche [Bax89]). Aus diesem Grund wurde eine Vielzahl an Methoden entwickelt, um in kurzer Zeit approximative Lösungen zu finden. Die wohl erfolgreichste unter diesen ist die *Monte-Carlo Methode*. Sie ist besonders gut geeignet, um hochdimensionale Integrale numerisch zu lösen oder physikalische Systeme mit vielen Freiheitsgraden zu simulieren. Dabei handelt es sich um eine Näherungsmethode mit probabilistischem Charakter, bei der mit Hilfe von Zufallszahlen eine Stichprobe aus einer Population ausgewählt wird. Soll ein Integral gelöst werden, so wählt man zufällig Punkte des Definitionsbereichs aus und summiert die entsprechenden Funktionswerte. Bei der Simulation eines thermodynamischen Systems entspricht die Grundpopulation dem Phasenraum des Systems aus dem Zustände entsprechend dem kanonischen Ensemble ausgewählt werden.

Eine *Monte-Carlo Simulation* ist die Realisierung einer Monte-Carlo Methode durch Zufallsexperimente. Dabei kann es sich um eine Simulation am Computer handeln, aber auch das Werfen von Nähnadeln auf einen Dielenboden zur Bestimmung des numerischen Wertes von π (vgl. *Buffon'sches Nadelproblem* [AZ02]) ist eine Monte-Carlo Simulation.

4. Simulation des Modells am Computer

Monte-Carlo Simulationen können unterschieden werden nach der Art der Auswahl der Stichprobe. Bei den Simulationen mit *direkten Ziehungen* (*direct sampling*) werden die Datenpunkte unabhängig voneinander ausgewählt. Demgegenüber stehen die Simulationen, welche Markov-Ketten erzeugen (*Markov-Chain-Monte-Carlo*-, oder kurz MCMC-Simulationen). Bei diesen Simulationen ist jeder neue Datenpunkt abhängig von dem davor gezogenen. Die Markov-Ketten sind so konstruiert, dass sie gegen ihre stationäre Verteilung konvergieren. Dadurch können die Daten mit den Mitteln der mathematischen Statistik analysiert werden.

Wegen des stochastischen Charakters der Monte-Carlo Simulationen sind die Ergebnisse nicht exakt sondern schwanken um ihre Mittelwerte und müssen mit statistischen Methoden ausgewertet werden.

4.2. Importance Sampling

Dieser Abschnitt richtet sich nach [HH64], [Kra06] und [Fle13].

Angenommen, es soll das Integral

$$I(\gamma) = \int_0^1 x^\gamma dx$$

mit Hilfe einer Monte-Carlo Simulation numerisch gelöst werden. Für alle $\gamma > -1$ ist $I(\gamma) = \frac{1}{1+\gamma}$. Für $\gamma < 0$ nimmt der Integrand nur in einem kleinen Bereich nahe der Null große Werte an und ist auf dem Rest des Intervalls kaum von Null verschieden. Werden die Datenpunkte nach der Gleichverteilung ausgewählt, so liegen nur wenige Punkte in dem für das Integral relevanten Bereich. Dadurch ist die Varianz des Ergebnisses und somit der Fehler des Mittelwertes sehr groß. Das *Importance Sampling* ist eine Methode zur Reduktion der Varianz. Die Datenpunkte werden dabei nach einer anderen Verteilung erzeugt, sodass mehr Datenpunkte aus dem relevanten Bereich gezogen werden (daher auch der Name). Ein weiterer Vorteil der Methode ist, dass die Verteilung, die simuliert werden soll, nur bis auf eine Normierungskonstante bekannt sein muss. Dies ist selbstverständlich besonders wichtig für die Simulation thermodynamischer Systeme, es bedeutet nämlich, dass die Zustände des Systems nach den Boltzmann-Gewichten ausgewählt werden können, ohne dass die Zustandssumme explizit berechnet werden muss. Sei also X eine p -verteilte Zufallsvariable auf einem endlichen Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, p) und q eine weitere Verteilung auf Ω . Um den Erwartungswert nicht zu verfä-

schen muss die Zufallsvariable reskaliert werden

$$\mathbb{E}_p[X] = \sum_{\omega \in \Omega} p(\omega)X(\omega) = \sum_{\omega \in \Omega} q(\omega) \frac{p(\omega)}{q(\omega)} X(\omega) = \mathbb{E}_q \left[X \frac{p}{q} \right].$$

(X_1, \dots, X_n) sei eine Stichprobe unabhängiger p -verteilter Zufallsvariablen mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2 . Werden die X_i mit q neu gewichtet, $X'_i = \frac{p}{q} X_i$, so gilt $\mathbb{E}_q[\bar{X}'] = \mu$ und

$$\text{Var}_q[\bar{X}'] = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \text{Var}_q \left[\frac{p}{q} X_i \right] = \frac{1}{n} \text{Var}_q \left[\frac{p}{q} X \right].$$

Für eine geschickte Wahl von q kann also die Stichprobenvarianz und damit der Standardfehler reduziert werden. Ist z.B. $0 < X < \infty$, so kann $q = \frac{pX}{\mu}$ gewählt werden. Es gilt

$$\sum_{\omega \in \Omega} q(\omega) = \frac{1}{\mu} \sum_{\omega \in \Omega} p(\omega)X(\omega) = \frac{1}{\mu} \mu = 1$$

und $q(\omega) > 0$ für alle ω , also ist q eine Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Für die Varianz gilt mit dieser Wahl von q

$$\begin{aligned} \text{Var}_q[X'] &= \sum_{\omega \in \Omega} q(\omega) \left(\frac{p(\omega)}{q(\omega)} X(\omega) - \mu \right)^2 \\ &= \sum_{\omega \in \Omega} q(\omega) \left(\frac{p(\omega)\mu}{p(\omega)X(\omega)} X(\omega) - \mu \right)^2 \\ &= 0. \end{aligned}$$

Offensichtlich ist dies ein Lehrbuchbeispiel, da zur Konstruktion von q sowohl die Verteilung p als auch der Erwartungswert μ bekannt sein müssen und dann müsste man keine Monte-Carlo Simulation durchführen um μ abzuschätzen. Nichtsdestotrotz zeigt es, wie effektiv eine geschickte Wahl von q sein kann.

Die Verteilungen p und q seien nun jeweils nur bis auf eine Normierungskonstante bekannt, $p = c_p \tilde{p}$ und $q = c_q \tilde{q}$. Nun wird in die Berechnung des Stichprobenmittels eine „Eins“ hinzugefügt durch

$$\hat{\mathbf{1}}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{p(X_i)}{q(X_i)}.$$

Es gilt

$$\mathbb{E}_q[\hat{\mathbf{1}}_n] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_q \left[\frac{p(X_i)}{q(X_i)} \right],$$

4. Simulation des Modells am Computer

mit

$$\mathbb{E}_q \left[\frac{p(X_i)}{q(X_i)} \right] = \sum_{\omega \in \Omega} q(\omega) \frac{p(\{X_i = \omega\})}{q(\{X_i = \omega\})} = \sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1$$

und damit ist $\mathbb{E}_q[\hat{\mathbb{1}}_n] = 1$. Statt dem Schätzer \bar{X} für den Erwartungswert μ kann der *Quotientenschätzer*

$$\frac{\bar{X}'}{\hat{\mathbb{1}}_n} = \frac{\sum_{i=1}^n X'_i}{\sum_{i=1}^n \frac{p(X_i)}{q(X_i)}} = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{\tilde{p}(X_i)}{q(X_i)} X_i}{\sum_{i=1}^n \frac{\tilde{p}(X_i)}{q(X_i)}}$$

verwendet werden. Hier ist die Kenntnis der Normierungskonstanten c_p und c_v nicht nötig und der Quotient konvergiert fast sicher gegen μ .

Sind die X_i die Glieder einer irreduziblen, aperiodischen Markov-Kette, die Detailed Balance erfüllt, $p_i = p(X_i)$ die Verteilungen der Kettenglieder und $q(X_i) = q$ die stationäre Verteilung der Kette, $i \in \mathbb{N}$, dann konvergiert $p_i \xrightarrow{i \rightarrow \infty} q$ und der Quotientenschätzer konvergiert gegen $\mathbb{E}[X]$.

4.3. Algorithmen

Einer der wohl prominentesten Algorithmen zur Simulation von Spinmodellen ist der Metropolis-Algorithmus, welcher in Abschnitt 4.3.1 vorgestellt wird. Da dieser aber nur lokale Updates durchführt, sind die so erzeugten Konfigurationen stark korreliert und gerade im Bereich eines Phasenüberganges zweiter Ordnung versagt dieser. Deutlich besser geeignet ist der Algorithmus von Swendsen und Wang aus Abschnitt 4.3.2. Bei diesem handelt es sich um einen *Cluster*-Algorithmus, der globale Updates durchführt. Der Algorithmus, welcher nichtganzzahlige Spinzustände ermöglicht und in meiner Simulation verwendet wird, basiert auf dem Algorithmus von Swendsen und Wang und wird in Abschnitt 4.3.3 vorgestellt.

4.3.1. Metropolis-Algorithmus

Der Metropolis-Algorithmus, welcher 1953 in [MRR⁺53] vorgestellt wurde, generiert eine Markov-Kette auf dem Zustandsraum eines thermodynamischen Systems, das durch das kanonische Ensemble beschrieben wird. Die mit dem Metropolis-Algorithmus erzeugte Markov-Kette ist aperiodisch (vgl. Def. A.21) und erfüllt Detailed Balance (vgl. Def. A.19), konvergiert also gegen ihre stationäre Verteilung (vgl. Satz A.22). Der große Vorteil des Algorithmus ist, dass in die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten einzig die Energien der beteiligten Zustände einfließen und er sich somit auf viele ver-

schiedene Systeme anwenden lässt. Für das Standard Potts-Modell kann der Algorithmus folgendermaßen beschrieben werden (vgl. [Kra06, S. 250]):

Als Startkonfiguration der Markov-Kette kann eine beliebige Konfiguration $\sigma \in S$ gewählt werden. Zur Erzeugung des nächsten Gliedes X_{n+1} der Kette sei $X_n = \sigma_0$ das letzte generierte Glied. Dann wird zufällig ein Gitterpunkt k mit Spin s_k und ein neuer Spin $s'_k \in \{1, \dots, q\} \setminus \{s_k\}$ ausgewählt. $\sigma_1 = (s_1, \dots, s_{k-1}, s'_k, s_{k+1}, \dots, s_{N^d})$ sei die Konfiguration, welche aus σ_0 hervorgeht, indem der Spin am Punkt k gedreht wird $s_k \mapsto s'_k$. Nun wird die Energiedifferenz

$$\Delta E = E(\sigma_1) - E(\sigma_0) = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{s'_i s'_j} - \delta_{s_i s_j}) = -J \sum_{\langle kj \rangle} (\delta_{s'_k s_j} - \delta_{s_k s_j})$$

zwischen σ_1 und σ_0 berechnet und mit Wahrscheinlichkeit $p = \min\{1, e^{-\Delta E/T}\}$ wird der Spin an Punkt k gedreht. Dazu wird eine gleichverteilte Zufallszahl $q \in [0, 1]$ gezogen und falls $q < p$ bildet $X_{n+1} = \sigma_1$ das nächste Glied der Markov-Kette, andernfalls wird $X_{n+1} = \sigma_0$ gesetzt.

Es ist leicht einzusehen, dass dieser Algorithmus Detailed Balance erfüllt. Bezeichnet nämlich $p_{\sigma_i \sigma_j}$ die Wahrscheinlichkeit von σ_i nach σ_j überzugehen, dann ist

$$\begin{aligned} \frac{p_{\sigma_i \sigma_j}}{p_{\sigma_j \sigma_i}} &= \frac{\frac{1}{N^d} \frac{1}{q-1} \min\{1, e^{-\frac{1}{T}(E(\sigma_j) - E(\sigma_i))}\}}{\frac{1}{N^d} \frac{1}{q-1} \min\{1, e^{-\frac{1}{T}(E(\sigma_i) - E(\sigma_j))}\}} \\ &= e^{-\frac{1}{T}(E(\sigma_j) - E(\sigma_i))} \\ &= \frac{\frac{1}{Z} e^{-E(\sigma_j)/T}}{\frac{1}{Z} e^{-E(\sigma_i)/T}} \\ &= \frac{\mathbb{P}(\sigma_j)}{\mathbb{P}(\sigma_i)}, \end{aligned}$$

oder anders ausgedrückt $\mathbb{P}(\sigma_i) p_{\sigma_i \sigma_j} = \mathbb{P}(\sigma_j) p_{\sigma_j \sigma_i}$ (vgl. [Kra06, S. 21]). Da $p_{\sigma_i \sigma_i} \neq 0$ für alle $i = 1, \dots, q^{N^d}$, ist die Markov-Kette aperiodisch. Somit konvergiert die durch den Metropolis-Algorithmus erzeugte Markov-Kette gegen die stationäre Verteilung $p(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-E(\sigma)/T}$.

Der Nachteil des Metropolis-Algorithmus liegt darin, dass die Updates nur lokal sind, d.h. in jeder neuen Konfiguration wird nur höchstens ein Spin aktualisiert. Dadurch konvergiert die Kette nur sehr langsam gegen die stationäre Verteilung und die einzelnen Kettenglieder sind stark korreliert. Insbesondere in der Umgebung eines Phasenübergangs zweiter Ordnung, bei dem die Korrelationslänge divergiert, führt das zu sehr langen Simulationszeiten. Dieses Problem wird in Abschnitt 4.5.1 genauer untersucht.

4. Simulation des Modells am Computer

4.3.2. Algorithmus von Swendsen und Wang

Robert H. Swendsen und Jian-Sheng Wang haben 1987 einen Algorithmus vorgestellt, der im Gegensatz zum Metropolis-Algorithmus globale Updates durchführt (vgl. [SW87]). Die so erzeugte Markov-Kette konvergiert deutlich schneller gegen die stationäre Verteilung, er kann aber nur auf Spinmodelle angewendet werden. Der Algorithmus basiert auf der Darstellung der Zustandssumme nach Fortuin und Kasteleyn Gl. 3.10.

Es kann wieder jede beliebige Konfiguration des Standard Potts-Modells als Startkonfiguration der Markov-Kette gewählt werden. Um eine neue Konfiguration zu erzeugen werden sogenannte *Cluster* konstruiert. Beginnend mit einem beliebigen Gitterpunkt werden nächste Nachbarn des Punktes, die denselben Spinzustand besitzen, mit Wahrscheinlichkeit $p = (1 - e^{-J/T})$ dem Cluster hinzugefügt. Nachbarn in einem anderen Spinzustand werden ignoriert. Diese Prozedur wird für jeden Gitterpunkt im Cluster und alle seine nächsten Nachbarn wiederholt. Ist die Konstruktion eines Clusters abgeschlossen, so wird ein weiteres konstruiert ausgehend von einem beliebigen Gitterpunkt der keinem bereits konstruierten Cluster zugehörig ist. Diese statistischen Cluster werden im Folgenden *SW-Cluster* genannt, um sie von den *geometrischen Clustern* (das heißt den Zusammenhangskomponenten des Graphen) zu unterscheiden. Offensichtlich ist die Größe der SW-Cluster nach oben durch die Größe der geometrischen Cluster beschränkt. Die Prozedur wird wiederholt, bis das gesamte Gitter in SW-Cluster zerfällt. Anschließend wird jedem SW-Cluster unabhängig einer der Spinzustände $1, \dots, q$ mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{q}$ zugeordnet. Diese neue Konfiguration bildet das nächste Glied der Markov-Kette.

Man kann sich das Erzeugen einer neuen Konfiguration als einen zweistufigen Prozess vorstellen. Diese Sichtweise hilft mir zu zeigen, dass die Markov-Kette Detailed Balance erfüllt. Beginnend mit dem zu einer Spinkonfiguration σ gehörenden Untergraphen $G_\sigma = (V_d, E_\sigma)$ des vollständigen Gittergraphen $L_d = (L_d, E_d)$ (vgl. Anhang A.1) werden Kanten mit der Wahrscheinlichkeit $1 - p = e^{-J/T}$ gelöscht und bleiben mit Wahrscheinlichkeit $p = 1 - e^{-J/T}$ bestehen. Dies entspricht dem Prozess der Konstruktion der SW-Cluster. Im zweiten Schritt wird jedem SW-Cluster unabhängig ein neuer Spin zugeordnet, dabei ist jede der q^{N_C} neuen Spinkonfigurationen gleichwahrscheinlich (N_C ist die Anzahl der SW-Cluster). Nun werden neue Kanten geknüpft entlang der Ränder sich berührender SW-Cluster gleichen Spins.

Es sei bemerkt, dass eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit existiert mit einem einzigen SW-Update aus einer beliebigen Spinkonfiguration jede beliebige Spinkonfiguration zu erzeugen. Es existiert nämlich eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit

ausschließlich SW-Cluster der Größe eins zu erzeugen, d.h. jeder Cluster besteht nur aus einem Gitterpunkt, und jedem dieser Cluster kann unabhängig einer der q Spinzustände zugeordnet werden (daraus folgt insbesondere, dass die Markov-Kette irreduzibel ist). Um nun zu zeigen, dass der Algorithmus Detailed Balance erfüllt, betrachte ich zwei beliebige Konfigurationen σ_1 und σ_2 des Systems und $\tilde{G} = (V_d, \tilde{E})$ sei ein möglicher Untergraph in dem oben beschriebenen Prozess, der aus dem Löschen der entsprechenden Kanten aus G_{σ_1} hervorgeht (\tilde{G} ist nicht eindeutig, es besteht nämlich immer die Möglichkeit alle Kanten zu löschen und aus dem leeren Gittergraphen kann durch entsprechende Wahl der Spins jede Konfiguration hervorgehen). Dann kann man \tilde{G} ebenfalls durch Löschen der entsprechenden Kanten aus G_{σ_2} erhalten. Das bedeutet, die Untergraphen \tilde{G} , die bei dem Übergang von σ_1 nach σ_2 als „Zwischenprodukt“ entstehen können, sind genau die Untergraphen, die bei dem Übergang von σ_2 nach σ_1 entstehen können. Die Wahrscheinlichkeit $p_{\sigma_1\sigma_2}$ von σ_1 nach σ_2 zu wechseln, ist also die Summe der Wahrscheinlichkeiten $p_{\sigma_1\sigma_2}^{\tilde{G}}$, bei denen dieser Übergang über den Graphen \tilde{G} erfolgt, wobei über alle möglichen \tilde{G} summiert wird

$$p_{\sigma_1\sigma_2} = \sum_{\tilde{G}} p_{\sigma_1\sigma_2}^{\tilde{G}}$$

und der entscheidende Punkt ist, dass bei dem umgekehrten Prozess $\sigma_2 \mapsto \sigma_1$ über genau dieselben Untergraphen \tilde{G} summiert wird

$$p_{\sigma_2\sigma_1} = \sum_{\tilde{G}} p_{\sigma_2\sigma_1}^{\tilde{G}}.$$

Es sei also \tilde{G} ein Untergraph zwischen σ_1 und σ_2 . n_1 bzw. n_2 sei die Zahl an Kanten, die aus G_{σ_1} bzw. G_{σ_2} gelöscht werden müssen um \tilde{G} zu erhalten und N_C sei die Anzahl der Zusammenhangskomponenten von \tilde{G} . $p_{\sigma_1\sigma_2}^{\tilde{G}}$ bezeichne die Wahrscheinlichkeit von Konfiguration σ_1 zu Konfiguration σ_2 zu wechseln über die Kantenkonfiguration \tilde{G} , $p_{\sigma_2\sigma_1}^{\tilde{G}}$ bezeichne den umgekehrten Prozess. Es gilt

$$p_{\sigma_1\sigma_2}^{\tilde{G}} = p^{|E_{\sigma_1}| - n_1} (1 - p)^{n_1} \frac{1}{q^{N_C}},$$

da aus G_{σ_1} n_1 Kanten gelöscht werden und $|E_{\sigma_1}| - n_1$ Kanten erhalten bleiben um \tilde{G} zu erzeugen. Der Faktor $\frac{1}{q^{N_C}}$ trägt der Tatsache Rechnung, dass σ_2 eine der q^{N_C} möglichen

4. Simulation des Modells am Computer

Spinkonfigurationen ist, die aus \tilde{G} hervorgehen können; damit folgt

$$\frac{p_{\sigma_1\sigma_2}^{\tilde{G}}}{p_{\sigma_2\sigma_1}^{\tilde{G}}} = \frac{p^{|E_{\sigma_1}|-n_1}(1-p)^{n_1}q^{N_C}}{p^{|E_{\sigma_2}|-n_2}(1-p)^{n_2}q^{N_C}} = \frac{(1-p)^{n_1}}{(1-p)^{n_2}} = \frac{e^{-n_1J/T}}{e^{-n_2J/T}}. \quad (4.1)$$

Betrachte nun das Verhältnis der Boltzmann-Gewichte von σ_1 und σ_2

$$\frac{\mathbb{P}(\sigma_2)}{\mathbb{P}(\sigma_1)} = \frac{\exp\left(\frac{J}{T} \sum_{e \in E} (\delta_e(\sigma_2) - 1)\right)}{\exp\left(\frac{J}{T} \sum_{e \in E} (\delta_e(\sigma_1) - 1)\right)},$$

hier bezeichnet $\delta_e(\sigma)$ das Kronecker-Delta bezüglich der Kanten $e \in E_\sigma$, d.h. $\delta_e(\sigma) = 1$ genau dann, wenn $e \in E_\sigma$, also genau dann, wenn die zu e gehörenden Gitterpunkte parallelen Spin haben. Das bedeutet, dass hier nur diejenigen Terme beitragen, für die $\delta_e(\sigma)$ Null ist, also ist

$$\frac{\mathbb{P}(\sigma_2)}{\mathbb{P}(\sigma_1)} = \frac{\exp\left(-\frac{J}{T}|E \setminus E_{\sigma_2}|\right)}{\exp\left(-\frac{J}{T}|E \setminus E_{\sigma_1}|\right)} = \frac{\exp\left(-\frac{J}{T}(|E| - |E_{\sigma_2}|)\right)}{\exp\left(-\frac{J}{T}(|E| - |E_{\sigma_1}|)\right)}. \quad (4.2)$$

Weiter ist $|E_{\sigma_1}| - n_1 = |E(\tilde{G})| = |E_{\sigma_2}| - n_2$ und damit

$$\begin{aligned} \frac{\exp\left(-\frac{J}{T}(|E| - |E_{\sigma_2}|)\right)}{\exp\left(-\frac{J}{T}(|E| - |E_{\sigma_1}|)\right)} &= \frac{\exp\left(-\frac{J}{T}(|E_{\sigma_2}| - n_2)\right)}{\exp\left(-\frac{J}{T}(|E_{\sigma_1}| - n_1)\right)} \cdot \frac{\exp\left(-\frac{J}{T}(|E| - |E_{\sigma_2}|)\right)}{\exp\left(-\frac{J}{T}(|E| - |E_{\sigma_1}|)\right)} \\ &= \frac{\exp\left(-n_1 \frac{J}{T}\right)}{\exp\left(-n_2 \frac{J}{T}\right)}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Kombiniert man Gln. 4.1, 4.2 und 4.3, so folgt (für dieses Kernargument vgl. auch [SW87, S. 87]):

$$\mathbb{P}(\sigma_1)p_{\sigma_1\sigma_2}^{\tilde{G}} = \mathbb{P}(\sigma_2)p_{\sigma_2\sigma_1}^{\tilde{G}}.$$

Nun können beide Seiten der Gleichung über alle möglichen Kantenkonfigurationen \tilde{G} zwischen σ_1 und σ_2 summiert werden und man erhält die Gleichung für Detailed Balance:

$$\mathbb{P}(\sigma_1)p_{\sigma_1\sigma_2} = \mathbb{P}(\sigma_2)p_{\sigma_2\sigma_1}.$$

Da eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit existiert, dass die SW-Cluster in ihren ursprünglichen Spinzustand (also effektiv gar nicht) gedreht werden, ist die Markov-

Kette aperiodisch. Somit konvergiert sie gegen ihre stationäre Verteilung.

4.3.3. Algorithmus von Barkema und de Boer

Gerard Barkema und Jan de Boer haben in ihrer Arbeit aus dem Jahre 1991 eine Modifikation des Swendsen-Wang-Algorithmus (im Folgenden SW-Algorithmus) vorgestellt, wodurch der Effekt von nichtganzzahligen Werten von q simuliert wird (vgl. [BB91]). Es sei $q \in \mathbb{N}$ und $S(q)$ bezeichne die Menge der Konfigurationen σ eines Standard Potts-Modells mit q Spinzuständen. Die Beobachtung, welche dem Algorithmus aus [BB91] zugrunde liegt, ist, dass für $p < q \in \mathbb{N}$ gilt $S(p) \subset S(q)$. Für $p = q - 1$ kann man sich das leicht überlegen, da alle möglichen Konfigurationen $\sigma \in S(q - 1)$ mit $q - 1$ Zuständen gerade die Konfigurationen $\sigma \in S(q)$ sind, für die der Zustand q nicht angenommen wird. Wird die Wahrscheinlichkeit der Konfigurationen, in denen sich mindestens ein Punkt in dem Zustand q befindet, stetig verringert, so kann zwischen Potts-Modellen mit $q - 1$ Zuständen und solchen mit q Zuständen interpoliert werden. Explizit sieht die Modifikation des SW-Algorithmus wie folgt aus.

Nachdem in dem Algorithmus aus dem vorigen Abschnitt das Gitter in SW-Cluster zerlegt wurde, wird jedem Cluster ein neuer Spin zugewiesen. Jeder Spin $k \in \{1, \dots, q\}$ wird dabei mit derselben Wahrscheinlichkeit $p_k = \frac{1}{q}$ ausgewählt. Jetzt können die p_k jedoch unterschiedliche Werte haben, wobei diese von einem neuen Parameter $q' \in [q - 1, q]$ abhängig sind. Für $q' = q$ soll gelten $p_k = \frac{1}{q}$ für alle $k \in \{1, \dots, q\}$ und für $q' = q - 1$ soll $p_k = \frac{1}{q-1}$ sein, falls $k \in \{1, \dots, q - 1\}$ und $p_k = 0$, falls $k = q$. Dadurch sind die Konfigurationen des Modells für $q' \in (q - 1, q)$ nicht mehr nach dem kanonischen Ensemble verteilt und die Dynamik entspricht nicht mehr der des Potts-Modells. Durch das Lösen eines Optimierungsproblems können aber Ausdrücke für die p_k gefunden werden, sodass das Verhalten des Modells so gut wie möglich dem eines hypothetischen Potts-Modells mit q' Zuständen entspricht. Betrachte dazu ein Gitter, welches in n SW-Cluster zerlegt wurde. Die Wahrscheinlichkeit P_n , dass jedem Cluster derselbe Spinzustand zugewiesen wird ist $P_n = \sum_{k=1}^q p_k^n$. Im Standard Potts-Modell ist $p_k = \frac{1}{q}$ und damit $P_n = \sum_{k=1}^q p_k^n = q^{1-n}$. Ziel soll es sein, die Gleichung

$$\sum_{k=1}^n p_k^n = (q')^{1-n}$$

für so viele $n \in \mathbb{N}$ wie möglich simultan zu erfüllen. Es stellt sich aber heraus, dass die Gleichungen nicht gleichzeitig für $n = 1, 2$ und 3 exakt erfüllt werden können. Deshalb

4. Simulation des Modells am Computer

wird die Funktion

$$f(p_1, \dots, p_q) = \sum_{k=1}^q p_k^3 - \frac{1}{q'^2} \quad (4.4)$$

unter den Nebenbedingungen

$$g_1(p_1, \dots, p_q) = \sum_{k=1}^q p_k - 1 = 0 \quad (4.5)$$

und

$$g_2(p_1, \dots, p_q) = \sum_{k=1}^q p_k^2 - \frac{1}{q'} = 0 \quad (4.6)$$

mit der Methode der Lagrange-Multiplikatoren minimiert. Definiere die Funktion

$$F(p_1, \dots, p_q, \lambda_1, \lambda_2) = f(p_1, \dots, p_q) + \lambda_1 g_1(p_1, \dots, p_q) + \lambda_2 g_2(p_1, \dots, p_q)$$

mit den partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial F}{\partial p_k}(p_1, \dots, p_q, \lambda_1, \lambda_2) = 3p_k^2 + \lambda_1 + 2\lambda_2 p_k \stackrel{!}{=} 0, \quad k = 1, \dots, q \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_1}(p_1, \dots, p_q, \lambda_1, \lambda_2) = \sum_{k=1}^q p_k - 1 \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_2}(p_1, \dots, p_q, \lambda_1, \lambda_2) = \sum_{k=1}^q p_k^2 - \frac{1}{q'} \stackrel{!}{=} 0. \quad (4.9)$$

Summation über die partiellen Ableitungen nach den Wahrscheinlichkeiten p_k liefert

$$0 = \sum_{k=1}^q \frac{\partial F}{\partial p_k} = 3 \sum_{k=1}^q p_k^2 + q\lambda_1 + 2\lambda_2 \sum_{k=1}^q p_k = \frac{3}{q'} + q\lambda_1 + 2\lambda_2. \quad (4.10)$$

Dabei wurden im letzten Schritt die Nebenbedingungen Gln. 4.5 und 4.6 verwendet. Gl. 4.7 kann nach der Wahrscheinlichkeit p_k aufgelöst werden

$$p_k = -\frac{\lambda_2}{3} \pm \sqrt{\frac{\lambda_2^2}{9} - \frac{\lambda_1}{3}}$$

und mit Gl. 4.10 kann λ_1 eliminiert werden

$$p_k = -\frac{\lambda_2}{3} \pm \sqrt{\frac{\lambda_2^2}{9} + \frac{1}{qq'} - \frac{2\lambda_2}{3q}} = -\frac{\lambda_2}{3} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda_2}{3} + \frac{1}{q}\right)^2 + \frac{1}{q^2} \left(\frac{q}{q'} - 1\right)}.$$

4.4. Beschreibung des Programms

Da der letzte Zustand weniger wahrscheinlich sein soll als die ersten $q - 1$ Zustände wird für p_1, \dots, p_{q-1} der Ausdruck mit dem Plus- und für p_q der mit dem Minuszeichen gewählt. Natürlich muss dann $\lambda_2 < 0$ sein, damit p_q als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden kann. Dies wird nun in Gl. 4.8 eingesetzt

$$1 = \sum_{k=1}^q p_k = -q \frac{\lambda_2}{3} + (q-2) \sqrt{\left(\frac{\lambda_2}{3} + \frac{1}{q}\right)^2 + \frac{1}{q^2} \left(\frac{q}{q'} - 1\right)}$$

und nach λ_2 aufgelöst

$$\lambda_2 = -\frac{3}{q} \left(1 \pm \frac{q-2}{2} \sqrt{\frac{\frac{q}{q'} - 1}{q-1}} \right).$$

Damit die p_k als Wahrscheinlichkeiten interpretiert werden können, muss hier der Ausdruck mit dem Minuszeichen gewählt werden. Somit ist (vgl. [BB91, S. 8001])

$$p_k = \frac{1}{q} \left(1 + \sqrt{\left(\frac{q}{q'} - 1\right)(q-1)^{-1}} \right), \quad k = 1, \dots, q-1 \quad (4.11)$$

$$p_q = \frac{1}{q} \left(1 - \sqrt{\left(\frac{q}{q'} - 1\right)(q-1)} \right). \quad (4.12)$$

Wie gewünscht gilt für $q' = q$, dass $p_1 = \dots = p_q = \frac{1}{q}$ und für $q' = q - 1$ gilt $p_1 = \dots = p_{q-1} = \frac{1}{q-1}$ und $p_q = 0$. Dass es sich bei den gefundenen Wahrscheinlichkeiten tatsächlich um ein Minimum der Funktion f aus Gl. 4.4 handelt sieht man daran, dass die Nebendiagonalelemente der Hesse-Matrix $\frac{\partial^2 f}{\partial p_k \partial p_l}$ verschwinden und die Diagonalelemente $\frac{\partial^2 f}{\partial p_k^2} = 6p_k$ positiv sind.

4.4. Beschreibung des Programms

Das Programm zur Simulation des Standard Potts-Modells wurde in der Programmiersprache C++ verfasst. Als Eingabeparameter werden dem Programm die lineare Ausdehnung N und die Dimension d des Gitters, die Anzahl von Spinzuständen q und die effektive Zustandszahl $q' \in [q - 1, q]$, die Temperatur T , die Stichprobengröße n_m , die Thermalisierungszeit n_{th} , die Anzahl von Gitterupdates zwischen zwei Messungen n_{tot} und die Binggröße d übergeben. Die Kopplungskonstante J ist stets Eins. Bei Programmstart wird zunächst auf Grundlage der Parameter N und d ein hyperkubisches Gitter mit einer Startkonfiguration (vgl. 4.4.1) erzeugt und die Nachbarschaftsrelationen der Gitterpunkte abgespeichert (vgl. 4.4.2). Außerdem werden die q Spinvektoren s_1, \dots, s_q erstellt (vgl. 4.4.3). Anschließend wird das System mit n_{th} Gitter-Updates thermali-

4. Simulation des Modells am Computer

sirt (vgl. 4.4.1), um die korrekte Verteilung der Zustände zu garantieren. Die Updates werden dabei mit dem Algorithmus aus Abschnitt 4.3.3 durchgeführt. Befindet sich das System im Gleichgewicht, so werden n_m Messungen durchgeführt, wobei zwischen je zwei Messungen n_{tot} Gitter-Updates gemacht werden (vgl. 4.5.1). Abschließend werden die erhobenen Daten gesichert und mit der Grouped Jackknife Methode ausgewertet (vgl. 4.5.2). Abhängig von der Gittergröße liegt der Stichprobenumfang n_m zwischen 10.000 und 50.000.

4.4.1. Thermalisierung

Die Simulation des Systems kann wahlweise durch einen *Hot Start* oder einen *Cold Start* gestartet werden. Diese unterscheiden sich in der Startkonfiguration der Markov-Kette. Bei einem Hot Start wird jedem Gitterpunkt unabhängig zufällig ein Spinzustand zugewiesen. Dies entspricht einem Zustand des Systems bei sehr hohen Temperaturen. Bei einem Cold Start hingegen wird jedem Gitterpunkt derselbe Spinzustand zugewiesen, was einem Zustand des Systems bei der Temperatur $T = 0$ entspricht. Um das System nun für eine gegebene Temperatur T zu untersuchen, muss man es einem Wärmebad mit dieser Temperatur aussetzen und warten, bis sich das System im Gleichgewicht befindet. Für die Simulation bedeutet das, dass so lange Gitter-Updates durchgeführt werden, bis sich die Markov-Kette (näherungsweise) in ihrer stationären Verteilung befindet. Die Anzahl der Gitter-Updates, die durchgeführt werden müssen bis sich das System im Gleichgewicht befindet, ist abhängig von der Temperatur: In der Umgebung des kritischen Punktes dauert die Thermalisierung deutlich länger als für sehr hohe Temperaturen.

Um eine obere Grenze für die Thermalisierungszeit zu finden starte ich die Simulation mit einem Hot Start und betrachte den Absolutbetrag der Magnetisierung $\|s\|$ für eine Temperatur kurz unterhalb von T_C . Da sich das System für diese Temperatur in der Phase gebrochener Symmetrie befindet ist im Gleichgewicht $\|s\| \approx 1$ und wegen der Nähe des kritischen Punktes zeigt das System kritisches Verhalten, sodass die Thermalisierungszeit hier annähernd maximal ist. Das System ist thermalisiert, wenn sich der Wert von $\|s\|$ nicht mehr signifikant ändert. An Abb. 4.1 ist zu erkennen, dass für den SW-Algorithmus auf einem zweidimensionalen Gitter etwa 100 Gitterupdates zur Thermalisierung ausreichen. Für dreidimensionale Gitter wird dieser Wert höher sein. Ich habe in der Simulation stets $n_{th} = 5000$ gewählt.

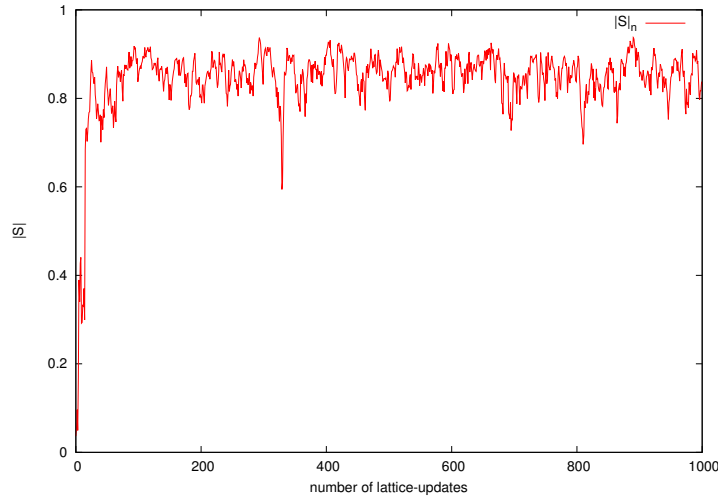


Abb. 4.1.: Absolutbetrag der Magnetisierung $\|s\|$ im Verlauf der Simulation für ein Gitter mit 32^2 Punkten.

4.4.2. Nachbarschaftsrelationen

Da ich ausschließlich quadratische Gitter in d Dimensionen mit periodischen Randbedingungen betrachte, lassen sich die Bedingungen für nächste Nachbarn leicht in vektorieller Notation darstellen. Es sei ein Punkt $x = \sum_{i=0}^{d-1} n_i e_i$ gegeben, wobei $n_i \in \{0, \dots, N-1\}$ und $e_i = (\delta_{ij})_{0 \leq j \leq d-1}$ die Standardbasisvektoren bezeichnen, $i = 0, \dots, d-1$. Dann ist die Menge der 2d nächsten Nachbarn von x gegeben durch $\{y = (x \pm e_j) \bmod N : j = 0, \dots, d-1\}$, wobei die Modulofunktion hier komponentenweise zu lesen ist. Die Spinzustände s_j der Gitterpunkte j werden in einer Liste der Größe N^d gespeichert und mit den Zahlen $0, \dots, N^d - 1$ indiziert. Das Gitter wird also als eindimensionales Array gespeichert $(s_0(\sigma), \dots, s_{N^d-1}(\sigma))$, welches bei jedem Durchlauf des Algorithmus aktualisiert wird. Die Spinzustände s_j werden dabei so sortiert, dass die Koeffizienten der Indizes zur Basis N gerade den Koordinaten der Gitterpunkte in der vektoriellen Darstellung entsprechen

$$j = \sum_{k=0}^{d-1} n_k N^k.$$

Somit erfolgt die Umrechnung von Index zu Koordinaten durch

$$n_0 = j \bmod N$$

4. Simulation des Modells am Computer

und

$$n_i = \left[\left(j - \sum_{k=0}^{i-1} n_k N^k \right) \bmod N^{i+1} \right] / N^i, \quad i = 1, \dots, d-1.$$

Um Rechenzeit zu sparen werden die Indizes der nächsten Nachbarn für jeden Gitterpunkt bei Programmstart einmal berechnet und in einer Liste L_{nn} der Größe $2dN^d$ abgespeichert, wobei die Plätze $(j2d, \dots, (j+1)2d-1)$ in L_{nn} die Indizes der nächsten Nachbarn des Gitterpunktes mit Index j enthalten.

Betrachte zum Beispiel ein zweidimensionales Gitter mit linearer Ausdehnung $N = 3$. Eine gegebene Konfiguration σ wird wie folgt gespeichert

$$\sigma = (s_0(\sigma), s_1(\sigma), s_2(\sigma), s_3(\sigma), s_4(\sigma), s_5(\sigma), s_6(\sigma), s_7(\sigma), s_8(\sigma)),$$

die Liste der nächsten Nachbarn lautet

$$L_{nn} = [(1, 2, 3, 6), (2, 0, 4, 7), (0, 1, 5, 8), \dots, (8, 6, 1, 4), (6, 7, 2, 5)],$$

wobei hier die Zahlen zur besseren Übersicht in Gruppen der Größe $2d$ unterteilt wurden. Die erste Gruppe enthält die Indizes der nächsten Nachbarn des Gitterpunktes 0, die zweite Gruppe die von Gitterpunkt 1 usw. Um im Laufe der numerischen Berechnungen z.B. die Energie einer Konfiguration zu bestimmen können die nächsten Nachbarn eines gegebenen Punktes direkt an L_{nn} abgelesen werden.

4.4.3. Spinvektoren

Wie in Abschnitt 3.2 erklärt können die q Spinzustände s_1, \dots, s_q als normierte symmetrische Achsen eines $q-1$ -dimensionalen Hypertetraeders interpretiert werden. Im Falle $q = 2$ sind dies gerade die Zahlen $s_1 = -1$ und $s_2 = 1$. Ausgehend von diesen können die Vektoren s_i für beliebige $q \in \mathbb{N}$ induktiv bestimmt werden, wobei dem Algorithmus die Beobachtung zugrunde liegt, dass die $(d-1)$ -dimensionalen Hyperflächen des d -dimensionalen Hypertetraeders $(d-1)$ -dimensionale Hypertetraeder sind (vgl. auch Abb. 3.1). Das heißt die Kanten eines gleichseitigen Dreiecks sind Geradenabschnitte, die Flächen eines regulären Tetraeders sind gleichseitige Dreiecke usw.

Gegeben seien die Vektoren s_1, \dots, s_q mit $\langle s_i, s_i \rangle = 1$ und $\langle s_i, s_j \rangle = -\frac{1}{q-1}$ für $i \neq j$. Aufgrund der Symmetrie des Hypertetraeders gilt

$$\sum_{i=1}^q s_i = 0. \tag{4.13}$$

4.4. Beschreibung des Programms

Sei nämlich

$$X : \{1, \dots, q\} \rightarrow \{s_1, \dots, s_q\}, i \mapsto s_i$$

eine gleichverteilte Zufallsvariable, also $\mathbb{P}(X = s_i) = \frac{1}{q}$ und $A : \mathbb{R}^{q-1} \rightarrow \mathbb{R}^{q-1}$ eine nicht-triviale Symmetrie des Hypertetraeders. Aufgrund der Linearität des Erwartungswertes gilt $\mathbb{A}\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}[AX] = \mathbb{E}[X]$, also ist $(A - I)\mathbb{E}[X] = 0$, wobei I die Identität ist. Da $(A - I)$ eine Symmetrie des Hypertetraeders ist und $\det(A - I) \neq 0$, folgt $\mathbb{E}[X] = 0$.

Ausgehend von s_1, \dots, s_q werden die neuen Magnetisierungsvektoren t_1, \dots, t_{q+1} folgendermaßen bestimmt:

Zunächst wird die Inklusion

$$I : \mathbb{R}^{q-1} \rightarrow \mathbb{R}^q, \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{q-1} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{q-1} \\ 0 \end{pmatrix}$$

auf die Vektoren s_1, \dots, s_q angewandt, sodass $s'_i = I(s_i) = (s_i^T, 0)^T$ und es wird $t_{q+1} = (0, \dots, 0, 1)^T$ gesetzt. Nun werden die Vektoren s'_1, \dots, s'_q um eine Zahl α entlang der e_q -Achse verschoben, sodass das Zentrum des neuen Hypertetraeders auf den Ursprung fällt, und um einen Faktor κ reskaliert, $s'_i \mapsto t_i = \kappa(s_i^T, -\alpha)^T$, $i = 1, \dots, q$. Es gilt

$$1 = \|t_i\|^2 = \kappa^2(s_i^2 + \alpha^2) = \kappa^2(1 + \alpha^2)$$

und damit ist $\kappa = \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}}$. Um α zu bestimmen kann man sich dasselbe Symmetrieargument wie oben zu Nutze machen. Es gilt

$$0 = \sum_{i=1}^{q+1} t_i = \left(\sum_{i=1}^q s_i^T, 1 - q \frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}} \right) = \left(0, 1 - q \frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}} \right),$$

und damit ist

$$\frac{1}{q} = \frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}},$$

4. Simulation des Modells am Computer

dh. $\alpha = \frac{1}{\sqrt{q^2-1}}$ und $\kappa = \sqrt{1 - \frac{1}{q^2}}$. Damit sind die neuen Vektoren gegeben durch

$$t_i = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{1}{q^2}} s_i \\ -\frac{1}{q} \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, q$$
$$t_{q+1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Als Beispiel möchte ich ausgehend von $s_1 = -1$ und $s_2 = 1$ die Vektoren t_1, t_2 und t_3 bestimmen. Zunächst setze ich $s'_1 = I(-1) = (-1, 0)^T$, $s'_2 = (1, 0)^T$ und $t_3 = (0, 1)^T$. Anschließend werden s'_1 und s'_2 um α verschoben und mit κ reskaliert, dh.

$$t_1 = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(2\pi/3) \\ \cos(2\pi/3) \end{pmatrix},$$
$$t_2 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(2\pi/3) \\ \cos(2\pi/3) \end{pmatrix},$$
$$t_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

4.5. Fehleranalyse

4.5.1. Autokorrelationszeit

Dieser Abschnitt richtet sich nach [LB14].

Um Gl. A.2 zur Bestimmung des Fehlers des Stichprobenmittels anwenden zu können müssen die Zufallsvariablen unabhängig sein. Dies ist bei Markov-Ketten nicht gegeben, da die Verteilung einer Zufallsvariablen X_i in der Kette von der Verteilung der vorhergehenden Variablen X_{i-1} abhängig ist. Eine Möglichkeit, die Korrelation der Messdaten so gering wie möglich zu halten ist, nur jedes m -te Glied der Kette als Messung zu akzeptieren und alle vorhergehenden Kettenglieder zu verwerfen. Das bedeutet, dass bei n durchgeführten Gitterupdates effektiv nur $\frac{n}{m}$ unabhängige Messungen gemacht werden. Natürlich möchte man m so klein wie möglich wählen, um unnötige Rechenzeit zu sparen. Die Korrelation zwischen den erzeugten Konfigurationen ist besonders groß am kritischen Punkt, da hier die Korrelationslänge ξ divergiert. Es müssen sehr viele Gitterupdates durchgeführt werden um zwei unabhängige Messungen zu erhalten. Dieses Phänomen wird als Critical Slowing Down bezeichnet. Man kann für die Korrelation der Glieder

der Markov-Kette im Gleichgewicht analog zu Gl. 2.7 eine *zeitliche Korrelationsfunktion* aufstellen

$$\Phi(t) = \langle M(t_0)M(t_0 + t) \rangle - \langle M(t_0) \rangle \langle M(t_0 + t) \rangle.$$

Hier ist die Zeit t diskret und bezeichnet den Index der Glieder der Markov-Kette. Das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktion ist ebenfalls exponentiell

$$\Phi(t) \sim e^{-t/\tau},$$

die Größe τ wird *Autokorrelationszeit* genannt. Zwei Messungen können als unabhängig betrachtet werden, wenn $m = \tau$ gewählt wird, wenn also nur jedes τ -te Glied der Kette gemessen wird. Die Autokorrelationszeit divergiert am kritischen Punkt und es gilt

$$\tau \sim \xi^z. \tag{4.14}$$

z heißt *dynamischer* kritischer Exponent und ist im Gegensatz zu den in Abschnitt 2.2 eingeführten kritischen Exponenten abhängig von dem verwendeten Algorithmus. Beispielsweise gilt für den Metropolis-Algorithmus bei dem zweidimensionalen Ising-Modell [NB99] $z_{Metro} = (2.167 \pm 0.001)$, wohingegen bei dem gleichen Modell mit dem SW-Algorithmus gilt $z_{SW} = (0.25 \pm 0.01)$ (die Literatur ist hier nicht eindeutig, beispielsweise findet man in [SW87] $z_{Metro} = 2.125$ und $z_{SW} = 0.35$). Für endliche Systeme kann man in der Nähe der kritischen Temperatur $\tau \sim L^z$ annehmen, wobei L die lineare Ausdehnung des Systems ist. Wird also ein Gitter mit 100×100 Punkten simuliert, müssen beim Metropolis-Algorithmus $100^{2.167} \approx 21.600$ Updates durchgeführt werden um zwei unabhängige Messungen zu erhalten, wohingegen beim SW-Algorithmus nur $100^{0.25} \approx 3$ Updates durchgeführt werden müssen.

Der Parameter n_{tot} des Programms gibt an, wie viele Gitter-Updates zwischen je zwei Messungen durchgeführt werden. Um die Korrelation der Daten gering zu halten habe ich stets $n_{tot} = 50$ gesetzt.

4.5.2. Jackknife, Bingröße

Wie in Anhang A.4 erklärt wird, können mit der Jackknife-Methode auf Grundlage von abhängigen Zufallsvariablen neue Zufallsvariable definiert werden, die als unabhängig betrachtet werden, vergleiche Gl. A.5. Dadurch ist es sehr leicht, den Fehler der Messungen zu bestimmen, vergleiche Gl. A.6. Dies ist besonders dann von Vorteil, wenn sich der Fehler der Observable von Interesse nur sehr schwer oder aufgrund von abhängigen Variablen gar nicht berechnen lässt. Bei der Grouped Jackknife Methode sinkt

4. Simulation des Modells am Computer

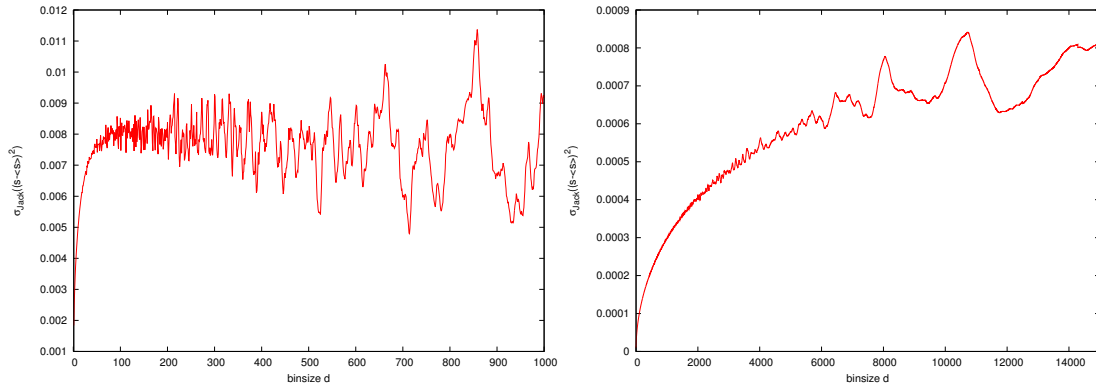


Abb. 4.2.: Jackknife-Fehler für den SW-Algorithmus (links) mit $n_m = 10.000$ und den Metropolis-Algorithmus (rechts) mit $n_m = 1.000.000$.

die tatsächliche Korrelation der neuen Zufallsvariablen mit wachsender Binggröße. Die ideale Binggröße kann man bestimmen, indem man den Jackknife-Fehler σ_{Jack} gegen die Binggröße plottet. Dieser steigt zunächst an, bis ein Plateau erreicht wird und der Fehler konstant bleibt. Die ideale Binggröße ist dann diese, bei der das Plateau beginnt. Zu beachten ist, dass nach der Definition aus Anhang A.4 nur solche Binggrößen d zugelassen sind, die echte Teiler der Stichprobengröße n sind. Um beliebige Binggrößen $d < n$ zulassen zu können, muss das Verfahren leicht modifiziert werden: Für alle $d \in \mathbb{N}$, $d < n$ gibt es $0 \leq r < d$, sodass $n = md + r$. Für $r \neq 0$ wird die Stichprobe in $m + 1$ Gruppen unterteilt, die ersten m davon jeweils mit d aufeinanderfolgenden Datenpunkten und die letzte bestehend aus den letzten r Daten. Daraufhin werden $m + 1$ Statistiken berechnet, wobei jeweils eine der $m + 1$ Gruppen an Daten weggelassen wird.

Ist beispielsweise die Stichprobe gegeben durch $(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5)$ und wird $d = 2$ gewählt, so ist die erste Gruppe (X_1, X_2) , die zweite Gruppe (X_3, X_4) und die dritte Gruppe (X_5) . Die drei Statistiken werden dann berechnet aus den Daten (X_3, X_4, X_5) , (X_1, X_2, X_5) und (X_1, X_2, X_3, X_4) . An Abb. 4.2 links ist zu sehen, dass die Gruppen mindestens den Umfang $d = 100$ haben sollten, größere Gruppen führen zu kürzerer Rechenzeit. Für alle meine Messungen habe ich $d = 500$ gesetzt. Zum Vergleich ist in Abb. 4.2 rechts der Jackknife-Fehler für den Metropolis-Algorithmus zu sehen. Der Fehler ist hier um den Faktor 10 kleiner, da die Stichprobe 100 mal so groß ist wie in Abb. 4.2 links. Der Fehler wächst hier weiter, das Plateau wurde noch nicht erreicht. In beiden Abbildungen wurde die Messung an der kritischen Temperatur durchgeführt. Die Oszillationen im Fehler treten auf, wenn die Binggröße d kein echter Teiler der Stichprobengröße n_m ist.

5. Auswertung

Da das Programm nun im Detail vorgestellt wurde, werden in diesem Kapitel die Daten der Simulation ausgewertet. In Abschnitt 5.1 wird untersucht, ob das Modell aus Abschnitt 4.3.3 korrekt zwischen Potts-Modellen mit ganzzahligem q interpoliert und in Abschnitt 5.2 wird der kritische Punkt $q_C(3)$ aus Abb. 3.2 ausgemessen.

Die Simulation wurde durchgeführt auf einem *Samsung Notebook Serie 3 305E5A-A01DE*. Dieser verfügt über einen AMD dual-core Prozessor mit 2x1.9 GHz und 4 GB Arbeitsspeicher.

5.1. Dynamik des Modells in zwei Dimensionen

Zunächst muss geprüft werden, ob das Modell, welches durch den Algorithmus aus Abschnitt 4.3.3 beschrieben wird, dieselbe Dynamik aufweist wie ein Standard Potts-Modell mit q' Zuständen. Das ist klar für $q' = q$ und $q' = q - 1$, es muss also noch das Verhalten der Systeme für nicht ganzzahlige $q' \in (q - 1, q)$ untersucht werden. In zwei Dimensionen kann die kritische Temperatur analytisch bestimmt werden (vgl. Gl. 3.4), verhält sich das effektive Modell wie ein zweidimensionales Potts-Modell mit q' Zuständen, so muss gelten

$$T_c(q') = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{q'})}.$$

Dies ist selbstverständlich kein Beweis dafür, dass das Modell die korrekte Dynamik besitzt, aber zumindest ein guter Indikator. Die Auswertung wird durch ein Verfahren der *Monte-Carlo-Renormierungsgruppe* durchgeführt (vgl. [BB91], [PSWW84]): Dieses beruht auf der Tatsache, dass die Korrelationslänge ξ am kritischen Punkt divergiert. Es werden zwei Gitter L_d^l und L_d^s mit linearer Ausdehnung $N_s = 2^k$ und $N_l = 2^{k+m}$ generiert, $k, m \in \mathbb{N}$. Für eine gegebene Konfiguration σ auf einem Gitter L der Größe N^d wird eine renormierte Konfiguration $\sigma^{(1)}$ auf einem Gitter $L^{(1)}$ der Größe $(N/2)^d$ definiert, indem L in Blöcke der Größe 2^d aus benachbarten Gitterpunkten unterteilt und jeder dieser Blöcke in $\sigma^{(1)}$ durch einen repräsentativen Spin $s^{(1)}$ dargestellt wird, welcher nach einer Häufigkeitsregel ausgewählt wird: Der Repräsentant $s_i^{(1)}$ in $\sigma^{(1)}$ ent-

5. Auswertung

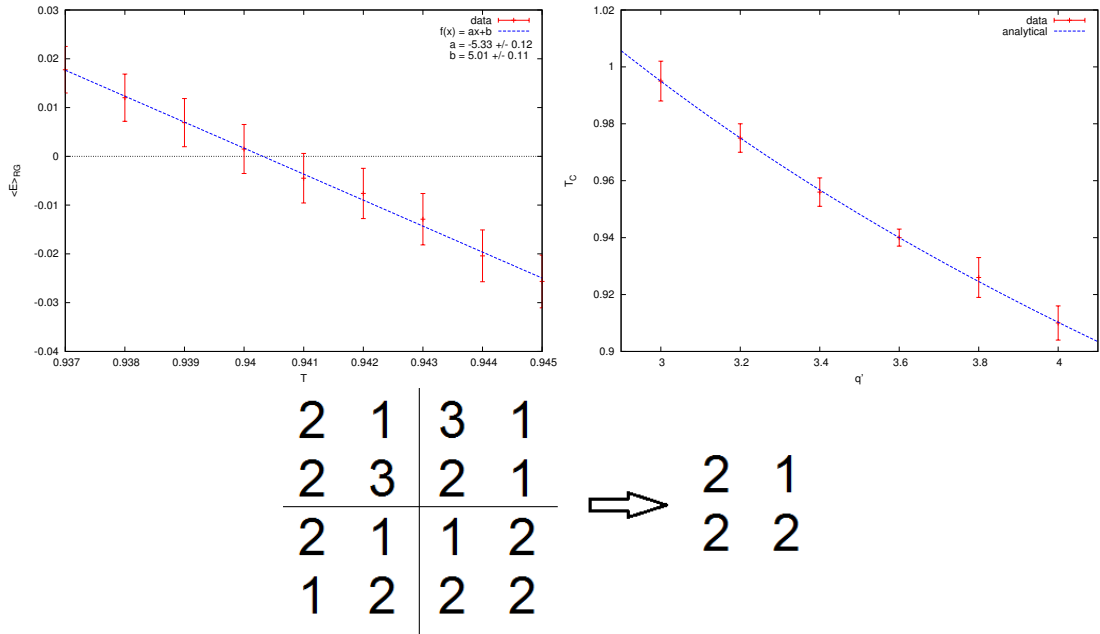


Abb. 5.1.: Lineare Regression von $\langle E \rangle_{RG}$ für $q' = 3.6$ (oben links) und kritische Temperatur in zwei Dimensionen für $q = 4$ (oben rechts). Beispiel für Renormierung eines 4^2 -Gitters mit $q = 3$ (unten), links die Konfiguration σ und rechts die renormierte Konfiguration $\sigma^{(1)}$.

spricht dem Spinzustand, der in dem Block $(s_i, s_{i+1}, s_{i+N}, s_{i+N+1}, \dots, s_{i+N^{d-1}}, s_{i+N^{d-1}+1})$ am häufigsten vertreten ist. Ist dieser nicht eindeutig, so wird zufällig einer der häufigsten Zustände ausgewählt. Anschließend wird der Vorgang für ein Gitter $L^{(2)}$ der Größe $(N/4)^d$ wiederholt usw. (vgl. Abb. 5.1 unten)

Dieses Verfahren wird für das kleine Gitter L_d^s n -mal und für das große Gitter L_d^l $n + m$ -mal wiederholt. Die renormierten Gitter $(L_d^l)^{(n+m)}$ und $(L_d^s)^{(n)}$ haben dieselbe Größe N_r^d mit $N_r = 2^{k-n}$. $\langle A \rangle_l^{(n+m)}$ bezeichne den Erwartungswert einer Observablen A auf dem Gitter $(L_d^l)^{(n+m)}$ und $\langle A \rangle_s^{(n)}$ den Erwartungswert der Observablen auf dem Gitter $(L_d^s)^{(n)}$. Die kritische Temperatur T_c ist dann der Punkt, für den $\langle A \rangle_l^{(n+m)}(T_c) = \langle A \rangle_s^{(n)}(T_c)$ gilt. Da die Gitter $(L_d^l)^{(n+m)}$ und $(L_d^s)^{(n)}$ von derselben Größe sind, sollten sich in $\langle A \rangle_{RG} = \langle A \rangle_l^{(n+m)} - \langle A \rangle_s^{(n)}$ Finite-Size-Effects aufheben. Die Güte der Messergebnisse steigt mit der Größe der ursprünglichen Gitter L_d^l und L_d^s und der Anzahl der Iterationsschritte n .

Als Observable habe ich die mittlere Energie $\langle E \rangle$ des Gitters gemessen und gegen die Temperatur T aufgetragen. In der Nähe des Nulldurchgangs der Kurven habe ich die Messdaten mit linearer Regression gefittet und so die Temperatur bestimmt, für die

5.2. Bestimmung des trikritischen Punktes in drei Dimensionen

$\langle E \rangle^{(n+m)}(T) - \langle E \rangle^{(n)}(T) = 0$ ist.

Als Beispiel sind in Abb. 5.1 links die Daten und der lineare Fit für $q' = 3.6$ zu sehen. Für die Messung wurde $N_s = 2^3$ und $N_l = 2^4$ gewählt und die Gitter wurden 2 bzw. 3 mal renormiert. Abb. 5.1 rechts zeigt die kritischen Temperaturen für verschiedene Werte von q' zwischen 3 und 4, die mit diesem Verfahren bestimmt wurden. Die Fehler auf die Daten sind die Fehler der linearen Regression, wobei diese um den Faktor 10 verkleinert wurden. Zum Vergleich wurde die Kurve $T_C = \frac{1}{\ln(1+\sqrt{q'})}$ mit eingezeichnet. Wie zu sehen ist, stimmen die Daten sehr gut mit den analytischen Werten überein.

5.2. Bestimmung des trikritischen Punktes in drei Dimensionen

Da nun nachgewiesen wurde, dass das Modell in zwei Dimensionen die korrekte Dynamik aufweist, soll jetzt der kritische Wert $q_C(3)$ gefunden werden, an dem der Phasenübergang in drei Dimensionen die Ordnung ändert. Dazu mache ich mir das Skalenverhalten der Suszeptibilität zu nutze. Wie in Abschnitt 2.3 erklärt wurde, gilt für die Suszeptibilität bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung am pseudokritischen Punkt $\chi \sim L^{\gamma/\nu}$ und bei einem Phasenübergang erster Ordnung gilt $\chi \sim L^d$. Die kritischen Exponenten des dreidimensionalen Ising-Modells auf einem kubischen Gitter lauten (vgl. [KS95])

$$\alpha = 0.108 \quad \beta = 0.327 \quad \gamma = 1.237 \quad \delta = 4.77 \quad \eta = 0.039 \quad \nu = 0.631.$$

Für das dreidimensionale Standard Potts-Modell mit $q = 2$ skaliert die Suszeptibilität am kritischen Punkt also mit dem Exponenten $\frac{\gamma}{\nu} \approx 1.963$ und für das entsprechende Modell mit $q = 3$ skaliert die Suszeptibilität wie $\chi \sim L^d$ mit $d = 3$. Um den trikritischen Punkt zu finden, wird der Skalenexponent b von $\chi \sim L^b$ gegen q' aufgetragen für $2 \leq q' \leq 3$. Da die Gitter endlich sind, wird diese Kurve stetig von $b(2) = 1.963$ zu $b(3) = 3$ ansteigen. Der trikritische Punkt $q'_C = q_C(3)$ ist dann der Wert, für den die Steigung von b maximal ist.

Zunächst möchte ich aber verifizieren, dass die Simulation für $q = 2$ einen Phasenübergang zweiter Ordnung und für $q = 3$ einen Phasenübergang erster Ordnung durchläuft. Wie in Abschnitt 3.3 erklärt wurde ist die mittlere Magnetisierung

$$s = \frac{1}{N^d} \sum_{i=1}^{N^d} s_i$$

5. Auswertung

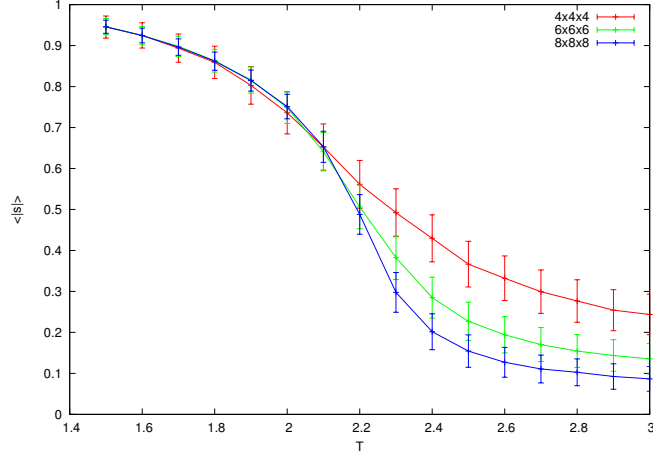


Abb. 5.2.: Absolutbetrag der Magnetisierung $\|s\|$ für verschiedene Gittergrößen

der Ordnungsparameter des Systems. Aufgrund der Symmetrie des Systems ist aber auch für $T < T_C$ das Stichprobenmittel $\bar{s} = 0$. Dies liegt in der Architektur des SW-Algorithmus begründet. In der Phase gebrochener Symmetrie wird spontan einer der Spinzustände $1, \dots, q$ bevorzugt. Das simulierte System bleibt aber nicht in diesem Zustand, sondern wechselt zwischen den q Spinzuständen. Befindet sich das System z.B. für $T \approx 0$ in dem Zustand mit $s_i = 1$ für alle $i = 0, \dots, N^d - 1$, so wird mit hoher Wahrscheinlichkeit genau ein SW-Cluster konstruiert, welches das gesamte Gitter umfasst und mit Wahrscheinlichkeit $p = \frac{q-1}{q} \geq \frac{1}{2}$ wird das Gitter in einen anderen Spinzustand gedreht. Jeder der Zustände $1, \dots, q$ ist somit in der Simulation etwa gleich oft vertreten und das Stichprobenmittel verschwindet, vergleiche auch das Symmetrieargument Gl. 4.13. Die Größe s ist also in der Simulation nicht geeignet um den Phasenübergang zu untersuchen. Stattdessen kann aber der Absolutbetrag der Magnetisierung

$$\|s\| = \frac{1}{N^d} \left\| \sum_{i=1}^{N^d} s_i \right\|$$

untersucht werden (vgl. Abb. 5.2). Dieser ist Null für $T > T_C$ und von Null verschieden für $T < T_C$ und damit ebenfalls ein Ordnungsparameter des Systems und diese Eigenschaft überträgt sich auf das Stichprobenmittel. Die kritische Temperatur ist der Wert, an dem die Steigung von $\|s\|$ maximal ist.

Die *echte* Suszeptibilität [LB14, S. 81]

$$\chi = \frac{N^d}{T} (\langle \|s\|^2 \rangle - \|\langle s \rangle\|^2),$$

5.2. Bestimmung des trikritischen Punktes in drei Dimensionen

d.h. die Ableitung des Ordnungsparameters $\langle s \rangle$ nach dem externen Feld H , ist für die Bestimmung der kritischen Exponenten in der Simulation ebenfalls nicht besonders gut geeignet. Da $\bar{s} = 0$, ist $\chi \approx N^d \langle \|s\|^2 \rangle$ und diese Größe besitzt keinen Peak bei T_C , die kritische Temperatur muss also anderweitig bestimmt werden. Zudem sind die pseudokritischen Temperaturen $T_C(L)$, bei denen das Skalenverhalten untersucht werden soll, von der tatsächlichen kritischen Temperatur T_C verschieden, vgl. Gl. 2.12. Deutlich besser geeignet ist die Größe

$$\chi' = \frac{N^d}{T} (\langle \|s\|^2 \rangle - \langle \|s\| \rangle^2).$$

Dabei handelt es sich um die Fluktuationen von $\|s\|$. In [LB14] wird sie als „finite-lattice susceptibility“ bezeichnet (vgl. [LB14, S. 81]), in dieser Arbeit soll sie *modifizierte* Suszeptibilität heißen. Diese Größe nimmt bei der pseudokritischen Temperatur ihr Maximum an, $T_C(L)$ kann also an der Kurve abgelesen werden. Da χ' dasselbe Skalenverhalten aufweist wie χ , kann man die Werte $\chi'(T_C(L))$ gegen L auftragen und durch einen Fit an die Funktionenklasse $f_{a,b}(L) = aL^b$ den Skalensexponenten b bestimmen.

Um nun die Ordnung des Phasenübergangs für $q = 2$ und $q = 3$ zu bestimmen, habe ich zunächst die modifizierte Binder Kumulante

$$B_4 = 3(1 - U_4) = \frac{\langle \|s - \langle s \rangle\|^4 \rangle}{\langle \|s - \langle s \rangle\|^2 \rangle^2}$$

gegen die Temperatur aufgetragen. Für $T \rightarrow 0$ geht $B_4 \rightarrow 1$ und für $T \rightarrow \infty$ geht $B_4 \rightarrow 3$. Die Steigung der Kurve nimmt mit wachsender Systemgröße zu und nähert sich einer Stufenfunktion an. Die Kurven unterschiedlicher Systemgrößen schneiden sich alle in einem Punkt, welcher von der Systemgröße unabhängig ist. Dies ist gerade die kritische Temperatur T_C . Für $q' = 2$ erhalte ich dadurch den Wert $T_C = (2.25 \pm 0.01)$ (vgl. Abb. 5.3 oben links) und für $q' = 3$ erhalte ich $T_C = (1.8165 \pm 0.0005)$ (vgl. Abb. 5.3 oben rechts). Diese stimmen gut mit den Literaturwerten überein. Die kritische Temperatur des dreidimensionalen Ising-Modells (mit entsprechender Kopplungskonstante) liegt bei $T_{C,lit.} = (2.25579 \pm 0.00003)$ [BGHP92] und die des dreidimensionalen Potts-Modells mit $q = 3$ bei $T_{C,lit.} = (1.8163160 \pm 0.0000003)$ [JV97].

5. Auswertung

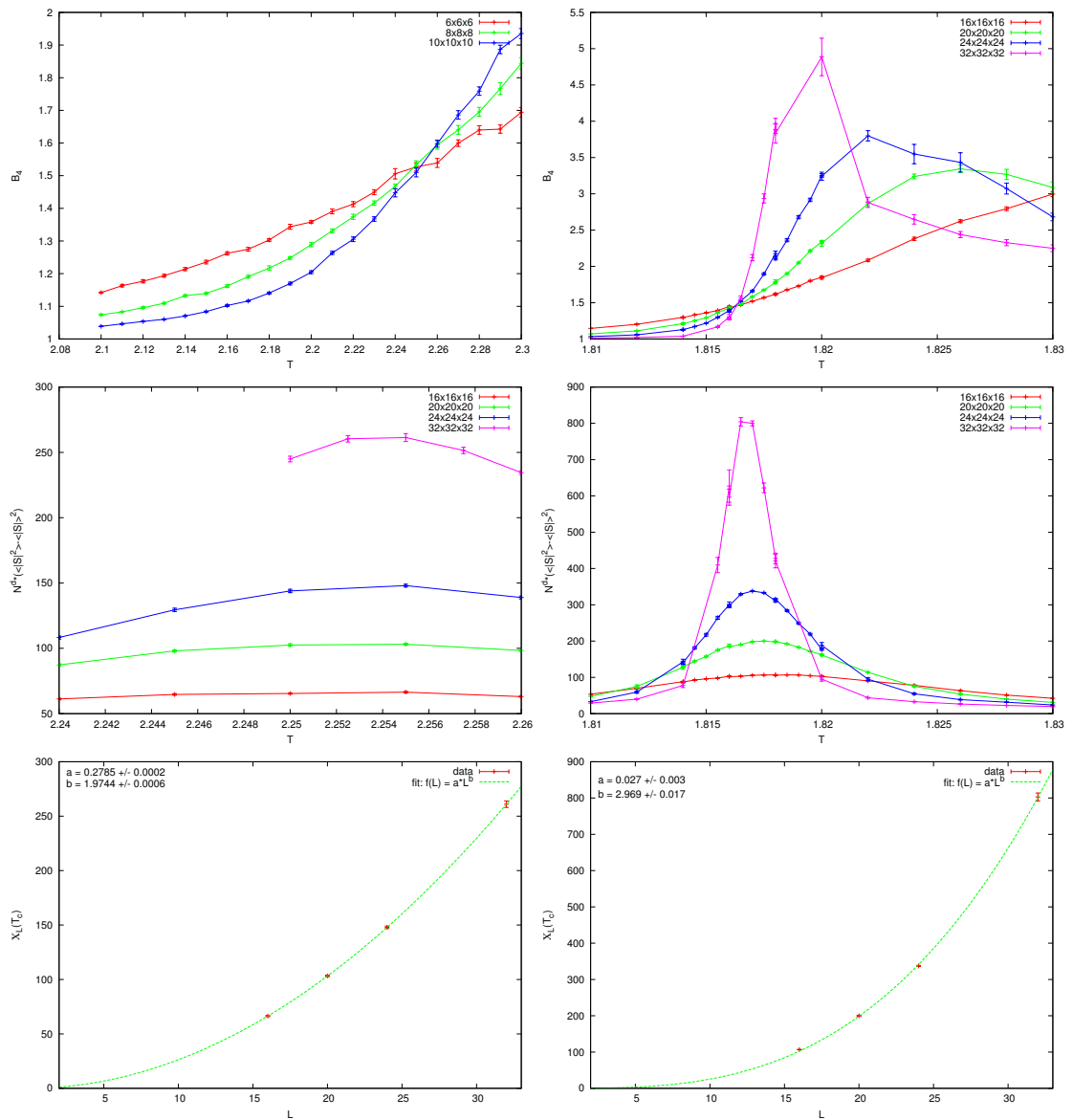


Abb. 5.3.: Binder Kumulante B_4 (oben), modifizierte Suszeptibilität χ' (mitte) und Fit der Maxima $\chi'_L(T_C)$ (unten) für $(q, q') = (2, 2)$ und $(q, q') = (3, 3)$.

5.2. Bestimmung des trikritischen Punktes in drei Dimensionen

Anschließend habe ich in einer näheren Umgebung der kritischen Temperatur χ' untersucht (eigentlich wurde hier die Größe $\chi'T = N^d(\langle \|s\|^2 \rangle - \langle \|s\| \rangle^2)$ untersucht, diese hat aber dasselbe Skalenverhalten wie χ') und die Maxima $\chi'_{max}(L)$ gegen L gefittet wie oben beschrieben (Abb. 5.3 mitte). Für den Skalenexponenten erhalte ich dadurch für $q = 2$ den Wert $b = (1.9744 \pm 0.0006)$ (Abb. 5.3 unten links) und für $q = 3$ erhalte ich $b = (2.969 \pm 0.017)$ (Abb. 5.3 unten links). Diese Werte stimmen gut mit den erwarteten Werten $b = 1.963$ bzw. $b = 3$ überein, obwohl der Fehler auf den ersten Exponenten unrealistisch klein ist. Um den Fehler auf den Exponenten b zu bestimmen, habe ich den Fit ein zweites Mal unter Ausschluss des Datenpunktes des kleinsten Gitters durchgeführt und die Exponenten b_1 und b_2 der beiden Fits voneinander abgezogen. Dieser Wert $\Delta b = |b_1 - b_2|$ liefert eine Abschätzung dafür, wie sich die endlichen Gittergrößen auf den Wert des Skalenexponenten auswirken. Der in den Grafiken angegebene Fehler ist das Maximum von Δb und dem Fehler aus dem Fit selbst.

In Abb. 5.3 oben rechts fällt auf, dass die Binder Kumulante für das 32^3 -Gitter zwischenzeitlich Werte deutlich über 3 annimmt, bevor die Kurve wieder abfällt. Für die Binder Kumulante B_4 findet man in der Literatur auch die Bezeichnung *Kurtosis* (vgl. z.B. [CS11, S. 8]), welche ein Maß für die Abweichung der Breite der Verteilung von der Normalverteilung ist (obwohl auch das vierte zentrierte Moment μ_4 selbst teilweise als Kurtosis bezeichnet wird, die Nomenklatur scheint hier nicht eindeutig zu sein). Qualitativ kann man das Verhalten der Binder Kumulanten folgendermaßen erklären. Für hohe Temperaturen ist die mittlere Magnetisierung s nach einer im Ursprung zentrierten Gaußverteilung verteilt, für tiefe Temperaturen jedoch bilden sich drei markante Peaks an den Punkten der drei Spinvektoren aus und am Ursprung ist die Verteilung annähernd Null. Wird die Temperatur nun ausgehend von einem hohen Wert abgesenkt, so bilden sich an der Verteilung in Richtung der Spinvektoren langsam Ausstülpungen aus, die mit sinkender Temperatur immer stärker werden. Wölben sich nun die Seiten dieser vage an ein Dreieck erinnernden Verteilung nach innen (wodurch die Verteilung der Projektion eines hyperbolischen Dreiecks ähnelt), so führt dies zu großen Werten der Binder Kumulante.

Die Simulation gibt also das Verhalten der Potts-Modelle für $q = 2$ und $q = 3$ korrekt wieder, also können nun die modifizierten Modelle für $q = 3$ und $2 \leq q' \leq 3$ untersucht werden, um den kritischen Wert $q_C(3)$ zu bestimmen. Es stellt sich jedoch heraus, dass für $q' \neq q$ obiges Verfahren nicht angewendet werden kann, da in diesem Fall χ' mit einem anderen Exponenten skaliert als χ . Als Beispiel ist in Abb. 5.4 oben χ' und der Fit der Peaks $\chi'_L(T_C)$ für $q = 3$ und $q' = 2$ zu sehen. Laut der Grafik ist der Skalen-

5. Auswertung

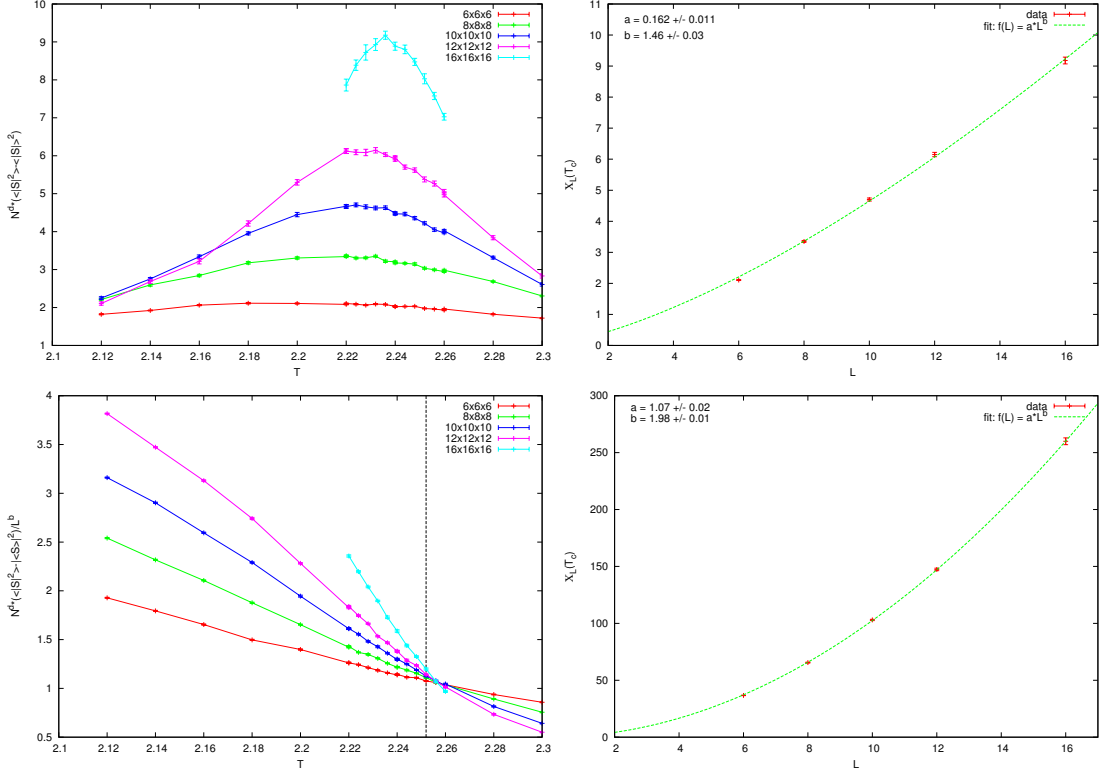


Abb. 5.4.: Modifizierte Suszeptibilität χ' und Fit der Maxima $\chi'_L(T_C)$ (oben) und echte Suszeptibilität χ (mit L^b reskaliert) und Fit der kritischen Werte $\chi(T_C)$ (unten) für $(q, q') = (3, 2)$.

exponent $b = (1.46 \pm 0.03)$, obwohl er, wie bereits gezeigt, bei 1.963 liegen sollte. Zu diesem Zeitpunkt ist mir nicht klar, was die Ursache für das Skalenverhalten von χ' ist, mögliche Gründe und Lösungsansätze werden in Abschnitt 6.4 diskutiert.

Um also die kritischen Exponenten der Modelle mit $2 \leq q' < 3$ bestimmen zu können, muss das Skalenverhalten der echten Suszeptibilität χ untersucht werden. Dazu habe ich wieder für verschiedene Werte von $q' \in [2, 3]$ mit Hilfe der Binder Kumulante die kritische Temperatur bestimmt, jetzt aber die Werte der echten Suszeptibilität $\chi(T_C)$ bei dieser Temperatur gegen die Gittergröße L gefittet. Es sei noch einmal bemerkt, dass diese Vorgehensweise weniger akkurat ist, da die Suszeptibilität nicht an der tatsächlichen kritischen Temperatur T_C , sondern nur an der pseudokritischen Temperatur $T_C(L)$ das korrekte Skalenverhalten aufweist. Trotzdem liefert dieses Vorgehen recht gute Ergebnisse. Für $q' = 2$ erhalte ich dadurch den Skalenexponenten $b = 1.98 \pm 0.01$ (vgl. Abb. 5.4 unten), was sehr gut mit dem Literaturwert $b = 1.963$ übereinstimmt. Abb. 5.5

5.2. Bestimmung des trikritischen Punktes in drei Dimensionen

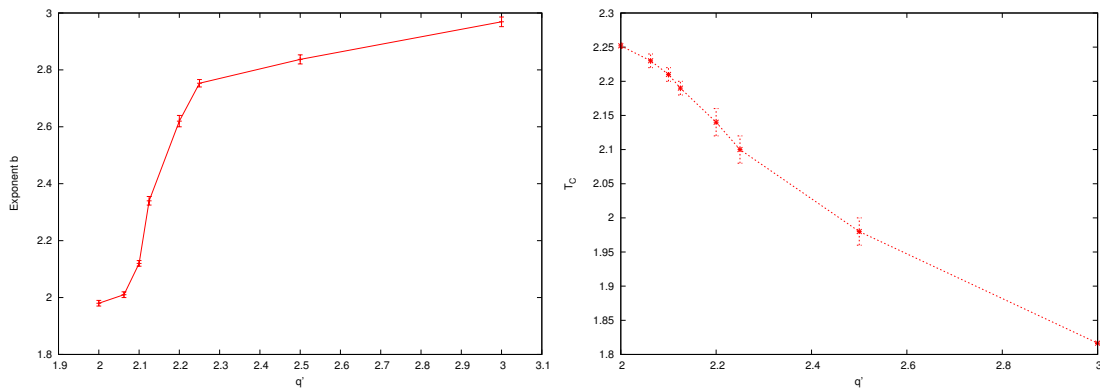


Abb. 5.5.: Skalensexponent b in Abhängigkeit von q' (links) und kritische Temperatur für $2 \leq q' \leq 3$ (rechts).

links zeigt die mit der echten Suszeptibilität ermittelten Exponenten b für verschiedene Werte von q' zwischen 2 und 3. Für $q' = 3$ habe ich den Wert genommen, der oben mit χ' ermittelt wurde. Auf Grundlage dieser Daten ist davon auszugehen, dass der kritische Wert $q_C(3)$ zwischen $q' = 2.1$ und $q' = 2.25$ liegt.

In Abb. 5.5 rechts ist die kritische Temperatur gegen q' aufgetragen. Da mir aber für die nichtganzzahligen q' keine Vergleichswerte für $T_C(q')$ vorliegen, kann ich keine Aussage über die Genauigkeit dieser Ergebnisse treffen.

6. Einordnung der Arbeit und Ausblick

Dieses Kapitel dient neben der Einordnung der Ergebnisse in Abschnitt 6.1 auch dazu Themen anzusprechen, die sich nur teilweise mit der Aufgabenstellung dieser Arbeit überschneiden. In Abschnitt 6.2 wird der Algorithmus von Wolff vorgestellt und erklärt, warum dieser nicht mit dem Modell aus Abschnitt 4.3.3 verträglich ist. Abschnitt 6.3 beschäftigt sich mit dem Zusammenhang des dreidimensionalen Potts-Modells mit der Gitter-QCD. Der letzte Abschnitt 6.4 liefert Vorschläge, wie die Ergebnisse dieser Arbeit weitergeführt werden können.

6.1. Zusammenfassung und Einordnung der Ergebnisse

Das Modell aus Abschnitt 4.3.3 gibt das Verhalten der entsprechenden Potts-Modelle in zwei Dimensionen korrekt wieder, die gemessenen kritischen Temperaturen stimmen sehr gut mit den analytischen Werten $T_C(q') = \frac{1}{\ln(1+\sqrt{q'})}$ überein. In drei Dimensionen konnte nachgewiesen werden, dass der Phasenübergang zweiter Ordnung ist für $q' = 2$ und erster Ordnung für $q' = 3$. Die kritischen Temperaturen $T_C(q' = 2) = (2.25 \pm 0.01)$, $T_C(q' = 3) = (1.8165 \pm 0.0005)$ und die entsprechenden Skalenexponenten $b(q' = 2) = (1.9744 \pm 0.0006)$ und $b(q' = 3) = (2.969 \pm 0.017)$ stimmen hier ebenfalls gut mit den Literaturwerten überein.

Die Analyse der Skalenexponenten für $2 < q' < 3$ lässt vermuten, dass der trikritische Punkt der dreidimensionalen Potts-Modelle in dem Intervall $2.1 \leq q' \leq 2.25$ liegt. Das dreidimensionale Potts-Modell mit drei Zuständen ist also recht weit entfernt von dem trikritischen Punkt. Laut [BB91] liegt der trikritische Punkt in drei Dimensionen bei $q' = 2.21$. Dort wurde dieser bestimmt, indem die Modelle auf Existenz von Latenter Wärme untersucht wurden. Da die Latente Wärme nur in Systemen mit einem Phasenübergang erster Ordnung ungleich Null ist, liegt der trikritische Punkt bei dem Wert von q' , für den die Latente Wärme gerade einen von Null verschiedenen Wert annimmt. Mit

6. Einordnung der Arbeit und Ausblick

den Ergebnissen meiner Arbeit habe ich also das bereits bekannte Ergebnis verifizieren können.

Es sei hier auch die Arbeit von Michael Fromm erwähnt, der in seiner Dissertation die kritische Kurve aus Abb. 3.2 untersucht hat, indem die effektive Dimension des Modells reduziert wurde (vgl. [Fro10]). Dies wurde dadurch realisiert, dass die Anzahl der Gitterpunkte N_d in einer Richtung geändert wurde. Für $N_d = N_i$, $i = 1, \dots, d - 1$ ist das Gitter d -dimensional, für $N_d = 1$ ist das Gitter $d - 1$ -dimensional. Dadurch konnte der Autor den kritischen Punkt $d_C(q)$ untersuchen, wobei $q = 3$ gewählt wurde. Es wurde nachgewiesen, dass der Phasenübergang bei $d_C(3)$ die Ordnung ändert und das entsprechende System trikritisches Verhalten aufweist.

6.2. Algorithmus von Wolff

Ich möchte an dieser Stelle noch den Algorithmus von Wolff zur Erzeugung neuer Konfigurationen vorstellen, vgl. [Wol89]. Dieser stellt eine Modifikation des SW-Algorithmus dar und besitzt einen kleineren dynamischen Exponenten z , ist deshalb also weniger rechenintensiv. Ursprünglich habe ich mit dem Wolff-Algorithmus gearbeitet, es stellte sich aber heraus, dass dieser nicht mit dem modifizierten Modell aus Abschnitt 4.3.3 verträglich ist.

Die grundlegende Neuerung des Wolff-Algorithmus ist, dass dieser nur ein SW-Cluster erzeugt anstatt das gesamte Gitter in Cluster zu zerlegen. Diesem Cluster wird dann mit Wahrscheinlichkeit $p = \frac{1}{q}$ ein neuer Spinzustand $s_C \in \{1, \dots, q\}$ zugeordnet.

Der Wolff-Algorithmus schlägt eine Brücke zwischen dem Metropolis-Algorithmus und dem SW-Algorithmus: Da bei dem Metropolis-Algorithmus pro Durchlauf nur höchstens ein Gitterpunkt aktualisiert wird, handelt es sich bei diesem um lokale Gitterupdates, wohingegen die Updates bei dem SW-Algorithmus global sind; bei jedem Durchlauf wird jeder Gitterpunkt aktualisiert. Die Globalität der Updates bei dem Wolff-Algorithmus ist nun abhängig von der Temperatur T . Für hohe Temperaturen ist die mittlere Größe der geometrischen Cluster sehr gering und das konstruierte SW-Cluster besteht nur aus einem oder wenigen Gitterpunkten; die Updates sind lokal. Für tiefe Temperaturen hingegen überwiegen Konfigurationen mit vorwiegend parallelen Spins und das konstruierte SW-Cluster überdeckt fast das gesamte Gitter; die Updates sind global.

In der Umgebung des kritischen Punktes ist das eine SW-Cluster, welches bei dem Wolff-Algorithmus konstruiert wird, groß genug, dass dieser eine ähnliche Effizienz auf-

6.2. Algorithmus von Wolff

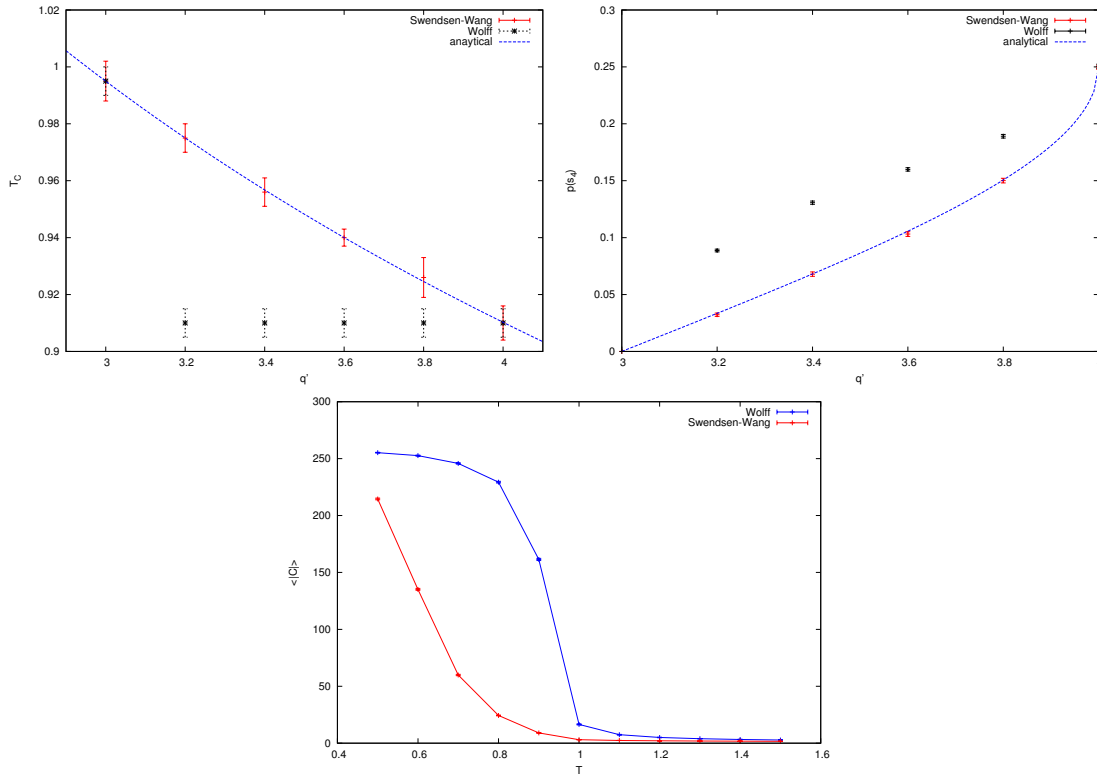


Abb. 6.1.: T_C ermittelt mit Wolff-Algorithmus (oben links), Wahrscheinlichkeit des letzten Spinzustands (oben rechts) und mittlere Clustergröße (unten).

weist wie der SW-Algorithmus. Hinzu kommt, dass keine Rechenzeit darauf verwendet wird kleine Cluster zu konstruieren, welche keinen großen Beitrag zur neuen Konfiguration liefern, da nicht das gesamte Gitter zerlegt werden muss. All diese Aspekte führen dazu, dass der dynamische Exponent des Wolff-Algorithmus in zwei Dimensionen dem des SW-Algorithmus entspricht ($z = (0.25 \pm 0.01)$) und in drei Dimensionen sogar geringer ist ($z_{Wolff} = (0.33 \pm 0.01)$, $z_{SW} = (0.54 \pm 0.02)$) (vgl. [NB99]). Dieser Vorteil ist natürlich Grund dafür, dass der Wolff-Algorithmus dem von Swendsen und Wang häufig vorgezogen wird.

Aber gerade die Temperaturabhängigkeit der Globalität der Gitterupdates des Wolff-Algorithmus scheint der Grund dafür zu sein, dass dieser in Kombination mit den modifizierten Wahrscheinlichkeiten aus Gl. 4.11 und 4.12 versagt. Um diese in den Wolff-Algorithmus zu implementieren wird der neue Spinzustand des Clusters nach diesen Wahrscheinlichkeiten ausgewählt. Mit dem modifizierten Wolff-Algorithmus lässt sich aber die Dynamik aus Abschnitt 5.1 nicht rekonstruieren. In zwei Dimensionen stimmt

6. Einordnung der Arbeit und Ausblick

die kritische Temperatur mit dem analytischen Wert für $q' \in \{q - 1, q\}$ überein, jedoch stellt sich für alle $q' \in (q - 1, q)$ die kritische Temperatur für $q' = q$ ein (vgl. Abb. 6.1 oben links). Die Ursache für dieses Verhalten ist, dass obwohl die neuen Spins nach Gl. 4.11 und 4.12 ausgewählt werden, diese Häufigkeiten im Mittel nicht erhalten bleiben; tatsächlich wird der letzte Spinzustand häufiger besetzt als erwartet (vgl. Abb. 6.1 oben rechts). Dies scheint daran zu liegen, dass die Cluster im Wolff-Algorithmus im Mittel größer sind als die im SW-Algorithmus (da bei dem SW-Algorithmus für jede Konfiguration zunächst über alle Cluster gemittelt werden muss), dadurch tritt der letzte Spinzustand im Wolff-Algorithmus häufiger auf (vgl. Abb. 6.1 unten).

6.3. Zusammenhang mit Gitter-QCD

Die *Quantenchromodynamik* (QCD) ist die Theorie, welche das Verhalten von Quarks (die elementaren Bausteine der Materie) und Gluonen (die Vermittler der starken Wechselwirkung) beschreibt. Es handelt sich dabei um eine nicht-abelsche Eichtheorie mit der Symmetriegruppe $SU(3)$. Eine der Besonderheiten dieser Theorie ist das sogenannte *Confinement*: Phänomenologisch beschreibt Confinement die Tatsache, dass keine isolierten Quarks beobachtet werden. Das Potential zwischen einem Quark-Antiquark-Paar nimmt linear mit dem Abstand zu. Das bedeutet, dass die Energie, die aufgebracht werden muss, um ein Quark und ein Antiquark weiter voneinander zu entfernen, größer wird, je größer der Abstand zwischen diesen ist. Irgendwann ist die Energie groß genug, dass es zu Paarbildung kommt. Zwischen dem ursprünglichen Quark-Antiquark-Paar entsteht ein neues solches Paar und statt isolierten Quarks erhält man zwei farbneutrale, gebundene Quarkzustände. Diese Eigenschaft der QCD steht in direktem Gegensatz zu anderen fundamentalen Wechselwirkungen, wie etwa der elektromagnetischen Wechselwirkung, bei der das Potential zwischen einer positiven und einer negativen Ladung invers proportional zum Abstand ist und natürlich können isolierte Elektronen beobachtet werden.

Bei hohen Temperaturen oder Drücken jedoch durchläuft die Materie in der QCD einen Phasenübergang zu einem Zustand, in dem Quarks und Gluonen als quasifreie Teilchen angesehen werden können, dem *Quark-Gluon-Plasma*. Dies wird als *Deconfinement* bezeichnet.

Mathematisch lässt sich dieser Phasenübergang durch eine spontane Symmetriebrechung charakterisieren, ähnlich dem Übergang in den Potts-Modellen. Das Phänomen kann

6.3. Zusammenhang mit Gitter-QCD

quantitativ mit der Gitter-QCD bei endlichen Temperaturen im Grenzwert unendlich schwerer Quarks beschrieben werden (für eine Einführung in die Gitter-QCD siehe z.B. [GL10]). Die Raum-Zeit wird diskretisiert und durch ein Gitter

$$\Lambda = \{n = (n_1, n_2, n_3, n_4) : n_1, n_2, n_3 \in \{0, \dots, N-1\}, n_4 \in \{0, \dots, N_t-1\}\}$$

dargestellt. Zusätzlich werden periodische Randbedingungen in zeitlicher Richtung angenommen. Die Temperatur wird identifiziert mit der inversen zeitlichen Ausdehnung des Gitters $T = \frac{1}{N_t}$. Im Grenzwert unendlich schwerer Quarks besteht die Wirkung der QCD nur aus dem Term, der einzig die gluonischen Anteile enthält. Der fermionische Anteil verschwindet aufgrund der unendlich großen Quarkmassen. Auf dem Gitter ist dies die *Wilson-Wirkung*

$$S_G[U] = \frac{2}{g^2} \sum_{n \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} \text{Re}(\text{tr}(\mathbf{1} - U_{\mu\nu}(n))). \quad (6.1)$$

Dabei bezeichnet $\text{Re}(\cdot)$ den Realteil und $U_{\mu\nu}(n) = U_\mu(n)U_\nu(n+\mu)U_\mu^\dagger(n+\nu)U_\nu^\dagger(n)$, mit $U_\mu(\cdot) \in SU(3)$, ist eine sogenannte *Plakette*, die kleinste geschlossene Kette an Linkvariablen. Als Prototyp statischer Quarks dient der *Polyakov-Loop*

$$P(n) = \text{tr} \left(\prod_{k=0}^{N_t-1} U_4((n, k)) \right), \quad (6.2)$$

wobei $U_4((n, k)) \in SU(3)$ Linkvariablen auf dem Gitter sind, welche sich alle an demselben Ort $n = (n_1, n_2, n_3)$ befinden und über die gesamte Zeitachse ausdehnen. Gleichungen 6.1 und 6.2 sind beide invariant unter Eichtransformationen.

Um den Deconfinement-Übergang auf dem Gitter zu beschreiben, wird noch der Begriff des *Zentrums* einer Gruppe benötigt. Dieses ist für eine beliebige Gruppe G definiert als $Z_G = \{a \in G : \forall g \in G : ag = ga\}$. Im Spezialfall $G = SU(3)$ ist $Z_3 = \{z\mathbf{1}_3 : z^3 = 1\}$, wobei $\mathbf{1}_3 \in SU(3)$ die Identität ist. Eine *Zentrum-Transformation* besteht nun darin, für einen festen Zeitpunkt t_0 alle Linkvariablen mit einem $Z \in Z_3$ zu transformieren $U_\mu(n, t_0) \mapsto ZU_\mu(n, t_0)$. Die Wirkung 6.1 ist invariant unter dieser Transformation, für den Polyakov-Loop 6.2 ist dies aber nicht der Fall. Gilt nämlich $Z = z\mathbf{1}_3$ mit $z = e^{2\pi ik/3}$ und $k = 1, 2$, so ist

$$P'(n) = \text{tr} \left(Z \prod_{k=0}^{N_t-1} U_4((n, k)) \right) = zP(n) \neq P(n).$$

6. Einordnung der Arbeit und Ausblick

Der Polyakov-Loop-Erwartungswert

$$\langle P \rangle = \frac{1}{Z} \int P(n) e^{-S_G[U]} \mathcal{D}[U]$$

steht in direktem Zusammenhang mit der freien Energie einer statischen Farbladung durch $|\langle P \rangle| \sim e^{-F_q/T}$. Diese ist unendlich für Confinement und endlich in der Deconfinement - Phase. Es gilt also

$$\langle P \rangle \begin{cases} = 0, & \text{falls } F_q = \infty, \\ \neq 0, & \text{falls } F_q < \infty \end{cases}$$

und damit ist der Polyakov-Loop-Erwartungswert ein Ordnungsparameter für den Confinement - Deconfinement Phasenübergang. Da in der Deconfinement-Phase für $Z = z\mathbf{1}_3 \in Z_3$ gilt $\langle P' \rangle = \langle zP \rangle = z\langle P \rangle \neq \langle P \rangle$ für $z \neq 1$, wird dort die Zentrum-Symmetrie durch den Ordnungsparameter spontan gebrochen. Confinement und Deconfinement werden in der Gitter-QCD also beschrieben durch eine symmetrische Phase und eine Phase spontaner Symmetriebrechung.

Wie für das dreidimensionale Potts-Modell mit drei Spinzuständen ist auch der Confinement - Deconfinement Phasenübergang erster Ordnung. Verringert man entweder die Anzahl der Farbzustände zu $N_c = 2$ oder die Zahl der räumlichen Dimensionen zu $d = 2$ so erhält man Gittereichtheorien, die einen Phasenübergang zweiter Ordnung durchlaufen und in der Universalitätsklasse des entsprechenden Potts-Modells liegen (vgl. [Sme12]). Die Tatsache, dass die Gittereichtheorien mit n Farbzuständen in $d + 1$ Dimensionen dasselbe kritische Verhalten aufweisen wie die entsprechenden Potts-Modelle ist nicht verwunderlich. Werden nämlich im Pfadintegral alle Freiheitsgrade bis auf die in Zeitrichtung orientierten Linkvariablen ausintegriert, so erhält man effektiv ein d -dimensionales $SU(n)$ -Spinmodell mit den Polyakov-Loops als Spinvariablen mit kurzreichweitiger Wechselwirkung und derselben globalen Symmetrie wie das d -dimensionale Potts-Modell mit n Spinzuständen (vgl. [SY82]). Diese Aussage ist jedoch nicht allgemeingültig, beispielsweise ist der Phasenübergang des zweidimensionalen Potts-Modells mit vier Spinzuständen zweiter Ordnung (dieses Modell liegt gerade auf der kritischen Kurve, vgl. Abb. 3.2), der Phasenübergang der $SU(4)$ -Gittereichtheorie in $2 + 1$ Dimensionen ist jedoch erster Ordnung (vgl. [Sme12, S. 20]).

Es gibt weitere Gemeinsamkeiten zwischen dem dreidimensionalen Potts-Modell und der Gitter-QCD. Für endliche Quarkmassen ist die Z_3 -Symmetrie in der Gitter-QCD explizit gebrochen. Der Phasenübergang wird mit fallender Quarkmasse abgeschwächt und

für einen bestimmten Wert der Masse ist der Übergang zweiter Ordnung. An diesem Punkt liegt das Modell in der Universalitätsklasse des dreidimensionalen Potts-Modells mit drei Spinzuständen mit nichtverschwindendem externen Feld entsprechender Stärke (vgl. [KFKT05]). Diese Tatsache kann für Simulationen der Gitter-QCD bei endlichem chemischen Potential μ genutzt werden. Monte-Carlo Simulationen der Gitter-QCD sind aufgrund des sogenannten „Sign-Problem“ nicht ohne weiteres durchführbar: QCD mit statischen Quarks und endlichem chemischen Potential kann beschrieben werden durch die großkanonische Zustandssumme (vgl. [KFKT05])

$$Z(\mu) = \int \exp(-S_G[U] + e^{-\beta(M-\mu)} P[U] + e^{-\beta(M+\mu)} P^*[U]) dU.$$

Dabei ist M die Quarkmasse, μ das chemische Potential, P ein Polyakov-Loop und P^* der Anti-Polyakov-Loop. Ist $\mu \neq 0$, so ist der Integrand komplex und kann nicht mehr als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden. Es kann aber stattdessen das dreidimensionale Potts-Modell mit der Hamiltonfunktion (vgl. [FP10], [KFKT05])

$$H = -k \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{P(i), P(j)} - \sum_i h P(i) + h' P^*(i)$$

untersucht werden. Hier bezeichnet P nun einen planaren Potts-Spin $P = e^{2\pi i k/3}$, P^* das komplex konjugierte, $h = e^{-\beta(M-\mu)}$, $h' = e^{-\beta(M+\mu)}$ und $k = TJ$. Die entsprechende kanonische Zustandssumme ist reell und Monte-Carlo Simulationen können ohne Probleme durchgeführt werden. Da dieses Modell und die QCD mit schweren Quarks bei endlicher Temperatur und endlichem chemischen Potential in derselben Universalitätsklasse liegen, können von dem kritischen Verhalten des Potts-Modells Rückschlüsse gezogen werden auf das Phasendiagramm der QCD.

6.4. Weiterführende Arbeiten

In diesem letzten Abschnitt sollen zunächst Ursachen für das Skalenverhalten von χ' untersucht und mögliche Lösungsansätze besprochen werden. Anschließend wird diskutiert, wie die Messresultate verbessert werden können und es werden mögliche Themen für weiterführende Arbeiten vorgeschlagen.

Die Werte der kritischen Temperatur und der kritischen Exponenten sind intrinsische Eigenschaften des physikalischen Systems und damit insbesondere unabhängig von der Darstellung physikalischer Größen wie z.B. den Spinvektoren. Jedoch liefert χ' für $(q, q') =$

6. Einordnung der Arbeit und Ausblick

$(2, 2)$ und $(q, q') = (3, 2)$ unterschiedliche Werte für den Skalenexponenten, vgl. Abb. 5.3 links und Abb. 5.4 oben. Der einzige Unterschied zwischen den beiden Modellen liegt in der Definition der Spinvektoren (obwohl diese eigentlich keinen Einfluss auf das Skalenverhalten haben sollten). Eine Möglichkeit diesen Umstand zu beheben wäre, auf die Spinvektoren s_i eine von q und q' abhängige lineare Transformation $A(q, q')$ anzuwenden, sodass diese im Fall $q' = q - 1$ die korrekte Darstellung besitzen. Da solch eine Transformation aber nicht eindeutig ist, ist nicht klar, welche Nebenbedingungen an $A(q, q')$ gestellt werden müssen, sodass die Spinvektoren auch für den Fall $q - 1 < q' < q$ die korrekten Eigenschaften wiedergeben.

Alternativ können physikalische Größen untersucht werden, die unabhängig sind von der Darstellung der Spinzustände, wie z.B. die spezifische Wärme C . Falls die spezifische Wärme der Modelle mit $(q, q') = (2, 2)$ und $(q, q') = (3, 2)$ dasselbe Skalenverhalten aufweist, ist es wahrscheinlich, dass das abweichende Skalenverhalten von χ' tatsächlich an der Darstellung der Spinvektoren liegt. Da aber $C \sim L^{\alpha/\nu}$ (vgl. Gl. 2.11) und $\alpha = 0.11$ für das dreidimensionale Ising-Modell, ist der Skalenexponent der spezifischen Wärme sehr klein ($b = 0.17$) und die Simulation muss mit deutlich größeren Stichproben auf größeren Gittern durchgeführt werden um brauchbare Ergebnisse zu erhalten.

Die Messresultate können selbstverständlich allgemein verbessert werden, indem umfangreichere Messreihen auf größeren Gittern durchgeführt werden. Dazu wäre es sinnvoll, die Simulation auf einem leistungsstärkeren Rechner oder auf einem Cluster durchzuführen. Die brennendste Frage, welche dann natürlich untersucht werden sollte ist, ob das Modell an dem kritischen Punkt $q_C(3)$ tatsächlich trikritisches Skalenverhalten aufweist. Barkema und de Boer haben in ihrer Arbeit [BB91] durch Lösen eines Optimierungsproblems wie in Abschnitt 4.3.3 ebenfalls eine Methode vorgestellt, zwischen nichtganzzahligen Dimensionen $d - 1 \leq d' \leq d$ zu interpolieren, indem die Kopplungskonstante J in einer Raumrichtung erhöht wird. Somit kann die kritische Kurve in Abb. 3.2 für beliebige Wertepaare (d', q') ausgemessen werden. Es wäre interessant zu untersuchen, inwiefern die Ergebnisse in diesem Modell mit den Ergebnissen aus der Dissertation von Michael Fromm [Fro10] übereinstimmen. Falls es in der Literatur weitere Modelle gibt, mit denen nichtganzzahlige Werte für d und q realisiert werden, so liegt die Frage nahe, inwiefern diese mit dem Modell aus [BB91] übereinstimmen. Im Hinblick auf den technischen Aufwand wäre insbesondere ein Modell interessant, welches nichtganzzahlige Werte für d und q ermöglicht und mit dem Wolff-Algorithmus kompatibel ist.

A. Anhang: Mathematische Grundlagen

In diesem letzten Kapitel werden die für die vorliegende Arbeit relevanten mathematischen Grundlagen vorgestellt. Abschnitt A.1 bietet eine Einführung in die Theorie endlicher Graphen und definiert die für Abschnitt 3.4 nötigen Begriffe. In Abschnitt A.2 werden verschiedene Begriffe der Wahrscheinlichkeitstheorie eingeführt, welche für die beiden darauffolgenden Abschnitte benötigt werden. Abschnitt A.3 stellt die mathematische Statistik auf ein rigoroses Fundament und in Abschnitt A.4 wird die Jackknife-Methode vorgestellt. Die für die Monte-Carlo-Simulation physikalischer Modelle wichtigen Markov-Ketten werden im letzten Abschnitt A.5 eingeführt. Abschnitt A.1 orientiert sich nach [Die00], die Abschnitte A.2, A.3 und A.5 richten sich nach [MS06] und die Definitionen und Beispiele aus Abschnitt A.4 sind [ST96] entnommen.

A.1. Graphentheorie

Ein *endlicher Graph* $G = (V, E)$ besteht aus einer endlichen Menge $V \neq \emptyset$, $|V| < \infty$ von *Knoten* und einer Menge $E \subset \mathcal{P}(V)$ von *zweielementigen* Teilmengen $e = \{v, w\}$ von V . Die Elemente $e \in E$ werden *Kanten* genannt.

Sei $G = (V, E)$ ein endlicher Graph. Zwei Knoten $v, w \in V$ heißen *benachbart* (in G), falls $\{v, w\} \in E$. Der *Grad* eines Knotens $v \in V$ in G ist definiert durch

$$d_G(v) = |\{w \in V : \exists e \in E : e = \{v, w\}\}|.$$

G heißt *leer*, falls $E = \emptyset$ und er heißt *vollständig*, falls $\{v, w\} \in E$ für alle paarweise verschiedenen $v, w \in V$. Ein *Untergraph* von G ist ein Graph $G' = (V', E')$ mit $V' \subset V$ und $E' \subset E$. G' heißt *aufspannend*, falls $V' = V$. Ein *Weg* in G ist eine alternierende Folge $v_1, e_1, \dots, e_n, v_{n+1}$ von Knoten $v_1, \dots, v_{n+1} \in V$ und Kanten $e_1, \dots, e_n \in E$, sodass $e_j = \{v_j, v_{j+1}\}$. Die Zahl n heißt *Länge* des Weges. Ein *Pfad* ist ein Weg bei dem die Kanten paarweise disjunkt sind. Zwei Knoten $v, w \in V$ heißen *wegverbunden* in G , falls

A. Anhang: Mathematische Grundlagen

ein Weg $v_1, e_1, \dots, e_n, v_{n+1}$ in G existiert, sodass $v_1 = v$ und $v_{n+1} = w$. Die Relation der Wegverbundenheit ist eine Äquivalenzrelation auf G . Schreibe $v \sim w$, falls v und w wegverbunden sind und bezeichne mit $[v] = \{w \in V : v \sim w\}$ die Äquivalenzklasse von $v \in V$ unter der Relation der Wegverbundenheit. G heißt *zusammenhängend*, falls für alle $v, w \in V$ gilt $v \sim w$. Die *Zusammenhangskomponenten* von G sind die Elemente der Quotientenmenge $G/\sim = \{[v] : v \in V\}$.

$G = (V, E)$ heißt *Gittergraph in d Dimensionen*, falls

$$V = V_d = \{x = (x_1, \dots, x_d)^T \in \mathbb{R}^d : x_i \in \{0, \dots, N-1\} \forall i = 1, \dots, d\}$$

und *vollständiger Gittergraph in d Dimensionen*, falls zusätzlich gilt

$$E = E_d = \{\{v, w\} \in V_d : v - w = \pm e_i \pmod{N} \text{ für ein } i \in \{1, \dots, d\}\},$$

wobei e_i den i -ten Standardbasisvektor bezeichnet und die Modulofunktion komponentenweise zu lesen ist. Dieser wird mit $G = L_d = (V_d, E_d)$ bezeichnet. Es sei darauf hingewiesen, dass der vollständige Gittergraph L_d nicht mit dem *vollständigen Graphen auf dem Gitter V_d* zu verwechseln ist.

A.2. Grundlagen der Wahrscheinlichkeitstheorie

Definition A.1 (σ -Algebra). Sei Ω eine Menge. Ein Mengensystem $\mathcal{A} \subset \mathcal{P}(\Omega)$ heißt σ -Algebra (über Ω), falls:

- (i) $\Omega \in \mathcal{A}$,
- (ii) $M \in \mathcal{A} \Rightarrow M^c \in \mathcal{A}$,
- (iii) $M_i \in \mathcal{A}, i \in \mathbb{N} \Rightarrow \bigcup_{i=1}^{\infty} M_i \in \mathcal{A}$.

Das Tupel (Ω, \mathcal{A}) heißt messbarer Raum.

Definition A.2 (Maß, Verteilung, unabhängige Ereignisse). Sei (Ω, \mathcal{A}) ein messbarer

A.2. Grundlagen der Wahrscheinlichkeitstheorie

Raum. Eine Funktion $\mu : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ heißt Maß auf \mathcal{A} , falls

$$(i) \quad \mu(\emptyset) = 0,$$

$$(ii) \quad \forall (A_n)_{n \in \mathbb{N}}, A_n \in \mathcal{A} \text{ paarweise disjunkt: } \mu\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu(A_n).$$

Das Tupel $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ heißt Maßraum. Gilt zusätzlich

$$(iii) \quad \mu(\Omega) = 1,$$

so heißt μ Wahrscheinlichkeitsmaß oder Verteilung und $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ heißt Wahrscheinlichkeitsraum. Die $A \in \mathcal{A}$ werden Ereignisse genannt. Zwei Ereignisse $A, B \in \mathcal{A}$ heißen unabhängig, falls

$$\mu(A \cap B) = \mu(A)\mu(B).$$

Definition A.3 (Messbare Funktion). Seien $(\Omega_1, \mathcal{A}_1)$ und $(\Omega_2, \mathcal{A}_2)$ messbare Räume. Eine Funktion $f : \Omega_1 \rightarrow \Omega_2$ heißt \mathcal{A}_1 - \mathcal{A}_2 -messbar, falls

$$f^{-1}(A_2) \in \mathcal{A}_1.$$

Ist aus dem Kontext klar, welche messbaren Räume betrachtet werden, so wird die Funktion $f : \Omega_1 \rightarrow \Omega_2$ einfach *messbar* genannt.

Definition A.4 (Bildmaß). Es sei $(\Omega_1, \mathcal{A}_1, \mu_1)$ ein Maßraum, $(\Omega_2, \mathcal{A}_2)$ ein messbarer Raum und $f : \Omega_1 \rightarrow \Omega_2$ messbar. Dann wird durch

$$\mu_2 : \mathcal{A}_2 \rightarrow [0, \infty], A \mapsto \mu_1(f^{-1}(A))$$

ein Maß auf \mathcal{A}_2 erklärt. $(\Omega_2, \mathcal{A}_2, \mu_2)$ ist ein Maßraum und μ_2 heißt Bildmaß von μ_1 unter f .

Definition A.5 (Zufallsvariable). Es sei $(\Omega_1, \mathcal{A}_1, \mathbb{P})$ ein Wahrscheinlichkeitsraum und $(\Omega_2, \mathcal{A}_2)$ ein messbarer Raum. Eine messbare Funktion

$$X : \Omega_1 \rightarrow \Omega_2$$

heißt Zufallsvariable auf Ω_2 . $(\Omega_2, \mathcal{A}_2, \mathbb{P}_X)$ mit dem Bildmaß $\mathbb{P}_X(A) = \mathbb{P}(X^{-1}(A))$ für $A \in \mathcal{A}_2$ ist ein Wahrscheinlichkeitsraum. \mathbb{P}_X heißt Verteilung der Zufallsvariable X .

A. Anhang: Mathematische Grundlagen

Zwei Zufallsvariablen $X_1, X_2 : \Omega_1 \rightarrow \Omega_2$ heißen unabhängig, falls für alle $A_1, A_2 \in \mathcal{A}_2$ die Ereignisse $\{X_1 \in A_1\}$ und $\{X_2 \in A_2\}$ unabhängig sind.

Die Notation $\{X \in A\}$ in obiger Definition bedeutet $\{X \in A\} = X^{-1}(A) = \{\omega \in \Omega : X(\omega) \in A\}$.

Definition A.6 (Erwartungswert, Varianz, Kovarianz). *Es sei $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine reelle Zufallsvariable mit Verteilung \mathbb{P} . Ist $\sum_{\omega \in \Omega} |X(\omega)|\mathbb{P}(X = \omega) < \infty$, so existiert der Erwartungswert von X und ist gegeben durch*

$$\mathbb{E}[X] = \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega)\mathbb{P}(\{\omega\}).$$

Ist Y eine weitere reelle Zufallsvariable und existieren $\mathbb{E}[X^2]$ und $\mathbb{E}[Y]$, dann heißt

$$\text{Var}[X] = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2] = \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}^2[X]$$

die Varianz von X ,

$$\sigma_X = \sqrt{\text{Var}[X]}$$

die Standardabweichung von X und

$$\text{Cov}[X, Y] = \mathbb{E}[XY] - \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y]$$

die Kovarianz von X und Y .

Der Erwartungswert und die Varianz lassen sich direkt auf Zufallsvektoren $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ verallgemeinern, da die Komponenten von X reelle Zufallsvariablen sind. X^2 kann als Skalarprodukt $\langle X, X \rangle$ verstanden werden. Durch Erwartungswert und Varianz ist die Verteilung einer Zufallsvariablen noch nicht eindeutig bestimmt, häufig werden noch höhere Momente untersucht.

Definition A.7 (Momente, momenterzeugende Funktion). *Es sei X eine reelle Zufallsvariable, sodass $\mathbb{E}[|X|^n]$ für alle $n \in \mathbb{N}$ existiert. Dann heißt $\mathbb{E}[X^n]$ n -tes Moment der Verteilung von X . Die Zufallsvariable $(X - \mathbb{E}[X])$ heißt zentrierte Zufallsvariable von X und $\mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^n]$ heißt n -tes zentriertes Moment der Verteilung von X .*

Ist $D = \{t \in \mathbb{R} : \mathbb{E}[\exp(tX)] < \infty\}$, so heißt die Funktion

$$M_X : D \rightarrow \mathbb{R}, t \mapsto \mathbb{E}[\exp(tX)]$$

momenterzeugende Funktion von X .

Der Erwartungswert ist das erste Moment und die Varianz ist das zweite zentrierte Moment der Verteilung von X . Bezeichnet $\mu_n = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^n]$ das n -te zentrierte Moment, so gilt

$$M_{X-\mathbb{E}[X]}(t) = \mathbb{E}[\exp(t(X - \mathbb{E}[X]))] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \mu_n.$$

Die Funktion $g_X : D \rightarrow \mathbb{R}, t \mapsto \ln M_{X-\mathbb{E}[X]}(t)$ heißt *kumulantenerzeugende Funktion* von X und

$$\kappa_n = \frac{d^n g_X}{dt^n}(0)$$

heißt *n -te zentrierte Kumulante* der Verteilung von X . Die ersten Kumulanten lauten

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= 0, \\ \kappa_2 &= \mu_2, \\ \kappa_3 &= \mu_3, \\ \kappa_4 &= \mu_4 - 3\mu_2^2. \end{aligned}$$

Eine Größe, die sich aus den ersten Kumulanten ableitet und in Abschnitt 5.2 untersucht wird ist die *Binder Kumulante*

$$U_4 = -\frac{\kappa_4}{3\kappa_2^2} = 1 - \frac{\mu_4}{3\mu_2^2}.$$

A.3. Mathematische Statistik

Ist ein Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ und eine Zufallsvariable $X : \Omega \rightarrow \Omega'$ bekannt, so lassen sich mit den Mitteln der Wahrscheinlichkeitstheorie Aussagen über die Eigenschaften der Zufallsvariablen X treffen. Die mathematische Statistik befasst sich mit dem Problem, dass ein messbarer Raum (Ω, \mathcal{A}) gegeben ist, gemeinsam mit einer Menge \mathcal{W} von Wahrscheinlichkeitsmaßen auf \mathcal{A} . Anhand von Zufallsexperimenten, beschrieben durch Zufallsvariablen $X : \Omega \rightarrow \Omega'$, soll eine geeignete Verteilung $\mathbb{P} \in \mathcal{W}$ ausgewählt werden. Häufig können die Verteilungen $\mathbb{P} \in \mathcal{W}$ durch ein $\vartheta \in \Theta$ parametrisiert werden. Eine *Stichprobe* ist ein Tupel von Zufallsvariablen (X_1, \dots, X_n) auf Ω' . In der Physik entspricht dies der n -fachen Messung einer physikalischen Observable, wie etwa der Pe-

A. Anhang: Mathematische Grundlagen

riodendauer eines Pendels. Die expliziten Messwerte sind nicht identisch, sondern sind um den tatsächlichen Wert gestreut entsprechend einer unbekanntem oder nur bis auf eine Normierungskonstante bekannten Verteilungsfunktion \mathbb{P} .

Definition A.8 (Statistischer Raum, Stichprobenraum, Stichprobe). *Es seien (Ω, \mathcal{A}) und (S, \mathcal{S}) messbare Räume, $\mathcal{W} = \{\mathbb{P}_\vartheta : \vartheta \in \Theta\}$ eine Menge von parametrisierten Verteilungen auf \mathcal{A} und $X : \Omega \rightarrow S$ eine Zufallsvariable. Bezeichne mit $\mathcal{W}' = \{\mathbb{P}_X : \mathbb{P} \in \mathcal{W}\}$ die Menge der Bildmaße von \mathcal{W} unter X . Dann heißt $(S, \mathcal{S}, \mathcal{W}')$ statistischer Raum. (S, \mathcal{S}) heißt Stichprobenraum. Ist $\omega \in \Omega$, so heißt $x = X(\omega)$ Realisierung von X und $X : \Omega \rightarrow S$ heißt Stichprobe.*

Um die Formulierungen nicht unnötig kompliziert zu machen, werden in dieser Arbeit die Zufallsvariablen X und deren Realisierungen $x = X(\omega)$ häufig miteinander identifiziert, aus dem Zusammenhang wird aber klar, ob die Zufallsvariable oder deren Realisierung gemeint ist. Es ist jedoch zu beachten, dass es sich um zwei grundlegend verschiedene Objekte handelt.

Oft ist man nicht an der Verteilung der Zufallsvariable selbst interessiert, sondern an Funktionen, die von dieser abhängen. Beispielsweise könnte man bei obigem Pendelexperiment daran interessiert sein, aus den erhobenen Daten die Gravitationsbeschleunigung zu bestimmen. Die gemessenen Zeiten für die Periodendauer (t_1, \dots, t_n) entsprechen dann einer Realisierung der Stichprobe $X = (X_1, \dots, X_n)$.

Definition A.9 (Schätzer). *Sei $(S, \mathcal{S}, \mathcal{W}')$ ein statistischer Raum, $\gamma : \Theta \rightarrow \mathbb{R}$ eine Abbildung, $x \in S$ eine Realisierung und $T : S \rightarrow \mathbb{R}$ eine messbare Funktion. Dann heißt T Schätzfunktion für γ und $T(x)$ heißt Schätzer für $\gamma(\vartheta)$. T heißt erwartungstreu, falls $\mathbb{E}_\vartheta[T] = \gamma(\vartheta)$ für alle $\vartheta \in \Theta$.*

Für diese Arbeit von besonderem Interesse sind das *Stichprobenmittel*

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \tag{A.1}$$

und die *Stichprobenvarianz*

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2. \tag{A.2}$$

Diese sind erwartungstreue Schätzer für den Mittelwert und die Varianz.

Satz A.10 (Stichprobenmittel, Stichprobenvarianz). *Es seien $X_1, \dots, X_n : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ unabhängige, identisch verteilte Zufallsvariable mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2 . Dann gilt für das Stichprobenmittel \bar{X} und die Stichprobenvarianz $\hat{\sigma}^2$, dass $\mathbb{E}[\bar{X}] = \mu$ und $\mathbb{E}[\hat{\sigma}^2] = \sigma^2$.*

Beweis. Für das Stichprobenmittel gilt

$$\mathbb{E}[\bar{X}] = \mathbb{E}\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i\right] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[X_i] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mu = \mu.$$

Um zu zeigen, dass die Stichprobenvarianz erwartungstreu ist, berechne zunächst

$$\mathbb{E}[(\bar{X} - \mu)^2] = \mathbb{E}[(\bar{X} - \mathbb{E}[\bar{X}])^2] = \text{Var}[\bar{X}] = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \text{Var}[X_i] = \frac{1}{n} \sigma^2,$$

wobei im ersten Schritt die Erwartungstreue von \bar{X} verwendet wurde und im dritten Schritt, dass die X_i unabhängig sind. Damit folgt

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\hat{\sigma}^2] &= \mathbb{E}\left[\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n ((X_i - \mu) + (\mu - \bar{X}))^2\right] \\ &= \frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n \mathbb{E}[(X_i - \mu)^2] + 2\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^n (X_i - \mu)(\mu - \bar{X})\right] + n\mathbb{E}[(\bar{X} - \mu)^2] \right) \\ &= \frac{n}{n-1} \sigma^2 - \frac{2n}{n-1} \mathbb{E}[(\bar{X} - \mu)^2] + \frac{n}{n-1} \text{Var}[\bar{X}] \\ &= \frac{n}{n-1} \sigma^2 - \frac{1}{n} \sigma^2 \\ &= \sigma^2. \end{aligned} \tag{A.3}$$

□

Die Wurzel der Stichprobenvarianz $\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$ heißt *Standardfehler* und ist ein Maß dafür, wie stark die Einzelmessung X_i von dem Erwartungswert μ abweicht. Ein Maß für die Abweichung des Stichprobenmittels \bar{X} vom Erwartungswert μ ist der

A. Anhang: Mathematische Grundlagen

Fehler des Stichprobenmittels

$$\hat{\sigma}_{\bar{X}} = \sqrt{\frac{\hat{\sigma}}{n}} = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}. \quad (\text{A.4})$$

Wie in Gl. A.3 gezeigt, ist $\hat{\sigma}_{\bar{X}}^2$ ein erwartungstreuer Schätzer

$$\mathbb{E}[\hat{\sigma}_{\bar{X}}^2] = \frac{1}{n} \mathbb{E}[\hat{\sigma}^2] = \frac{1}{n} \sigma^2 = \text{Var}[\bar{X}].$$

An Gl. A.4 ist zu erkennen, dass der Fehler des Mittelwerts invers proportional zur Wurzel der Stichprobengröße ist, eine Verdopplung der Messungen verringert den Fehler des Stichprobenmittels also um den Faktor $\sqrt{2}$. Im Grenzwert unendlicher Stichprobengröße entspricht das Stichprobenmittel dem Erwartungswert

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{X} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i = \mu.$$

Dies ist die Aussage des *starken Gesetzes großer Zahlen*.

Definition A.11 (Fast sichere Konvergenz). Sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge von Zufallsvariablen und X eine Zufallsvariable auf $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. Die Folge $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ konvergiert fast sicher gegen X , falls

$$\mathbb{P}(\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = X) = 1,$$

schreibe

$$X_n \rightarrow X \text{ f.s.}$$

Satz A.12 (Starkes Gesetz großer Zahlen). Sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge unabhängiger, identisch verteilter Zufallsvariablen mit Erwartungswert $\mu < \infty$ und Varianz $\sigma^2 < \infty$. Setze $\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Dann gilt

$$X_n - \mu \rightarrow 0 \text{ f.s.}$$

In Abschnitt 4.2 wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem der Fehler des Stichprobenmittels reduziert werden kann, ohne die Stichprobengröße zu erhöhen. Solche Techniken werden *varianzreduzierende Verfahren* genannt.

A.4. Die Jackknife-Methode

Die Jackknife-Methode wurde ursprünglich eingeführt, um die Abweichung eines Schätzers T von dem tatsächlichen Wert ϑ abzuschätzen. Weiter bietet diese eine einfache Möglichkeit, eine Abschätzung des Fehlers des Mittelwertes anzugeben, falls die zugrundeliegenden Zufallsvariablen nicht unabhängig sind. Es seien X_1, \dots, X_n Zufallsvariablen und $T_n = T_n(X_1, \dots, X_n)$ sei ein Schätzer eines unbekanntes Parameters ϑ , $T_{n-1,i} = T_{n-1}(X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_n)$ bezeichne den Schätzer zu den $n-1$ Daten der ursprünglichen Stichprobe, wobei der i -te Datenpunkt ausgelassen wurde. Die *Abweichung* (auch *Bias* genannt) des Schätzers T_n ist definiert als

$$b(T_n) = \mathbb{E}[T_n] - \vartheta.$$

Der *Jackknife bias Schätzer* ist gegeben durch

$$b_{Jack} = (n-1)(\bar{T}_n - T_n),$$

wobei $\bar{T}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T_{n-1,i}$. Damit wird der *Jackknife Schätzer* für ϑ definiert durch

$$T_{Jack} = T_n - b_{Jack}.$$

Falls $\mathbb{E}[b_{Jack}] = b(T_n)$ gilt, so ist

$$\mathbb{E}[T_{Jack}] = \mathbb{E}[T_n] - \mathbb{E}[b_{Jack}] = b(T_n) + \vartheta - b(T_n) = \vartheta$$

und T_{Jack} ist ein erwartungstreuer Schätzer für ϑ . Weiter gilt

$$T_{Jack} = nT_n - (n-1)\bar{T}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (nT_n - (n-1)T_{n-1,i}).$$

In dieser Darstellung können neue Zufallsvariable

$$\tilde{T}_{n,i} = nT_n - (n-1)T_{n-1,i}, \quad i = 1, \dots, n \tag{A.5}$$

definiert werden. Diese haben annähernd dieselbe Varianz wie $\sqrt{n}T_n$ und werden als unabhängig angesehen (was nicht unbedingt bedeutet, dass sie tatsächlich unabhängig sind). Der (delete-1) *Jackknife Varianz Schätzer* entspricht dem Fehler des Mittelwertes

A. Anhang: Mathematische Grundlagen

dieser neuen Zufallsvariablen:

$$\begin{aligned}
 \hat{\sigma}_{Jack}^2 &= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (\tilde{T}_{n,i} - T_{Jack})^2 \\
 &= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n \left(\tilde{T}_{n,i} - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \tilde{T}_{j,n} \right)^2 \\
 &= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n \left((n-1)T_{n-1,i} - \frac{n-1}{n} \sum_{j=1}^n T_{n-1,j} \right)^2 \\
 &= \frac{n-1}{n} \sum_{i=1}^n (T_{n-1,i} - \bar{T}_n)^2.
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

Als Beispiel seien X_1, \dots, X_n unabhängig und identisch verteilt und $T_n = \bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$. Wie bereits gezeigt wurde, ist dies ein erwartungstreuer Schätzer für $\mu = \mathbb{E}[X_1]$. Mit obiger Notation ist

$$T_{n-1,i} = \frac{1}{n-1} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n X_j$$

und

$$\bar{T}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T_{n-1,i} = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n X_j = T_n.$$

Damit sind die neuen Zufallsvariablen $\tilde{T}_{n,i}$ gegeben durch

$$\tilde{T}_{n,i} = nT_n - (n-1)T_{n-1,i} = \sum_{j=1}^n X_j - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n X_j = X_i$$

und es gilt

$$\hat{\sigma}_{Jack}^2 = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (\tilde{T}_{n,i} - T_{Jack})^2 = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2 = \hat{\sigma}^2.$$

Der Jackknife Varianz Schätzer entspricht in diesem Beispiel also der Stichprobenvarianz. Um zu sehen, dass die Jackknife Methode den Bias reduziert, sei nun

$$T_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2 = \hat{\sigma}_{naiv}^2,$$

die „naive“ Stichprobenvarianz. Diese ist nicht erwartungstreu, es gilt nämlich

$$\mathbb{E}[\hat{\sigma}_{naiv}^2] = \frac{n}{n-1}\sigma^2.$$

In diesem Beispiel sind die neuen Zufallsvariablen $\tilde{T}_{n,i}$ nun gegeben durch

$$\tilde{T}_{n,i} = X_i^2 - n\bar{X}_n^2 + (n-1)\bar{X}_{n-1,i}^2$$

und der Jackknife Schätzer

$$T_{Jack} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \tilde{T}_{n,i} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2 = \hat{\sigma}^2,$$

ist ein erwartungstreuer Schätzer für die Varianz σ^2 .

Ein Nachteil der delete-1 Jackknife Methode ist, dass die Daten n mal ausgewertet werden müssen um die $\tilde{T}_{n,i}$ und somit $\hat{\sigma}_{Jack}^2$ zu bestimmen. Insbesondere bei großen Stichproben ist dies sehr rechenintensiv. Eine Möglichkeit Rechenleistung zu sparen, bietet das sogenannte *Grouped Jackknife* Verfahren. Dabei werden die n Daten in m Gruppen (auch *Bins* genannt) jeweils der Größe d unterteilt, d.h. $n = md$, und die m Schätzer $T_{n-d,i} = T_{n-d,i}(X_1, \dots, X_{id}, X_{(i+1)d+1}, \dots, X_n)$ werden aus den $n-d$ Daten bestimmt, wobei die i -te Gruppe von Datenpunkten weggelassen wird. Der *Grouped Jackknife Schätzer* für die Varianz ist

$$\hat{\sigma}_{GJack}^2 = \frac{m-1}{m} \sum_{i=1}^m \left(T_{n-d,i} - \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m T_{n-d,j} \right)^2.$$

Zur Berechnung des neuen Schätzers müssen die Daten nur m mal ausgewertet werden. Falls $d = 1$ und somit $m = n$ gewählt wird, entspricht die Grouped Jackknife Methode der delete-1 Jackknife Methode.

A.5. Markov-Ketten

Definition A.13 (Markov'sche Eigenschaft, Markov-Ketten). *Es sei $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ ein Wahrscheinlichkeitsraum, (S, \mathcal{S}) ein messbarer Raum und $X_0, X_1, X_2, \dots : \Omega \rightarrow S$ sei eine Folge von Zufallsvariablen. Die Folge $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ heißt Markov-Kette, falls sie die Markov'sche Eigenschaft erfüllt:*

A. Anhang: Mathematische Grundlagen

Für alle $n \in \mathbb{N}$ und $x_0, \dots, x_{n+1} \in S$ mit $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) > 0$ ist

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n).$$

Ist α eine Verteilung auf S , sodass $\mathbb{P}(X_0 = u) = \alpha(u)$ für alle $u \in S$, so heißt α die *Startverteilung* der Markov-Kette $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$. Eine Markov-Kette heißt *homogen*, falls

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = v | X_n = u) = p_{uv}$$

für alle $u, v \in S$ und alle $n \in \mathbb{N}_0$. Dies motiviert die folgende Definition einer *stochastischen Matrix*.

Definition A.14 (Stochastische Matrix). *Es sei S eine endliche Menge, $|S| = n$ und $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $P = (p_{uv})_{u,v \in S}$. Falls $p_{uv} \geq 0$ für alle $u, v \in S$ und $\sum_{v \in S} p_{uv} = 1$ für alle $u \in S$, so heißt P stochastische Matrix.*

Ist also $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Markov-Kette mit Startverteilung α und P eine stochastische Matrix mit $\mathbb{P}(X_1 = v | X_0 = u) = p_{uv}$ für alle $u, v \in S$, dann ist

$$\mathbb{P}(X_1 = v) = \sum_{u \in S} \mathbb{P}(X_0 = u, X_1 = v) = \sum_{u \in S} \alpha(u) p_{uv}.$$

Fasst man also $\alpha = (\alpha(u))_{u \in S}$ als Zeilenvektor auf, so lässt sich mit Hilfe der stochastischen Matrix P die Verteilung von X_1 bestimmen

$$(\mathbb{P}_{X_1}(\{v\}))_{v \in S} = (\mathbb{P}(X_1 = v))_{v \in S} = \left(\sum_{u \in S} \alpha(u) p_{uv} \right)_{v \in S} = \alpha P.$$

Falls die Markov-Kette $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ homogen ist, ist die Verteilung von X_n für alle n durch Angabe von Startverteilung α und *Übergangsmatrix* P vollständig bestimmt. Aus obiger Rechnung folgt nämlich induktiv

$$(\mathbb{P}(X_n = v))_{v \in S} = \alpha P^n.$$

Im Folgenden werden ausschließlich homogene Markov-Ketten betrachtet.

Es stellt sich die Frage, ob die Übergangsmatrix $P = (p_{uv})_{u,v \in S}$ Linkseigenvektoren besitzt und insbesondere ob es Verteilungen π auf S gibt, sodass $\pi P = \pi$. Wenn dem so ist, dann sind alle Zufallsvariablen X_i der Markov-Kette identisch verteilt.

Definition A.15 (Stationäre Verteilung). *Es sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Markov-Kette auf S mit*

Startverteilung α und Übergangsmatrix $P = (p_{uv})_{u,v \in S}$. Eine Verteilung π auf S heißt stationär, falls

$$\pi(v) = \sum_{u \in S} \pi(u)p_{uv}$$

für alle $v \in S$.

Ist also $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Markov-Kette mit stationärer Verteilung π und X_0 π -verteilt, so sind alle X_n π -verteilt.

Definition A.16 (Kommunizierende Zustände und irreduzible Markov-Ketten). Sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Markov-Kette auf S mit Startverteilung α und Übergangsmatrix $P = (p_{uv})_{u,v \in S}$. Ein Zustand $v \in S$ heißt von $u \in S$ aus erreichbar, falls ein $n \in \mathbb{N}$ existiert, sodass $p_{uv}^{(n)} = (P^n)_{uv} > 0$. Ist u von v aus erreichbar und v von u aus erreichbar, so heißen die Zustände u und v kommunizierend, schreibe $u \leftrightarrow v$.

Gilt $u \leftrightarrow v$ für alle $u, v \in S$, so heißt die Markov-Kette irreduzibel.

Definition A.17 (Rekurrente und transiente Zustände). Sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Markov-Kette auf S mit Startverteilung α und Übergangsmatrix $P = (p_{uv})_{u,v \in S}$. Für $u \in S$ bezeichne $T_u = \inf\{n \in \mathbb{N} | X_n = u\}$ den Zeitpunkt der ersten Rückkehr nach u falls $X_0 = u$. Der Zustand u heißt rekurrent, falls

$$\mathbb{P}(T_u < \infty) = 1$$

und transient, falls

$$\mathbb{P}(T_u < \infty) < 1.$$

Ein rekurrenter Zustand $u \in S$ heißt positiv rekurrent, falls zusätzlich

$$\mathbb{E}[T_u] < \infty$$

gilt. Eine Markov-Kette heißt positiv rekurrent, wenn alle $u \in S$ positiv rekurrent sind.

Satz A.18 (Existenz und Eindeutigkeit der stationären Verteilung). Sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine irreduzible, positiv rekurrente Markov-Kette. Dann existiert eine stationäre Verteilung π und diese ist eindeutig bestimmt durch

$$\pi(u) = \frac{1}{\mathbb{E}[T_u]}$$

für alle $u \in S$.

A. Anhang: Mathematische Grundlagen

Für den Beweis dieses Satzes siehe z.B. [MS06]. Im Falle, dass S endlich ist folgt die positive Rekurrenz der Markov-Kette aus der Irreduzibilität und damit existiert eine stationäre Verteilung π , falls die Markov-Kette irreduzibel ist.

Definition A.19 (Detailed Balance). *Eine Markov-Kette $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ auf S mit Übergangsmatrix $P = (p_{uv})_{u,v \in S}$ und Verteilung π heißt reversibel, falls*

$$\pi(u)p_{uv} = \pi(v)p_{vu} \quad (\text{A.7})$$

gilt für alle $u, v \in S$. Man sagt auch, die Markov-Kette erfüllt Detailed Balance.

Satz A.20 (Detailed Balance und stationäre Verteilung). *Sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine homogene Markov-Kette auf S mit Verteilung π und Übergangsmatrix $P = (p_{uv})_{u,v \in S}$, sodass $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ Detailed Balance erfüllt. Dann ist π die stationäre Verteilung von $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$.*

Beweis. Dies lässt sich leicht in einer Zeile nachrechnen. Es sei $u \in S$. Dann gilt

$$(\pi P)_u = \sum_{v \in S} \pi(v)p_{vu} = \sum_{v \in S} \pi(u)p_{uv} = \pi(u) \sum_{v \in S} p_{uv} = \pi(u).$$

Im zweiten Schritt wurde die Eigenschaft des Detailed Balance genutzt und im dritten Schritt, dass P eine stochastische Matrix ist. Da dies für alle $u \in S$ gilt, folgt

$$\pi P = \pi,$$

also ist π die stationäre Verteilung. □

Lässt sich also für eine Verteilung π und eine Übergangsmatrix P Detailed Balance nachweisen, so ist π bereits die stationäre Verteilung. Daraus folgt insbesondere die Irreduzibilität der Markov-Kette. Nun soll geklärt werden, unter welchen Bedingungen die Verteilungen \mathbb{P}_{X_n} gegen eine stationäre Verteilung π konvergieren, falls X_0 nicht π -verteilt ist.

Definition A.21 (Periode, aperiodische Markov-Kette). *Sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Markov-Kette auf S mit Startverteilung α und Übergangsmatrix $P = (p_{uv})_{u,v \in S}$. Die Periode eines Zustandes $u \in S$ ist definiert als*

$$d(u) = \text{ggT}\{n \in \mathbb{N} : p_{uu}^{(n)} > 0\}.$$

Die Markov-Kette $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ heißt aperiodisch, falls $d(u) = 1$ für alle $u \in S$.

Satz A.22 (Konvergenz von Markov-Ketten). *Sei $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine irreduzible, aperiodische Markov-Kette auf einem endlichen Zustandsraum S mit Startverteilung α , Übergangsmatrix P und stationärer Verteilung π . Dann gilt*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(X_n = u) = \pi(u)$$

für alle $u \in S$.

Der Beweis dieses Satzes befindet sich zB. in [MS06].

Für MCMC-Simulationen (vgl. Abschnitt 4.1) thermodynamischer Systeme sind besonders Markov-Ketten von Interesse, die Detailed Balance erfüllen. Aus der statistischen Mechanik ist bekannt, dass sich das System im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, wenn die Zustände nach dem kanonischen (oder großkanonischen) Ensemble verteilt sind. Mathematisch bedeutet das, dass die durch das entsprechende Ensemble beschriebene Verteilung die stationäre Verteilung der Markov-Kette ist. Erfüllt die Übergangsmatrix P der Markov-Kette gemeinsam mit der Ensembleverteilung die Bedingung für Detailed Balance Gl. A.7, so konvergiert die Markov-Kette nach Satz A.22 gegen ihre stationäre Verteilung, falls sie aperiodisch ist. Für höchstens abzählbare Zustandsräume S lassen sich Detailed Balance und Aperiodizität häufig direkt nachrechnen. Physikalisch bedeutet Detailed Balance, dass das System invariant unter Zeitumkehr ist, d.h. das System befindet sich in einem Gleichgewichtszustand.

Literaturverzeichnis

- [AZ02] AIGNER, Martin ; ZIEGLER, Günter M.: *Das BUCH der Beweise*. Springer Verlag, Berlin, 2002
- [Bax73] BAXTER, Rodney J.: Potts model at the critical temperature. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 6 (1973), Nr. 23, S. L445
- [Bax89] BAXTER, Rodney J.: *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press, 1989
- [BB91] BARKEMA, Gerard ; BOER, Jan de: Numerical study of phase transitions in Potts models. In: *Physical Review A* 44 (1991), Nr. 12, S. 8000
- [BGHP92] BAILLIE, Clive F. ; GUPTA, Rajan ; HAWICK, Kenneth A. ; PAWLEY, G S.: Monte Carlo renormalization-group study of the three-dimensional Ising model. In: *Physical Review B* 45 (1992), Nr. 18, S. 10438
- [BKW76] BAXTER, Rodney J. ; KELLAND, Stewart B. ; WU, Frank Y.: Equivalence of the Potts model or Whitney polynomial with an ice-type model. In: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 9 (1976), Nr. 3, S. 397
- [BL84] BINDER, K ; LANDAU, DP: Finite-size scaling at first-order phase transitions. In: *Physical Review B* 30 (1984), Nr. 3, S. 1477
- [CS11] CZADO, Claudia ; SCHMIDT, Thorsten: *Mathematische Statistik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011
- [Die00] DIESTEL, Reinhard: *Graphentheorie*. Bd. 2. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2000
- [FK72] FORTUIN, Cornelis M. ; KASTELEYN, Piet W.: On the Random-Cluster Model: I. Introduction and relation to other models. In: *Physica* 57 (1972), Nr. 4, S. 536

Literaturverzeichnis

- [Fle13] FLEERMANN, Michael: *Seminararbeit: Importance Sampling*. <http://wwwmath.uni-muenster.de/statistik/lehre/WS1213/BlockseminarWT/Vortraege/Fleermann.pdf>, 2013. – Zuletzt aufgerufen am: 23.10.2015
- [FP10] FORCRAND, Philippe de ; PHILIPSEN, Owe: Constraining the QCD phase diagram by tricritical lines at imaginary chemical potential. In: *Physical Review Letters* 105 (2010), Nr. 15, S. 152001
- [Fro10] FROMM, Michael: *Lattice QCD at strong coupling: thermodynamics and nuclear physics*, ETH Zürich, Diss., 2010
- [GL10] GATTRINGER, Christof ; LANG, Christian: *Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010
- [HH64] HAMMERSLEY, JM ; HANDSCOMB, DC: *Monte Carlo Methods*. Methuen & Co Ltd., London, 1964
- [Hua87] HUANG, K: *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 1987
- [Isi25] ISING, Ernst: Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. In: *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 31 (1925), Nr. 1, S. 253
- [JV97] JANKE, Wolfhard ; VILLANOVA, Ramon: Three-dimensional 3-state Potts model revisited with new techniques. In: *Nuclear Physics B* 489 (1997), Nr. 3, S. 679
- [KFKT05] KIM, Seyong ; FORCRAND, Ph de ; KRATOCHVILA, S ; TAKAISHI, T: The 3-state Potts model as a heavy quark finite density laboratory. In: *arXiv preprint hep-lat/0510069v1* (2005)
- [Kra06] KRAUTH, Werner: *Algorithms and computations*. Oxford University Press, New York, 2006
- [KS95] KOLESIK, Miroslav ; SUZUKI, Masuo: Accurate estimates of 3D Ising critical exponents using the Coherent-Anomaly Method. In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 215 (1995), Nr. 1, S. 138
- [LB14] LANDAU, David P. ; BINDER, Kurt: *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2014

- [LL80] LANDAU, LD ; LIFSHITZ, EM: *Statistical Physics Part 1, (Course of theoretical physics Vol. 5)*. Pergamon Press Ltd., 1980
- [MRR⁺53] METROPOLIS, Nicholas ; ROSENBLUTH, Arianna W. ; ROSENBLUTH, Marshall N. ; TELLER, Augusta H. ; TELLER, Edward: Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. In: *The Journal of Chemical Physics* 21 (1953), Nr. 6, S. 1087
- [MS06] MEINTRUP, David ; SCHÄFFLER, Stefan: *Stochastik: Theorie und Anwendungen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006
- [NB99] NEWMAN, M.E.J. ; BARKEMA, G.T.: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics chapter 1-4*. Oxford University Press, 1999
- [Ons44] ONSAGER, Lars: Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. In: *Physical Review* 65 (1944), Nr. 3-4, S. 117
- [Pot52] POTTS, Renfrey B.: Some generalized Order-Disorder Transformations. 48 (1952), Nr. 1, S. 106
- [PSWW84] PAWLEY, G.S. ; SWENDSEN, R.H. ; WALLACE, D.J. ; WILSON, K.G.: Monte Carlo renormalization-group calculations of critical behavior in the simple-cubic Ising model. In: *Physical Review B* 29 (1984), Nr. 7, S. 4030
- [Sme12] SMEKAL, Lorenz von: Universal Aspects of QCD-like Theories. In: *Nuclear Physics B Proceedings Supplement* 228 (2012), S. 179
- [ST96] SHAO, Jun ; TU, Dongsheng: *The Jackknife and Bootstrap*. Springer Science & Business Media, 1996
- [SW87] SWENDSEN, Robert H. ; WANG, Jian-Sheng: Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations. In: *Physical Review Letters* 58 (1987), Nr. 2, S. 86
- [SY82] SVETITSKY, Benjamin ; YAFFE, Laurence G.: Critical behavior at finite-temperature confinement transitions. In: *Nuclear Physics B* 210 (1982), Nr. 4, S. 423–447
- [Wol89] WOLFF, Ulli: Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems. In: *Physical Review Letters* 62 (1989), Nr. 4, S. 361

Literaturverzeichnis

- [Wu82] WU, Fa-Yueh: The Potts model. In: *Reviews of Modern Physics* 54 (1982), Nr. 1, S. 235

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt wurde und dass ich alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen entnommen wurden, als solche kenntlich gemacht habe. Die Arbeit wurde bisher in gleicher oder ähnlicher Form oder auszugsweise keiner Prüfungsbehörde vorgelegt.

Ort, Datum

Unterschrift