Monte-Carlo-Untersuchung der XY-Universalitätsklasse in drei Dimensionen mit Hilfe einer verbesserten Wirkung

Diplomarbeit

Humboldt-Universität zu Berlin
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät I
Institut für Physik

eingereicht von

Tibor Török
geb. am 18.5.1967 in Stuttgart Berlin, Juni 1999

Berlin, Juni 1999

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **3**

2 Gittermodelle **9**
2.1 Einführung und Definitionen 9
2.2 Das Ising-Modell 10
2.3 $\mathcal{O}(N)$-invariante nichtlineare σ-Modelle 11
2.4 Das ϕ^4-Modell 12
2.5 Weitere Gittermodelle 12

3 Monte-Carlo-Simulationen in der statistischen Physik **13**
3.1 Motivation 13
3.2 Simple sampling 13
3.3 Importance sampling und Markov-Prozesse 15
3.4 Der Metropolis-Algorithmus 17
3.5 Fehleranalyse korrelierter Monte-Carlo-Daten 19
3.5.1 Autokorrelationszeiten 20
3.5.2 Die Binning-Methode 21
3.5.3 Die Jackknife-Methode 21
3.6 Critical slowing down 22
3.7 Clusteralgorithmen 23
3.8 Technische Bemerkungen 26
3.8.1 Thermalisierung 26
3.8.2 Ableitungen in Monte-Carlo-Simulationen 27

4 Renormierungsgruppe und kritische Phänomene **28**
4.1 Motivation 28
4.2 Renormierungsgruppe im Ortsraum 29
4.2.1 Blockspintransformationen 29
4.2.2 Renormierungsgruppenfluß und Fixpunkte der Transformation 32
4.2.3 Die Renormierungsgruppe in der Umgebung des Wilson-Fisher-Fixpunktes 33
4.3 Skalengesetze und kritische Exponenten 34

4.4 Finite size scaling 38
4.5 Korrekturen zu Skalengesetzen 39
4.6 Phänomenologische Kopplungen 40

5 Methode der verbesserten Wirkung 41
5.1 Schwierigkeiten bei der Bestimmung kritischer Exponenten mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen 41
5.2 Die Methode der verbesserten Wirkung 42
5.3 Die Bestimmung von λ_{opt} 45
5.4 Die Bestimmung kritischer Exponenten 47

6 Das Simulationsprogramm 49
6.1 Gemessene Größen 50
6.2 Das einkomponentige Modell 51
6.2.1 Tests auf Korrektheit des Programms 51
6.2.2 Vergleich phänomenologischer Kopplungen 52
6.3 Das zweikomponentige Modell 53
6.3.1 Simulationsalgorithmen 53
6.3.2 Tests auf Korrektheit des Programms 55
6.3.3 Programmoptimierung 56
6.4 Technische Details 58

7 Analyse der Daten 59
7.1 Systematische Fehler 59
7.2 Bestimmung von λ_{opt} 60
7.3 Der Exponent η 64
7.4 Der Exponent ν 69
7.5 Die kritische Linie 72
7.6 Bewertung der Ergebnisse 73

8 Zusammenfassung und Ausblick 77

A Exakte Lösung des einkomponentigen Gaußschen Modells 79

B Programmtests für das einkomponentige ϕ^4-Modell 84
B.1 Hochtemperaturentwicklungen 84
B.2 Gaußsches Modell 88
B.3 Ising-Modell 91

C Testergebnisse für das zweikomponentige ϕ^4-Modell 93
C.1 Hochtemperaturentwicklungen 93
C.2 Gaußsches Modell 94
C.3 XY-Modell 98

Kapitel 1

Einleitung

Kritische Phänomene sind bis zum heutigen Tag Gegenstand intensiver Forschung. Man versteht unter kritischen Phänomenen Erscheinungen in der unmittelbaren Umgebung *kontinuierlicher Phasenübergänge* [1].
Als Standardbeispiel für einen kontinuierlichen Phasenübergang dient der Ferromagnet bei Abwesenheit eines äußeren Feldes. Für Temperaturen kleiner als die kritische Temperatur T_c tritt spontane Magnetisierung auf, das System befindet sich in der geordneten (ferromagnetischen) Phase. Für Temperaturen größer als T_c verschwindet die Magnetisierung, es liegt nun die ungeordnete (paramagnetische) Phase vor. Am kritischen Punkt ($T = T_c$) kommt es zu einem kontinuierlichen Phasenübergang. Als Ordnungsparameter des Phasenübergangs dient die Magnetisierung.
Ein charakteristisches Merkmal kritischer Phänomene ist die Divergenz der Korrelationslänge am kritischen Punkt. Dies macht ihre Behandlung extrem schwierig, da Fluktuationen über alle Längenskalen gleichzeitig auftreten können [2]. Bei Phasenübergängen 1.Ordnung bleibt die Korrelationslänge stets endlich, ihre Behandlung gestaltet sich i.a. einfacher.
Neben der Korrelationslänge gibt es weitere thermodynamische Größen, die am Phasenübergang in einer charakteristischen Weise divergieren. Dieses Verhalten spiegelt sich in *Skalengesetzen* wieder. Im folgenden sei als Beispiel die magnetische Suszeptibilität χ angeführt. Das Skalengesetz für die magnetische Suszeptibilität lautet:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \,, \tag{1.1}$$

wobei γ der *kritische Exponent* der magnetischen Suszeptibilität ist. Die 'reduzierte' Temperatur $t = (T - T_c)/T_c$ kennzeichnet den Abstand zum kritischen Punkt. Das Zeichen $\sim$ liest sich als: „... verhält sich im kritischen Bereich wie ...“.

[1] Diese werden häufig auch als Phasenübergänge 2.Ordnung bezeichnet.
[2] Eine schöne Darstellung dieses Sachverhaltes findet man in [1].

Die eingangs erwähnte Korrelationslänge ξ verhält sich im kritischen Bereich in ähnlicher Weise:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \ , \tag{1.2}$$

mit dem kritischen Exponenten ν.
An dieser Stelle kann man sich fragen: „Woher stammt das nachhaltige Interesse an kritischen Phänomenen, wo sie doch nur in einem sehr kleinen Temperaturbereich auftreten ?“
Die Antwort auf diese Frage liefert das bemerkenswerte Phänomen der *Universalität*. Nach der sogenannten *Universalitätshypothese* lassen sich alle Systeme (ob Modellsysteme oder reale makroskopische Systeme), die kontinuierliche Phasenübergänge aufweisen, in *Universalitätsklassen* einteilen. Demnach zeigen an sich (mikroskopisch) verschiedenartige Systeme am Phasenübergang gleichartiges makroskopisches Verhalten, in dem Sinne, daß gewisse (*universelle*) Größen, wie z.B. die kritischen Exponenten, für alle Systeme einer Universalitätsklasse dieselben Werte annehmen.
Zu welcher Universalitätsklasse ein System gehört, hängt hierbei lediglich von drei Faktoren ab: der räumlichen Dimension des Systems, der Symmetrie des Ordnungsparameters und der Reichweite der zugrundeliegenden Wechselwirkung. Das bedeutet insbesondere, daß am Phasenübergang mikroskopische Details des Systems (wie z.B. die genaue Form der Hamiltonfunktion) unwichtig werden.
Zur Untersuchung kritischer Phämonene, d.h. vorwiegend zur Bestimmung universeller Größen, wie z.B. der kritischen Exponenten, greift man neben Experimenten an realen makroskopischen Systemen auch auf vergleichsweise einfache Modellsysteme zurück. Liegen beide Systeme in derselben Universalitätsklasse, so sind nach der Universalitätshypothese auch die Werte aller universeller Größen für beide Systeme dieselben [3].
Daher ist man in der Lage, experimentelle Ergebnisse mit analytischen Rechnungen und numerischen Simulationen an solchen Modellsystemen zu vergleichen [4].
Modellsysteme lassen sich sowohl im Kontinuum als auch auf dem Gitter formulieren. In dieser Arbeit werden lediglich Gittermodelle betrachtet.
Bei Gittermodellen wird jedem Gitterpunkt eine Feldvariable zugeordnet, die mindestens einen Freiheitsgrad [5] enthält und dieser Feldvariablen entsprechend

[3] Es handelt sich hierbei, wie der Name schon sagt, um eine Hypothese. Messungen universeller Größen an verschiedenen Systemen derselben Universalitätsklasse dienen in erster Linie der Bestätigung der Universalitätshypothese. Von besonderem Interesse ist hierbei der Vergleich realer makroskopischer Systeme mit Modellsystemen.

[4] Man darf allerdings von den erwähnten Modellen nicht quantitativ richtige Ergebnisse für nichtuniverselle Größen wie z.B. die kritische Temperatur eines realen Systems erwarten, vielmehr geht es um das Studium des Verhaltens von Systemen mit einer großen Anzahl von Freiheitsgraden.

[5] Wird z.B. jedem Gitterpunkt ein N-dimensionaler Vektor zugeordnet, so kann man von N Freiheitsgraden pro Gitterpunkt sprechen.

der Gitterstruktur eine Wechselwirkung mit Feldvariablen auf benachbarten Gitterpunkten.
Das bekannteste und einfachste Beispiel eines solchen Gittermodells ist das *Ising-Modell*. Es wird im Verlauf dieser Arbeit häufig als Standardbeispiel zur Erläuterung von Konzepten oder Verfahren dienen. Das Ising-Modell gehört zu den sogenannten $\mathcal{O}(N)$-*invarianten nichtlinearen* σ-*Modellen*. Diese werden zusammen mit dem sogenannten ϕ^4-*Modell* [6] in Kapitel 2 vorgestellt.
Gittermodelle können als gelöst angesehen werden, wenn es gelingt, einen geschlossenen analytischen Ausdruck für die freie Energie im thermodynamischen Limes anzugeben. Das ist trotz der einfachen Struktur der Modelle leider nur in wenigen Fällen möglich [7].
Zur Bestimmung universeller Größen ist man also meistens gezwungen, auf Näherungsmethoden zurückzugreifen. Als Beispiele [8] seien an dieser Stelle genannt: Die Theorie der sogenannten *Molekularfeldnäherung* („mean field approximation") (siehe z.B. [6]), und Verbesserungen hiervon („coherent-anomaly method") [7] , Hoch-und Tieftemperaturentwicklungen (siehe z.B. [5]) sowie Entwicklungen in $1/N$ um $N = \infty$ [9].
Neben den genannten analytischen Methoden haben in den letzten Jahren, nicht zuletzt aufgrund der rasanten Entwicklung der Computertechnologie, *Monte-Carlo-Simulationen* (Kapitel 3) immer mehr an Bedeutung gewonnen. Hierbei werden Erwartungswerte thermodynamischer Größen durch Mittelwerte angenähert, die aus (mit Hilfe stochastischer Prozesse erzeugten) Stichproben aus der Menge aller möglichen Konfigurationen des zugrundeliegenden Modells stammen.
Die theoretische Grundlage unseres heutigen Verständnisses kritischer Phänomene bildet die *Renormierungsgruppe*. Unter anderem läßt sich mit ihrer Hilfe verstehen, wie es zu Skalengesetzen und Universalität kommt. Die Renormierungsgruppe ist ein sehr mächtiges Werkzeug, es ist jedoch wichtig zu bemerken, daß ihre Stärken darin liegen, *qualitative* Ergebnisse, wie z.B. Skalengesetze, zu liefern. Für *quantitative* Ergebnisse, wie z.B. Zahlenwerte für universelle Größen, ist man nach wie vor auf oben erwähnte Näherungsmethoden und Monte-Carlo-Simulationen angewiesen. Die Grundlagen der Renormierungsgruppe im Zusammenhang mit kritischen Phänomenen werden ausführlich in Kapitel 4 erläutert.
Vorrangiges Ziel dieser Arbeit war die Bestimmung der kritischen Exponenten für die dreidimensionale (3d) XY-Universalitätsklasse mit Hilfe von Monte-Carlo-

[6] Es ist auch die Bezeichnung *Landau-Ginzburg-Modell* gebräuchlich. Für das ϕ^4-Modell existiert neben der Beschreibung auf dem Gitter auch eine kontinuierliche Formulierung.

[7] Eine Zusammenfassung gelöster Gittermodelle findet man in [3].

[8] Die genannten Beispiele sind Methoden, die auf dem Gitter angewandt werden. Es gibt daneben noch weitere, die im Kontinuum Verwendung finden. Wichtige Beispiele hierfür sind im Zusammenhang mit kritischen Phänomenen: die Landau-Theorie (siehe z.B. [4]), störungstheoretische Rechnungen in drei Dimensionen (siehe z.B. [8]), ϵ-Entwicklungen (siehe z.B. [8]).

[9] Die $\mathcal{O}(N)$-invarianten nichtlinearen σ-Modelle sind im Limes $N \to \infty$ exakt gelöst. N kennzeichnet die Dimension der Feldvariablen. Für eine Einführung in $1/N$-Entwicklungen siehe z.B. [9].

Simulationen. Diese Universalitätsklasse ist von besonderem Interesse, da für sie experimentell erhaltene Werte für kritische Exponenten existieren, die die theoretisch bestimmten an Genauigkeit deutlich übertreffen. Diese Experimente wurden für den λ-Phasenübergang von ^{4}He durchgeführt [10]. Beispiele für solche Experimente sind die Arbeiten [11, 12, 13]. Eine einführende Darstellung des Phasenübergangs findet man z.B. in [14].
Die Bestimmung kritischer Exponenten mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen wird, neben der unvermeidlichen Beschränkung der Computerressourcen, hauptsächlich durch zwei Dinge erschwert: Zum einen existieren Korrekturen zu den Skalengesetzen und zum anderen können Computersimulationen nur auf endlich großen Gittern durchgeführt werden. Die Schwierigkeiten, die sich aus diesen beiden Punkten ergeben, sowie die in dieser Arbeit angewandten Methoden zu ihrer Überwindung sollen im folgenden kurz angerissen werden:
Skalengesetze der Form (4.19) und (4.21) gelten nur in einer infinitesimal kleinen Umgebung des Phasenüberganges und für das unendlich große System (thermodynamischer Limes), da es nur für dieses zu einem echten Phasenübergang, also auch zur Divergenz thermodynamischer Größen [11], kommen kann. Befindet man sich nicht in einer infinitesimal kleinen Entfernung vom kritischen Punkt, so sind Korrekturen zu berücksichtigen:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}(1 + a|t|^{\theta} + b|t| + ...). \tag{1.3}$$

θ heißt in der Literatur „universal correction to scaling exponent“. Die Korrektur $\sim |t|^{\theta}$ ist nicht-analytisch. Man weiß z.B. aus der ϵ-Entwicklung, daß für die 3d-XY-Universalitätsklasse $\theta \approx 0.5$ ist. Der Term $\sim |t|$ ist eine analytische Korrektur. Daneben gibt es noch eine Vielzahl höherer Korrekturen, über die bis heute quantitativ nur wenig bekannt ist.
Gleichung (1.3) gilt nach wie vor nur für das unendlich große System. In der Praxis bedeutet dies für Monte-Carlo-Simulationen, daß die Bedingung $\xi << L$, wobei L die lineare Gitterausdehnung ist [12], eingehalten werden muß. Die Korrelationslänge ξ wächst für $t \to 0$ stark an, so daß man in Simulationen bei Annäherung an den Phasenübergang zu sehr großen Gittern übergehen muß. Dies ist jedoch in der Praxis kaum durchführbar, da die Rechenzeit rapide ansteigt.
Den Ausweg aus diesem Dilemma liefert das sogenannte *finite size scaling*. Mit Hilfe der Renormierungsgruppe lassen sich hierbei unter Berücksichtigung der führenden nicht-analytischen Korrektur für endliche Gitter verallgemeinerte

[10] Man geht davon aus, daß ^{4}He in der Umgebung des Übergangs in der 3d-XY-Universalitätsklasse liegt. Siehe z.B. [10].

[11] Divergenzen thermodynamischer Größen erscheinen bei Simulationen endlicher Systeme stets 'gerundet', nähern sich aber mit wachsender Systemgröße dem Verhalten im thermodynamischen Limes an.

[12] In dieser Arbeit wurden lediglich einfach kubische Gitter der Größe L^d betrachtet.

„Finite-Size-Skalengesetze“ der Form

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}\Phi\left(\frac{t}{t_0}L^{1/\nu}, cL^{-\omega}\right) \tag{1.4}$$

herleiten, wobei die Konstanten t_0 und c vom betrachteten System abhängen. Hierbei gilt für die 3d-XY-Universalitätsklasse: $\omega = \theta/\nu \approx 0.8$. Die Funktion Φ wird als *Skalenfunktion* bezeichnet. Sie ist universell und analytisch und läßt sich für kleine t und hinreichend große L entwickeln:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}(1 + c_1 t L^{1/\nu} + c_2 L^{-\omega} + ...)\,. \tag{1.5}$$

Gesetze dieser Art sind nun auch gültig, wenn $\xi << L$ nicht mehr erfüllt ist. Wichtig ist die Tatsache, daß die kritischen Exponenten dieselben sind wie in den Skalengesetzen. Man kann mit Hilfe des finite size scaling also auch Simulationen zur Bestimmung kritischer Exponenten in der unmittelbaren Nähe des Phasenübergangs durchführen (man spricht dann häufig von „Finite-Size-Techniken“). Simuliert man genau am kritischen Punkt, so ist $t = 0$ und es gilt:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}(1 + c_2 L^{-\omega} + ...). \tag{1.6}$$

Der Term $\sim L^{-\omega}$ wird als *führende Skalenkorrektur* bezeichnet. Daneben gibt es eine Vielzahl weiterer Skalenkorrekturen, die jedoch schwächer ins Gewicht fallen [13].

Die führende Skalenkorrektur erschwert nun beträchtlich die Bestimmung kritischer Exponenten, da sie in Fitansätze miteinbezogen werden muß [14]. Man möchte sie also gerne 'loswerden'. Der naheliegendste Ansatz ist es, die Simulation an sehr großen Gittern durchzuführen, was jedoch einen starken Anstieg der benötigten Rechenzeit mit sich führt.

Ein wesentlich eleganterer Zugang ist die Methode der *verbesserten Wirkung* („improved action“). Hierbei betrachtet man im einfachsten Fall Modelle, deren Hamiltonfunktion bzw. Wirkung zwei Parameter (Kopplungskonstanten) enthält[15]. Die Amplitude c_2 der führenden Skalenkorrektur in (1.6) hängt dann direkt von einer dieser Kopplungskonstanten ab. Die Amplitude besitzt eine Nullstelle, die für alle Größen, die ein Verhalten der Form (1.6) aufweisen, gleich ist. Man versucht nun durch geeignete Wahl der Kopplungskonstanten die führende Skalenkorrektur zu eliminieren (Kapitel 5).

Die Monte-Carlo-Simulationen zur Bestimmung der kritischen Exponenten der 3d-XY-Universalitätsklasse wurden am zweikomponentigen ϕ^4-Modell ausgeführt.

[13] Der nächsthöhere Korrekturexponent für die 3d-XY-Universalitätsklasse ist $\omega' \approx 2$.

[14] Je mehr freie Parameter ein Fitansatz enthält, umso genauer müssen die Meßdaten sein, will man die Genauigkeit der gefitteten Größe festhalten. Für Monte-Carlo-Simulationen bedeutet dies eine Erhöhung der Rechenzeit.

[15] Üblicherweise enthalten Modelle wie das Ising-Modell lediglich eine Kopplungskonstante in der Hamiltonfunktion, sofern man sie ohne äußeres Feld betrachtet.

Hierbei wurden Finite-Size-Techniken und die Methode der verbesserten Wirkung verwendet. Das Simulationsprogramm wird in Kapitel 6 beschrieben, Kapitel 7 enthält die Auswertung der Daten und den Vergleich der Ergebnisse dieser Arbeit mit experimentell und theoretisch erhaltenen Werten anderer aktueller Arbeiten. Kapitel 8 schließlich bietet eine Zusammenfassung und einen Ausblick.

Kapitel 2

Gittermodelle

2.1 Einführung und Definitionen

Unter einem Gitter versteht man allgemein eine periodische Anordnung von Punkten. Der Einfachheit halber werden in dieser Arbeit ausschließlich einfach kubische Gitter in d Dimensionen mit linearer Abmessung $\tilde{L}$ in jeder der d Raumrichtungen betrachtet. Die Gitterkonstante a bezeichnet den Abstand der Gitterpunkte. Im folgenden soll unter der (linearen) 'Gitterlänge' L stets $\tilde{L}/a$ verstanden werden, womit L eine dimensionslose Größe ist. Die Anzahl der Gitterpunkte ist dann $V = L^d$.
Die Gitterpunkte seien in jeder Raumrichtung mit $0, 1, ..., L-1$ durchnumeriert, jeder Gitterpunkt (*site*) kann dann durch ein d-Tupel (Koordinaten) gekennzeichnet werden. Die einzelnen Raumrichtungen $1, ..., d$ seien mit μ bezeichnet, $\hat{\mu}$ sei ein Einheitsvektor in Richtung μ. Zwei Gitterpunkte gelten als direkt benachbart, wenn sie sich in einer ihrer Koordinaten um ± 1 unterscheiden.
Um nun ein Gittermodell zu erhalten, wird jedem Gitterpunkt ein oder mehrere lokale Freiheitsgrade zugeordnet, die Werte aus einer bestimmten Menge S annehmen können. Eine Konfiguration C ist dann die Vorgabe von Werten aus S für die lokalen Freiheitsgrade an jedem Punkt.
Auf den Gittermodellen lassen sich Observablen A definieren [1].
Zur Bestimmung von Erwartungswerten von Observablen benötigt man noch die Definition einer Hamiltonfunktion H für das jeweilige Modell. In der statistischen Physik stehen verschiedene Gesamtheiten zur Bestimmung von Erwartungswerten im thermodynamischen Gleichgewicht zur Verfügung. Bei den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen wurde stets die kanonische Gesamtheit gewählt. In dieser definiert die Hamiltonfunktion einen Boltzmannfaktor $\exp(-\beta H)$ und damit die Zustandssumme Z des Systems. Der Erwartungswert $\langle A \rangle$ einer Observa-

[1] Wir betrachten Modelle der statistischen Physik. Bei A wird es sich also i.a. um eine 'Modellversion' einer thermodynamischen Größe, wie z.B. der Magnetisierung, handeln.

blen A ist dann gegeben durch:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_C A(C) \exp(-\beta H(C)) \ , \tag{2.1}$$

wobei

$$Z = \sum_C \exp(-\beta H(C)) \tag{2.2}$$

die Zustandssumme des Systems ist und $\sum_C$ die Summe über alle möglichen Konfigurationen bezeichnet [2].
Die Hamiltonfunktion eines Gittermodells setzt sich i.a. aus Termen zusammen, die Freiheitsgrade auf benachbarten Gitterpunkten miteinander koppeln. Hat das zugrunde gelegte Gitter eine endliche Ausdehnung, so müssen geeignete Randbedingungen definiert werden. In dieser Arbeit werden ausschließlich periodische Randbedingungen betrachtet. Das bedeutet, daß die Gitterpunkte $(..., x_{i-1}, 0, x_{i+1}, ...)$ und $(..., x_{i-1}, L-1, x_{i+1}, ...)$ als direkt benachbart gelten, und zwar für alle $i = 1, ..., d$. Diese Wahl der Randbedingungen hat eine hohe Symmetrie, da alle Punkte gleichberechtigt sind. Abbildung 2.1 illustriert periodische Randbedingungen am Beispiel eines zweidimensionalen Gitters.

2.2 Das Ising-Modell

Das einfachste Gittermodell ist das Ising-Modell. Es war ursprünglich als sehr einfache Beschreibung eines Ferromagneten mit uniaxialer Symmetrie gedacht, kann jedoch darüber hinaus auch zur Beschreibung von z.B. binären Gemischen dienen.
Das Ising-Modell ist für $d = 1$ [15] und $d = 2$ [16] exakt gelöst, für den dreidimensionalen Fall existiert bis heute trotz der Einfachheit des Modells keine exakte Lösung. Die Feldvariable (*spin*) s_x kann beim Ising-Modell lediglich die Werte $s_x \in \{-1, 1\}$ annehmen. Geht man von der Modellierung eines einfachen Ferromagneten aus, so symbolisieren die Spins kleine Elementarmagneten, die sich lediglich entlang einer Achse ausrichten können („spin up“, „spin down“).
Die Hamiltonfunktion ist gegeben durch:

$$H = -J \sum_{<xy>} s_x s_y - h \sum_x s_x \ , \tag{2.3}$$

[2] (2.1) und (2.2) gelten streng genommen nur für Modelle mit diskreten Freiheitsgraden, deren Konfigurationen abzählbar sind. Bei Gittermodellen mit kontinuierlichen Freiheitsgraden, wie das in dieser Arbeit betrachtete ϕ^4-Modell, sind die Konfigurationen nicht mehr abzählbar. In diesem Fall ist die Summe über alle Konfigurationen durch ein nV-dimensionales Integral über die einzelnen Feldvariablen zu ersetzen, wobei n die Zahl der Freiheitsgrade pro Gitterpunkt (Dimension der Feldvariablen) und V die Anzahl der Gitterpunkte ist. Für die in diesem Kapitel dargestellten Sachverhalte ist dieser Unterschied allerdings ohne Bedeutung, man kann die Summe auch als ein solches Integral lesen.

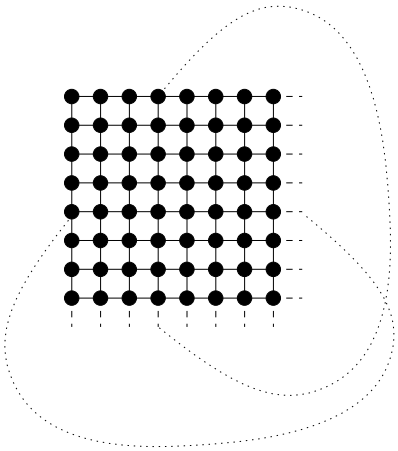

Abbildung 2.1: Periodische Randbedingungen in 2d: Die durch gestrichelte Kurven verbundenen Gitterpunkte gelten als direkt benachbart. Die Abbildung stammt aus [17].

wobei x die einzelnen Gitterpunkte numeriert und s_x der Wert des Spins auf dem Gitterpunkt x ist. Dabei bezeichnet $< xy >$ ein Paar von nächsten Nachbarpunkten auf dem Gitter. J ist die Kopplungsstärke zwischen benachbarten Spins und h ein äußeres Feld. Für $J > 0$ hat man das Modell eines Ferromagneten, für $J < 0$ das eines Antiferromagneten. In dieser Arbeit wird des öfteren o.B.d.A. $J = 1$ gesetzt. Für den Spezialfall $h = 0$ weist das Modell für $d \geq 2$ einen kontinuierlichen Phasenübergang auf.
Als Beispiel für eine Observable sei die Magnetisierung angeführt:

$$M = \sum_x s_x \ . \tag{2.4}$$

2.3 $\mathcal{O}(N)$-invariante nichtlineare σ-Modelle

Wählt man verallgemeinernd die Feldvariable als N-dimensionalen Einheitsvektor, so erhält man die sogenannten $\mathcal{O}(N)$-symmetrischen nichtlinearen σ-Modelle. Für $N = 1$ bekommt man das Ising-Modell, für $N = 2$ das *XY-Modell* und für $N = 3$ das *Heisenberg-Modell*.
Die Bezeichnung $\mathcal{O}(N)$ bezieht sich auf die Invarianz dieser Modelle: Für eine Drehung $R \in \mathcal{O}(N)$ ändert die Transformation $\vec{s}_x \to R\vec{s}_x$, an allen Gitterpunkten x gleichzeitig ausgeführt, die Hamiltonfunktion nicht.

2.4 Das ϕ^4-Modell

Beim ϕ^4-Modell (Landau-Ginzburg-Modell) auf dem Gitter [3] ist die Feldvariable $\vec{\phi}_x$ ein N-dimensionaler Vektor mit reellen Komponenten.
Die Wirkung [4] ist gegeben durch:

$$S = \sum_x \left\{ -\beta \sum_\mu \vec{\phi}_x \vec{\phi}_{x+\hat{\mu}} + \vec{\phi}_x^2 + \lambda(\vec{\phi}_x^2 - 1)^2 \right\} . \tag{2.5}$$

Der Boltzmannfaktor ist gegeben durch $\exp(-S)$. β findet man in der Literatur oft auch die Bezeichnung 2κ (κ wird häufig als 'hopping parameter' bezeichnet). Das Modell weist in $d \geq 2$ einen kontinuierlichen Phasenübergang auf. Aufgrund der zwei Parameter (Kopplungskonstanten) β und λ in der Wirkung findet man hierbei eine *kritische Linie* $\beta_c(\lambda)$, die die beiden Phasen voneinander trennt [5].
Für $\lambda = 0$ erhält man das N-komponentige Gaußsche Modell, im Limes $\lambda \to \infty$ wird das Modell in Abhängigkeit von N exakt zum jeweiligen $\mathcal{O}(N)$-symmetrischen nichtlinearen σ-Modell [6].
In drei Dimensionen liegt für $\lambda > 0$ das N-komponentige Modell in der gleichen Universalitätsklasse wie das entsprechende $\mathcal{O}(N)$-symmetrische nichtlineare σ-Modell.

2.5 Weitere Gittermodelle

Neben den bereits vorgestellten gibt es eine Vielzahl weiterer Gittermodelle, zum Beispiel die *q-Zustands Pottsmodelle*, die ebenfalls eine Verallgemeinerung des Ising-Modells darstellen. Hier kann der Spin q verschiedene Zustände einnehmen, also $s_x \in 1, 2, ..., q$. Die Hamiltonfunktion dieses Modells lautet:

$$H = -J \sum_{<xy>} \delta_{s_x, s_y} . \tag{2.6}$$

Für einen einführenden Überblick in das Thema Gittermodelle sei z.B. auf [6] verwiesen.

[3] Für dieses Modell existiert auch eine Formulierung im Kontinuum.

[4] Das Modell stammt aus der Feldtheorie. Dort ist die Bezeichnung Wirkung üblich. Der Zusammenhang mit der Hamiltonfunktion ist gegeben durch: $S = \beta H$.

[5] Beim Ising-Modell ohne äußeres Feld enthält die Hamiltonfunktion nur einen Parameter β. Somit gibt es lediglich einen kritischen *Punkt* (bei $\beta = \beta_c$).

[6] Der Grenzfall $\lambda \to \infty$ erzwingt $|\vec{\phi}_x| = 1$.

Kapitel 3

Monte-Carlo-Simulationen in der statistischen Physik

In diesem Kapitel sollen die grundlegenden Verfahren der Monte-Carlo-Simulationen in der statistischen Physik, insbesondere im Zusammenhang mit Gittermodellen, erläutert werden. Dabei wird zur Veranschaulichung des öfteren auf das in Abschnitt 2.2 eingeführte Ising-Modell zurückgegriffen. Die Darstellung ist bei weitem nicht vollständig, zur Vertiefung greife man beispielsweise auf [18, 19, 20] zurück.

3.1 Motivation

Ein Modell der statistischen Physik kann als gelöst angesehen werden, wenn es gelungen ist, die Zustandssumme (2.2) zu berechnen. Dies ist jedoch auf direktem Wege bereits für das sehr einfache Ising-Modell äußerst schwierig. Der Grund liegt darin, daß die Zahl der Konfigurationen beim Ising-Modell mit wachsender Gittergröße exponentiell ansteigt, genauer mit 2^V, wenn V die Anzahl der Gitterpunkte bezeichnet. Man muß also nach anderen Methoden zur Lösung des Modells Ausschau halten. Für das ein- und zweidimensionale System existieren exakte Lösungen (z.B. der Transfermatrixformalismus), für das dreidimensionale System gibt es bis heute keine Methode zur exakten Lösung des Modells. Hier kann nun neben den in der Einleitung erwähnten Näherungsmethoden die Technik der Monte-Carlo-Simulation helfen.

3.2 Simple sampling

Die grundlegende Idee der Monte-Carlo-Simulation ist es, aus der riesigen Zahl möglicher Konfigurationen eine Stichprobe von N Konfigurationen zufällig herauszugreifen und den Erwartungswert $\langle A \rangle$ der Observablen A durch den Mittel-

wert $\bar{A}$ anzunähern [1]. Zufällig heißt in diesem Zusammenhang, daß die Konfigurationen mit Hilfe eines stochastischen Prozesses erzeugt werden.
Der naivste Zugang ist hierbei, die N Konfigurationen C_i unabhängig voneinander und mit gleichem statistischen Gewicht zu erzeugen. Diese Methode wird als *simple sampling* bezeichnet. Der so erhaltene Mittelwert der Größe A lautet:

$$\bar{A} = \frac{1}{\sum\limits_{i=1}^{N} \exp(-\beta H(C_i))} \sum_{i=1}^{N} A(C_i) \exp(-\beta H(C_i)) \ , \tag{3.1}$$

wobei die 'Messwerte' $A(C_i)$ und $H(C_i)$ die Werte der Observablen A und H sind, die sich aus der Konfiguration C_i ergeben.
Die Methode des simple samplings ist, wie der Name schon sagt, sehr einfach, hat aber einen gravierenden Nachteil: Nur wenige Konfigurationen haben nämlich einen vergleichsweise großen Boltzmannfaktor $\exp(-\beta H)$. Demzufolge tragen auch nur wenige Konfigurationen entscheidend zur Zustandssumme und damit auch zum Erwartungswert der Größe A bei. Dieser Sachverhalt wird mit steigender Gittergröße immer ausgeprägter. Zur Veranschaulichung betrachte man Tabelle 3.1.

L	Anteil
2	0.875
3	0.133
4	0.0343
5	0.00283

Tabelle 3.1: Anteil der Konfigurationen die nötig sind, um 90% der Zustandssumme im 2d Ising-Modell am Phasenübergang zu erhalten.

Beim simple sampling werden nun aber alle N Konfigurationen mit gleicher Wahrscheinlichkeit erzeugt. Das bedeutet, daß man die meisten Konfigurationen 'nutzlos' erzeugt. Die Methode des simple sampling ist also sehr uneffektiv. Eine bessere Idee wäre es, von vornherein die maßgeblichen Konfigurationen herauszugreifen, sie also bereits mit einer Wahrscheinlichkeit proportional zu ihrem Boltzmannfaktor zu erzeugen. Dies ist in der Tat möglich und wird als *importance sampling* bezeichnet.

[1] Im Limes $N \to \infty$ wird $\bar{A}$ zu $\langle A \rangle$.

3.3 Importance sampling und Markov-Prozesse

Die Methode des importance sampling versetzt uns in die Lage, Konfigurationen mit ihrer Boltzmann-Wahrscheinlichkeit

$$p(C) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H(C)) \tag{3.2}$$

zu erzeugen.
Der Erwartungswert einer Observablen A wird dann angenähert durch:

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} A(C_i) \ . \tag{3.3}$$

Zunächst einmal ist die direkte Erzeugung einer Konfiguration mit ihrer zugehörigen Wahrscheinlichkeit (3.2) nicht möglich, da die Zustandssumme Z, die die richtige Normierung festlegt, nicht bekannt ist. Man kennt aber stets das Verhältnis

$$\frac{p(X)}{p(Y)} = \exp(-\beta(H(X) - H(Y)) \ , \tag{3.4}$$

wobei X und Y zwei beliebige Konfigurationen sein sollen. Es ist nun möglich, Konfigurationen mit ihrem richtigen Gewicht nur aufgrund dieser Kenntnis zu erzeugen.
Der hierbei zugrunde gelegte stochastische Prozeß heißt *Markov-Prozeß*. Im folgenden sei ein Markov-Prozeß (Markov-Kette) 1.Ordnung betrachtet. Die einzelnen Glieder der Kette sind generierte Konfigurationen des Modells. Man erzeugt diese jedoch nicht wie beim simple sampling unabhängig voneinander, sondern eine neue Konfiguration C_{i+1} ausgehend von einer bereits vorhandenen C_i, der zu diesem Zeitpunkt letzten in der Kette. Man erhält also eine stochastische Dynamik, d.h. eine zeitliche Abfolge von Konfigurationen.
Der Markov-Prozeß 1.Ordnung zeichnet sich nun dadurch aus, daß alle Konfigurationen, die in diesem Sinne zeitlich vor C_i liegen, für die Erzeugung von C_{i+1} keine Rolle spielen (man spricht deshalb auch von einem gedächtnislosen Prozeß). Die statistischen Eigenschaften der Markov-Kette sind vollständig beschrieben durch Festlegung einer Übergangswahrscheinlichkeit $P(C_{i+1}, C_i)$ von einer Konfiguration C_i zu einer Konfiguration C_{i+1}. Entscheidend ist nun, daß, bei Einhaltung bestimmter Bedingungen an $P(C_{i+1}, C_i)$, die durch die Markov-Kette erzeugte Verteilung der Konfigurationen im Limes unendlich vieler erzeugter Konfigurationen gegen die Boltzmannverteilung konvergiert. Diese Bedingungen lauten im einzelnen (seien im folgenden erneut X und Y zwei beliebige Konfigurationen):
1. Normierung:

$$\sum_Y P(Y, X) = 1 \ . \tag{3.5}$$

Dies gelte für alle X und bedeutet, daß es genau eine Nachfolgekonfiguration gibt.

2. Ergodizität:

$$P(Y,X) > 0 \ . \tag{3.6}$$

Dies gelte für alle X und alle Y und bedeutet, daß jede Konfiguration erreicht werden kann.
3. Stabilität:

$$\sum_X P(Y,X)p(X) = p(Y) \ , \tag{3.7}$$

mit p gemäß (3.2). Dies gelte für alle Y.
Es seien nun die Bedingungen 1. bis 3. erfüllt und es bezeichne $V(X)$ eine Verteilung der erzeugten Konfigurationen. Gegeben sei eine Startverteilung $V_0(X)$. Die Kette wird fortgesetzt durch $V_{t+1}(X) = \sum_Y P(X,Y)V_{t+1}(Y)$.
Dann wird im Limes großer t die Boltzmannverteilung erreicht:

$$\lim_{t\to\infty} ||V_t - p|| = 0 \ , \tag{3.8}$$

mit

$$||V_t - p|| := \sum_X |V_t(X) - p(X)| \ . \tag{3.9}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
& \sum_X |V_{t+1}(X) - p(X)| \\
= & \sum_X |\sum_Y P(X,Y)V_t(Y) - p(X)| \\
= & \sum_X |\sum_Y P(X,Y)(V_t(Y) - p(Y))| \\
& \text{Mit } \tilde{P}(X,Y) = P(X,Y) - P_{min} \geq 0 \text{ und } P_{min} > 0\text{:} \\
= & \sum_X |\sum_Y \tilde{P}(X,Y)(V_t(Y) - p(Y)) + P_{min}\sum_Y (V_t(Y) - p(Y))| \\
& \text{Mit der Dreiecksungleichung:} \\
\leq & \sum_X \sum_Y |\tilde{P}(X,Y)(V_t(Y) - p(Y))| \\
& \text{Da } \tilde{P}(X,Y) \geq 0 : \\
= & \sum_X \sum_Y \tilde{P}(X,Y)|(V_t(Y) - p(Y))| \\
& \text{Mit der Eigenschaft 1.:} \\
= & (1 - NP_{min})\sum_Y |(V_t(Y) - p(Y))| \ ,
\end{aligned} \tag{3.10}$$

wobei N die Zahl aller Konfigurationen und P_{min} die minimale Übergangswahrscheinlichkeit bezeichnet.
Damit wurde gezeigt, daß die Markovkette bei beliebiger Startverteilung gegen die Boltzmannverteilung konvergiert.

Es gilt:

$$||V_t - p|| \;\leq\; \exp\left(-\frac{t}{r}\right)\; ||V_0 - p|| \;, \tag{3.11}$$

mit:

$$r = -1/\ln(1 - NP_{min}) \;. \tag{3.12}$$

Schlägt man nun einen konkreten Algorithmus vor, der die Eigenschaften der Markov-Kette ausnutzt und somit Konfigurationen mit ihrem richtigen statistischen Gewicht erzeugt, so ist stets zu zeigen, daß der Algorithmus obige Bedingungen erfüllt. Die Stabilität ist in der Praxis für einen vorgeschlagenen Algorithmus i.a. schwer zu zeigen. Man begnügt sich deshalb häufig mit der stärkeren, aber dafür einfacheren Bedingung:

$$\frac{P(Y,X)}{P(X,Y)} = \frac{p(Y)}{p(X)} \;. \tag{3.13}$$

Diese Bedingung wird als *detailed balance* bezeichnet und gelte für alle X und alle Y. Sie ist hinreichend für die Stabilität, wie man unter Benutzung der Normierung einfach sieht:

$$\sum_X P(Y,X)p(X) = \sum_X P(X,Y)p(Y) = p(Y) \;. \tag{3.14}$$

In diesem Zusammenhang sei noch bemerkt, daß die Verkettung einzelner Markov-Prozesse, die jeder für sich detailed balance erfüllen, zu einem Gesamtprozeß möglich ist, der zwar in der Regel detailed balance nicht mehr erfüllt, wohl aber das entscheidende Kriterium der Stabilität.

3.4 Der Metropolis-Algorithmus

In diesem Abschnitt soll der Metropolis-Algorithmus [21], der die Eigenschaften eines Markov-Prozesses erfüllt und somit importance sampling liefert, erläutert werden. Dieser Algorithmus wurde auch bei den Simulationen in dieser Arbeit eingesetzt.

Beim Metropolis-Algorithmus wird die Übergangswahrscheinlichkeit in zwei Teile aufgespalten: zum einen in die Wahrscheinlichkeit $T(Y,X)$, ausgehend von einer Konfiguration X eine Konfiguration Y vorzuschlagen, und zum anderen in die Wahrscheinlichkeit $A(Y,X)$, mit der der Vorschlag Y akzeptiert wird. Falls er nicht akzeptiert wird, so wird einfach die alte Konfiguration beibehalten. Somit läßt sich $P(Y,X)$ schreiben als:

$$P(Y,X) = A(Y,X)T(Y,X) + \left(1 - \sum_Y A(Y,X)T(Y,X)\right)\delta(X,Y). \tag{3.15}$$

Dabei werden an T und A folgende Bedingungen gestellt:

$$\sum_Y T(Y,X) = 1, \tag{3.16}$$

$$T(X,Y) = T(Y,X) \tag{3.17}$$

und

$$A(Y,X) = \min\{1, \exp(-\beta(H(Y) - H(X))\}\,. \tag{3.18}$$

Gleichung (3.18) ist hierbei nicht die einzige Möglichkeit für die Wahl einer Akzeptanzwahrscheinlichkeit. Die einfachste Modifikation wäre es, $A(Y,X)$ mit einer Konstanten zwischen 0 und 1 zu multiplizieren, was jedoch in der Regel zu einer Verschlechterung des Algorithmus führt.
Es bleibt noch zu beweisen, daß der Algorithmus tatsächlich die in Abschnitt 3.3 aufgeführten Bedingungen für die Erzeugung boltzmannverteilter Konfigurationen erfüllt.
Die Normierungsbedingung (3.5) ist erfüllt, wie man sofort an (3.15) sieht.
Der Beweis von detailed balance (3.13) lautet wie folgt:
Seien $X \neq Y$ und $H(X) > H(Y)$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}\frac{P(Y,X)}{P(X,Y)} &= \frac{T(Y,X)A(Y,X)}{T(X,Y)A(X,Y)} \\ &= \frac{1}{\exp(-\beta(H(X) - H(Y))} \\ &= \frac{\exp(-\beta H(Y))}{\exp(-\beta H(X))}\,.\end{aligned}$$

Analog zeigt man $H(X) \leq H(Y)$, der Fall $X = Y$ ist trivial. Zum Beweis der Ergodizität muß die Vorschlagswahrscheinlichkeit $T(Y,X)$ noch genauer spezifiziert werden.
Der Einfachheit halber sei dies hier am Beispiel des Ising-Modells durchgeführt [2].
Bei der konkreten Anwendung des Metropolis-Algorithmus auf das Ising-Modell wird in einem elementaren Schritt vorgeschlagen, den Wert des Spins s_x am Gitterpunkt x umzuklappen (zu *flippen*), um eine neue Konfiguration zu erzeugen. Die Vorschlagswahrscheinlichkeit dafür läßt sich schreiben als:

$$T_x(Y,X) = \delta([s_1, ..., -s_x, ..., s_V], [s_1, ..., s_x, ..., s_V])\,. \tag{3.19}$$

Zur Bestimmung der Akzeptanzwahrscheinlichkeit muß $H(Y) - H(X)$ berechnet werden. Hierbei heben sich die meisten Terme auf, da sich der Spin nur an einem Gitterpunkt ändert.

[2] Die Umsetzung des Metropolis-Algorithmus auf das in dieser Arbeit benutzte ϕ^4-Modell findet sich in Abschnitt 6.3.1

Es bleibt:

$$H(Y) - H(X) = 2s_x \sum_{y.nn.x} s_y \ , \tag{3.20}$$

wobei $y.nn.x$ bedeutet: y ist nächster Nachbar von x. Man erhält:

$$A_x(Y, X) = \min\left\{1, \exp\left(-2\beta s_x \sum_{y.nn.x} s_y\right)\right\} \ . \tag{3.21}$$

Ein solcher Elementarschritt reicht jedoch nicht aus, um Ergodizität zu gewährleisten. Dies kann erst durch Verkettung mehrerer Elementarschritte erreicht werden. Hierbei gibt es mehrere Möglichkeiten. Man kann zum Beispiel für jeden elementaren Schritt den Gitterpunkt zufällig auswählen, so daß durch hinreichend viele Elementarschritte prinzipiell jede mögliche Konfiguration mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit erreicht werden kann. In der Praxis hat sich dieses Schema jedoch nicht bewährt. Stattdessen benutzt man in der Regel einen regelmäßigen Durchgang durch das Gitter, wobei jeder Gitterpunkt im Verlauf eines solchen *sweeps* genau einmal besucht wird. Man beachte, daß dieses Schema nur für jeden Elementarschritt detailed balance erfüllt, der verkettete Algorithmus aber dennoch korrekt bleibt, da er aus einer Verkettung korrekter Einzelschritte besteht und somit die Stabilität erfüllt.
Algorithmen, die in einem Elementarschritt lediglich Veränderungen an einem Gitterpunkt zulassen, bezeichnet man als *lokale* Algorithmen.
Neben dem Metropolis-Algorithmus seien an dieser Stelle als Beispiele das sogenannte Wärmebad-Verfahren (*heat bath*) und Überrelaxations-Algorithmen (*overrelaxation*) genannt.
Im Gegensatz dazu gibt es Algorithmen, die in einem Schritt größere Konfigurationsänderungen erzeugen können. Diese bezeichnet man als *nichtlokale* Algorithmen (siehe Kapitel 3.6).

3.5 Fehleranalyse korrelierter Monte-Carlo-Daten

Algorithmen, die auf Markov-Prozessen basieren (importance sampling), garantieren zwar eine deutlich verbesserte Auswahl der Konfigurationen des simulierten Modells, die einzelnen Konfigurationen der Stichprobe sind jedoch nicht mehr dekorreliert, wie es beim simple sampling der Fall ist. Dies macht die Fehleranalyse kompliziert. Im folgenden soll die Beschreibung auf die wesentlichen Gesichtspunkte beschränkt bleiben, tieferen Einblick bieten z.B. [19, 20, 23, 24].

3.5.1 Autokorrelationszeiten

Sei $\bar{A}$ ein durch importance sampling gewonnener Mittelwert der Größe A aus einer Stichprobe der Größe N. Der statistische Fehler [3] lautet dann:

$$\sigma(\bar{A}) = \sqrt{\frac{2\tau_A}{N}\sigma^2(A)} \; , \tag{3.23}$$

wobei die *integrierte Autokorrelationszeit* τ_A definiert ist durch:

$$\tau_A := \frac{1}{2}\sum_{t=-\infty}^{\infty}\rho_A(t) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty}\rho_A(t) \; . \tag{3.24}$$

Hierbei wurde die *normierte Autokorrelationsfunktion*

$$\rho_A(t) := \frac{\langle A_i A_{i+t}\rangle - \langle A\rangle^2}{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2} \tag{3.25}$$

eingeführt. Der Index i numeriert die einzelnen Messungen.
Hierzu einige Bemerkungen: In der Praxis liegen natürlich nur endlich viele Messungen N vor. Das bedeutet, daß t höchstens den Wert $N-1$ annehmen kann. Weiterhin wird in der Praxis neben $\sigma(\bar{A})$ auch τ_A numerisch aus den Meßdaten bestimmt. Es hat sich als sinnvoll erwiesen, dabei die Summation über t auf $t_{max} \approx 6\tau_A$ einzuschränken [4].
Die normierte Autokorrelationsfunktion und damit auch die integrierte Autokorrelationszeit sind für verschiedene Größen A unterschiedlich (daher der Index A).
Die normierte Autokorrelationsfunktion fällt mit wachsendem t ab. Dies ist einleuchtend, da t die 'Monte-Carlo-Zeit', d.h. den Abstand zweier zur Messung von A beitragenden Konfigurationen aus der Markov-Kette, bezeichnet. Je größer t, desto 'unabhängiger' die Konfigurationen.
Gleichung (3.23) läßt sich dahingehend interpretieren, daß sich die Zahl der effektiv unabhängigen Messungen von N (simple sampling) auf $N/(2\tau_A)$ reduziert. Die integrierte Autokorrelationszeit τ_A ist mit einem statistischen Fehler behaftet, der von der Summationsgrenze t_{max} abhängt und wie folgt abgeschätzt werden

[3] In der Praxis hat man oft nur eine Meßreihe der Größe N vorliegen. In diesem Fall kann $\sigma(\bar{A})$ nicht direkt bestimmt werden. Deshalb bringt man in Gleichung (3.23) $\sigma(\bar{A})$ mit $\sigma(A)$ in Verbindung. Auf eine Herleitung dieses Zusammenhangs sei hier aus Platzgründen verzichtet. $\sigma(A)$ läßt sich aus einer Meßreihe abschätzen:

$$\sigma(A) \approx \frac{1}{N-1}\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(\bar{A}-A_i)^2} \; . \tag{3.22}$$

[4] Da die normierte Autokorrelationsfunktion exponentiell mit t abfällt, würden größere t_{max} nur noch zur Aufnahme von 'stochastischem Rauschen' führen.

kann [22]:

$$\sigma^2(\tau_A) \approx \frac{1}{N} 2(2t_{max} + 1)\tau_A^2 \ . \tag{3.26}$$

3.5.2 Die Binning-Methode

Die Binning-Methode bietet eine weitere Möglichkeit zur Abschätzung des statistischen Fehlers aus korrelierten Datensätzen. Hierzu teilt man die Daten in 'Teilmeßreihen' (*bins*) der Größe n_b ein und bildet zunächst N/n_b Mittelwerte $\hat{A}_j$ in den einzelnen Bins:

$$\hat{A}_j = \frac{1}{n_b} \sum_{i=(j-1)n_b+1}^{jn_b} \ . \tag{3.27}$$

Die Idee ist nun, daß die einzelnen $\hat{A}_j$ im Limes $n_b \to \infty$ statistisch unabhängig werden [5]. Somit kann man auf die Fehlerabschätzung für unkorrelierte Daten zurückgreifen :

$$\sigma(\bar{A}) = \sqrt{\frac{n_b}{N}} \sigma(\hat{A}) \ . \tag{3.28}$$

In der Praxis berechnet man den statistischen Fehler bei festem N für eine Reihe verschiedener n_b und prüft, ob sich der Fehler mit wachsendem n_b stabilisiert. Hierbei ist jedoch zu beachten, daß mit wachsender Binlänge die Zahl der Bins sinkt und somit die Ungenauigkeit der Bestimmung des statistischen Fehlers ansteigt. Damit die Binning-Methode einen guten Schätzwert für den Fehler liefert, sollte stets gelten:

$$\tau_A << n_b << N \ . \tag{3.29}$$

Die im vorherigen Abschnitt beschriebene Methode der Fehleranalyse mit Hilfe der integrierten Autokorrelationszeit liefert eine genauere Bestimmung des statistischen Fehlers und ist insbesondere bei relativ kleinem N vorzuziehen. Ist N jedoch sehr groß (typischerweise mehrere Millionen Messungen, wie bei den Simulationen in dieser Arbeit), so kann die Binning-Methode bedenkenlos angewandt werden.

3.5.3 Die Jackknife-Methode

Die Binning-Methode ist für Größen geeignet, die sich als Erwartungswert oder als lineare Funktion von Erwartungswerten schreiben lassen. Betrachtet man hingegen Größen, die eine nichtlineare Funktion von Erwartungswerten darstellen, wie z.B. die Binderkumulante (6.1), so kann deren Fehler durch die Binning-Methode nicht mehr in zufriedenstellender Form bestimmt werden.
Im Falle nichtlinearer Funktionen $F(\langle A \rangle, \langle B \rangle, ...)$ greift man daher zur sogenannten *Jackknife-Methode* [23, 24]. Hierbei werden zur Bestimmung des statistischen

[5] Dies liegt daran, daß die im letzten Abschnitt eingeführte Autokorrelationsfunktion ρ_A exponentiell abfällt.

Fehlers Datensätze gebildet, die zu den Bins der Binning-Methode 'komplementär' sind („gelochte bins") und für jeden dieser Datensätze die Mittelwerte der Observablen $A, B, ...$ bestimmt:

$$\tilde{A}_j = \frac{1}{N - n_b} \left(\sum_{i=1}^{N} A_i - \sum_{i=(j-1)n_b+1}^{jn_b} A_i \right) . \tag{3.30}$$

Man mittelt also die j gelochten Bins jeweils fast über den gesamten Datensatz. Bildet man nun noch $\tilde{F}_j(\tilde{A}_j, \tilde{B}_j, ...)$, so lautet der statistische Fehler von F:

$$\sigma(F) = \sqrt{m \left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} \tilde{F}_j^2 - (\frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} \tilde{F}_j)^2 \right)} . \tag{3.31}$$

$m = N/n_b$ bezeichnet hierbei die Anzahl der Bins.
Ist F eine Größe, die sich direkt als Erwartungswert schreiben läßt, so geht Gleichung (3.31) in Gleichung (3.28) über.
Ähnlich wie beim Binning muß man sich auch hier in der Praxis von der Stabilisierung des Fehlers mit wachsendem n_b überzeugen.

3.6 Critical slowing down

Nähert man sich in Simulationen einem kontinuierlichen Phasenübergang, so steigt die Korrelationslänge stark an. Im Falle des Ising-Modells bedeutet dies, daß große *Domänen* parallel gerichteter Spins auftreten. Konfigurationen, die solche Domänen enthalten, besitzen ein hohes statistisches Gewicht.
In der Umgebung eines kontinuierlichen Phasenübergangs bewirkt die divergierende Korrelationslänge des Systems deshalb in der Regel eine drastische Erhöhung der Autokorrelationszeiten von Größen, die mit Hilfe eines Markov-Prozesses bestimmt werden. Dies wird als „kritische Verlangsamung" (*critical slowing down*) bezeichnet. Besonders betroffen sind hierbei lokale Algorithmen.
Der Grund dafür liegt darin, daß lokale Algorithmen wie Metropolis nicht in der Lage sind größere Konfigurationsänderungen, wie z.B. die Erzeugung und Vernichtung von Domänen, in einem Schritt durchzuführen, und damit ein effektives Durchlaufen der physikalisch relevanten Konfigurationen zu ermöglichen.
Eine Möglichkeit zur Bekämpfung des critical slowing down bieten *nichtlokale* Algorithmen, wie z.B. die im nächsten Abschnitt vorgestellten *Clusteralgorithmen*.
Das Verhalten der integrierten Autokorrelationszeit am Phasenübergang läßt sich wie folgt beschreiben:

$$\tau_A \propto \xi^{z_A} . \tag{3.32}$$

z_A nennt man den *dynamischen kritischen Exponenten* des verwendeten Algorithmus im Bezug auf die Observable A. Im Falle endlicher Gitter bildet die lineare

Gitterausdehnung L eine obere Schranke für die Korrelationslänge. Am kritischen Punkt gilt dann:

$$\tau_A \propto L^{z_A} \ . \tag{3.33}$$

Den dynamischen kritischen Exponenten z eines Algorithmus definiert man i.a. über die am langsamsten dekorrelierende Observable des Systems. Für z.B. den lokalen Metropolis-Algorithmus gilt $z \approx 2$. Er ist deshalb zur Simulation kontinuierlicher Phasenübergänge nur unter Einsatz erheblicher Rechenleistung geeignet. Man ist stets bemüht, Algorithmen mit möglichst kleinem z zu finden.

3.7 Clusteralgorithmen

Clusteralgorithmen wurden 1987 zum ersten Mal von R.H. Swendsen und J.S. Wang [25] für das Ising-Modell vorgeschlagen. Inzwischen existieren verschiedene Variationen (z.B. der *Single-Cluster*-Algorithmus, U. Wolff 1989 [26]) und auch Umsetzungen für weitere Modelle.
Im folgenden sei der Swendsen-Wang-Algorithmus der Einfachheit halber am Ising-Modell erläutert sowie der Single-Cluster-Algorithmus kurz vorgestellt.
Die Umsetzung auf das in dieser Arbeit benutzte zweikomponentige ϕ^4-Modell findet sich in Abschnitt 6.3.1.
Aus Platzgründen sei in diesem Abschnitt auf Beweise der Korrektheit der Algorithmen verzichtet, diese sind in den angegebenen Referenzen zu finden.
Die naheliegendste Idee zur Bekämpfung des critical slowing down ist es, in einem größeren Teil des Gitters alle Spins in einem Schritt umzuklappen. Die einfachste Möglichkeit wäre hierbei, im Metropolis-Algorithmus vorzuschlagen, das Vorzeichen aller Spins in einem Teilgitter der Größe l^d zu wechseln. Das Problem ist jedoch, daß im kritischen Bereich im Mittel mehr Spins parallel zueinander stehen als antiparallel. Ein Umklappen aller Spins im Teilgitter führt deshalb in der Regel zu einer 'Energievergrößerung' (die Hamiltonfunktion (2.3) nimmt einen größeren Zahlenwert an) proportional zur Oberfläche des Teilgitters, was zu einem exponentiellen Absinken der Akzeptanzwahrscheinlichkeit (3.21) mit der Oberfläche des Teilgitters führt.
Dieses Problem läßt sich mit Hilfe des Clusteralgorithmus lösen. Die Idee ist, daß in einem Schritt lediglich Spins umgeklappt werden können, die innerhalb einer Domäne liegen.
Der Clusteralgorithmus beruht auf der Darstellung des Isingmodells als gewichtetes Perkolationsmodell. Diese Darstellung geht auf [27] zurück.

Ausgangspunkt ist die Zustandssumme für das Ising-Modell:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s=\pm 1} \exp(\beta \sum_{<xy>} s_x s_y) \\ &= \sum_{s=\pm 1} \prod_{<xy>} \exp(\beta s_x s_y) \\ &= \exp(-dV\beta) \sum_{s=\pm 1} \prod_{<xy>} (1 + \delta_{s_x,s_y}(\exp(+2\beta) - 1)) \\ &= \exp(-dV\beta) \sum_{s=\pm 1} \sum_{d=0,1} \prod_{<xy>} ((1 - d_{<xy>}) \\ &\quad + d_{<xy>} \delta_{s_x,s_y}(\exp(+2\beta) - 1)) \ , \end{aligned} \tag{3.34}$$

wobei $\sum_{s=\pm 1}$ die Summation über alle möglichen Konfigurationen bezeichnet. Die Rechnung wird in [27] noch fortgesetzt, indem die Summation über die Spins ausgeführt wird und man bei einem Modell angelangt, das lediglich die $d_{<xy>}$ als Freiheitsgrade hat. (Gewichtetes Perkolationsmodell).
Um den Clusteralgorithmus zu beschreiben ist es jedoch am günstigsten bei der Version zu bleiben, die sowohl die ursprünglichen Spins s_x als auch die neu eingeführten $d_{<xy>}$ als Freiheitsgrade hat. $d_{<xy>} \in \{0, 1\}$ ist hierbei auf den Kanten $< xy >$, d.h. den Verbindungslinien zwischen direkt benachbarten Gitterpunkten x und y, definiert.
Die grobe Struktur des Algorithmus ist es nun, daß zunächst die $d_{<xy>}$ bei festgehalten s_x neue Werte erhalten und in einem zweiten Teilschritt die Spins s_x bei festgehalten $d_{<xy>}$ neue Werte erhalten.
Das relative Gewicht von $d_{<xy>} = 0$ und $d_{<xy>} = 1$ ist unabhängig von den Werten der $d_{<xy>}$ auf anderen Kanten. Man kann also die $d_{<xy>}$ alle unabhängig voneinander neu setzen. Eine Abhängigkeit besteht lediglich von den Spins s_x und s_y an den Enden der Kante $< xy >$. Hierbei sind zu unterscheiden:
Fall 1: $s_x s_y = -1$:
Für das Gewicht von $d_{<xy>}$ ergibt sich:

$$1 - d_{<xy>} + d_{<xy>} \delta_{s_x,s_y}(\exp(+2\beta) - 1)) = 1 - d_{<xy>} \tag{3.35}$$

Man sieht: $d_{<xy>} = 0$ hat das Gewicht 1 und $d_{<xy>} = 1$ das Gewicht 0.
Fall 2: $s_x s_y = 1$:
Für das Gewicht von $d_{<xy>}$ ergibt sich:

$$1 - d_{<xy>} + d_{<xy>} \delta_{s_x,s_y}(\exp(+2\beta) - 1)) = 1 - d_{<xy>} + d_{<xy>}(\exp(+2\beta) - 1) \tag{3.36}$$

Also hat $d_{<xy>} = 0$ die Wahrscheinlichkeit

$$p(d_{<xy>} = 0) = \frac{1}{\exp(+2\beta) - 1 + 1} = \exp(-2\beta) \tag{3.37}$$

und

$$p(d_{<xy>} = 1) = 1 - \exp(-2\beta) \ . \tag{3.38}$$

Nun werden auf allen Kanten entsprechend der oben gegebenen Wahrscheinlichkeiten die $d_{<xy>}$ neu gesetzt. Zusammengefaßt sind diese Wahrscheinlichkeiten mit

$$p(d_{<xy>} = 0) = \exp(-\beta(1 + s_x s_y)) \tag{3.39}$$

und

$$p(d_{<xy>} = 1) = 1 - p(d_{<xy>} = 0) \tag{3.40}$$

gegeben.
Anschließend werden bei festem $d_{<xy>}$ neue Werte für die Spins erzeugt.
Dabei sind folgende Fälle zu betrachten:
Fall 1: $d_{<xy>} = 1$:
Es ergibt sich :

$$1 - d_{<xy>} + d_{<xy>}\delta_{s_x,s_y}(\exp(+2\beta) - 1)) = \delta_{s_x,s_y}(\exp(+2\beta) - 1)) \ . \tag{3.41}$$

Wegen δ_{s_x,s_y} muß $s_x s_y = 1$ gelten.
Fall 2: $d_{<xy>} = 0$:

$$1 - d_{<xy>} + d_{<xy>}\delta_{s_x,s_y}(\exp(+2\beta) - 1)) = 1 = \delta_{s_x,s_y} + \delta_{s_x,-s_y} \ . \tag{3.42}$$

Das bedeutet, daß $s_x s_y = 1$ und $s_x s_y = -1$ das gleiche Gewicht haben.
Nun definiert man einen *Cluster* wie folgt:
Zwei Punkte des Gitters gehören zum gleichen Cluster, wenn es eine Verbindungslinie zwischen den beiden Punkten gibt, so daß für alle Kanten $< xy >$, die auf dieser Verbindungslinie liegen, $d_{<xy>} = 1$ gilt.
Man erkennt, daß alle Spins, die zu einem Cluster gehören, gleich sein müssen [6]. Die verbleibenden Freiheitsgrade sind also die Vorzeichen der Spins für die einzelnen Cluster. Dabei haben beide Vorzeichen das gleiche Gewicht.
Im Algorithmus von Swendsen und Wang wird nun mit gleicher Wahrscheinlichkeit für jedes Cluster der Wert -1 oder $+1$ neu gewählt.
Die effiziente Bestimmung der Cluster ist ein nichttrivales Problem. In der Literatur werden hauptsächlich zwei Verfahren diskutiert: zum einen der „Hoshden-Kopelman-Algorithmus“ [28] und zum anderen die sogenannte Tiefensuche (“Depth-First Search“, „Ants in the labyrinth“).
Der dynamische kritische Exponent liegt für das $2d$-Ising-Modell bei $z \simeq 0.35$ und für das $3d$-Ising-Modell bei $z \simeq 0.75$ [25].
Neben dem vorgestellten Swendsen-Wang-Algorithmus gibt es weitere Varianten des Cluster-Algorithmus. In erster Linie ist hier der Single-Custer-Algorithmus zu nennen. Hierbei wird ein Gitterpunkt zufällig ausgewählt und nur das Vorzeichen aller Spins gewechselt, die zu dem Cluster gehören, das diesen Gitterpunkt enthält. Der Algorithmus ist einfacher zu implementieren und auch effektiver, da er einen dynamischen kritischen Exponenten von $z \simeq 0.2$ für das $2d$- und $3d$-Ising-Modell aufweist [29].

[6] Cluster können also niemals über Domänengrenzen hinausgehen.

Die Verallgemeinerung auf die $\mathcal{O}(N)$-invarianten nichtlinearen σ-Modelle [26] gelingt wie folgt:
Man wählt zunächst zufällig eine Richtung im $\mathcal{R}^N$ aus und erlaubt in einem Schritt lediglich Vorzeichenwechsel der Komponente der Feldvariablen parallel zu dieser Richtung. Ergodizität wird gewährleistet, wenn man die Richtung für jeden Schritt neu auswählt.

3.8 Technische Bemerkungen

Zum Abschluß des Kapitels seien noch einige 'technische' Details erwähnt, die bei Monte-Carlo-Simulationen von Modellen der Statistischen Physik zu beachten sind.

3.8.1 Thermalisierung

In Abschnitt 3.3 wurde beschrieben, wie man mit Hilfe von Algorithmen, die auf Markov-Prozessen basieren, Konfigurationen eines Systems im thermodynamischen Gleichgewicht erzeugt. Dabei muß jedoch die Simulation mit irgendeiner Konfiguration gestartet werden. Diese und auch die ihr folgenden in der Markov-Kette werden i.a. zunächst noch nicht der Boltzmannverteilung entsprechen. Vielmehr gilt für große „Monte-Carlo-Zeiten“ t nach (3.11):

$$||V_t - p|| \propto \exp\left(-\frac{t}{R}\right) \tag{3.43}$$

wobei R durch r aus (3.12) nach oben beschränkt ist.
Dieses Zusteuern des Systems auf das Gleichgewicht bezeichnet man als *Thermalisierung*. Es stellt sich nun die Frage, wieviele Konfigurationen in der Praxis zu erzeugen sind, um in zufriedenstellender Weise das Gleichgewicht zu erreichen. Diese dürfen dann nicht in die Berechnung von Erwartungswerten von Observablen miteinbezogen werden, sondern sind zu verwerfen. Hierzu gibt es mehrere 'Faustregeln' (siehe z.B. [20]). Es empfiehlt sich, mindestens nR (mit $n = \mathcal{O}(10)$) der Anfangskonfigurationen zu verwerfen.
R ist in der Regel analytisch nicht bekannt, sondern muß aus der Simulation selbst abgeschätzt werden. Hierbei ist z.B. sinnvoll, mit verschiedenen Startkonfigurationen zu beginnen und die gemessenen Werte für eine gewählte Observable für jede folgende Konfiguration zu vergleichen.
In Abbildung 3.1 ist dies am Beispiel des zweidimensionalen Ising-Modells illustriert. Es wurden eine zufällige und eine geordnete (alle Spins zu Beginn gleich 1) Startkonfiguration gewählt. Ab ca. $t = 80$ beginnen die Werte für die Magnetisierung zu überlappen, man schätzt daraus $R \approx 80$ ab.

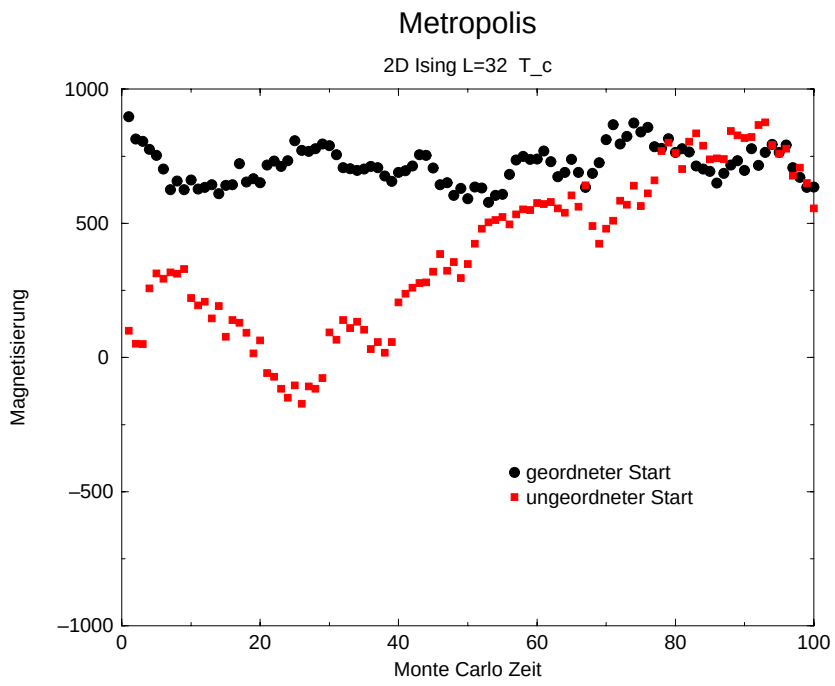

Abbildung 3.1: Thermalisierung am Beispiel des 2d-Ising-Modells.

3.8.2 Ableitungen in Monte-Carlo-Simulationen

Häufig besteht bei der Untersuchung kritischer Phänomene mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen die Notwendigkeit, Ableitungen von Erwartungswerten von Observablen nach Parametern der Hamiltonfunktion zu bestimmen.
Als Beispiel sei die erste Ableitung des Erwartungswertes einer Observablen A nach dem Parameter β beim Ising-Modell angeführt. Die Hamiltonfunktion ist durch (2.3) mit $J = 1$ gegeben. Zur Berechnung von $d\langle A\rangle/d\beta$ leitet man (2.1) einmal nach β ab. Es ergibt sich:

$$\frac{d\langle A\rangle}{d\beta} = \langle A\rangle\langle H\rangle - \langle AH\rangle \ . \tag{3.44}$$

Die Ableitung von $\langle A\rangle$ kann also mit Hilfe von Erwartungswerten von Observablen des Systems geschrieben werden. Das bedeutet, daß sowohl $\langle A\rangle$ als auch die Ableitungen von $\langle A\rangle$ aus derselben Simulation bestimmt werden können.

Kapitel 4

Renormierungsgruppe und kritische Phänomene

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, bildet die Renormierungsgruppe (RG) die moderne Grundlage unseres Verständnisses kritischer Phänomene. Mit ihrer Hilfe läßt sich zum Beispiel verstehen, wie es zu Skalengesetzen bei kontinuierlichen Phasenübergängen kommt. Sie bietet des weiteren die theoretische Grundlage für das finite size scaling und liefert Erklärungen für das Phänomen der Universalität. Die Grundideen der Renormierungsgruppe wurden in den sechziger Jahren von L.P. Kadanoff und anderen entwickelt und zu Beginn der siebziger Jahre insbesondere von K.G. Wilson aufgegriffen und auf ein mathematisch konsistentes Gerüst gestellt.
Die Anwendungen und Methoden der Renormierungsgruppe sind vielfältig. In diesem Kapitel kann nur ein kleiner Teil davon beschrieben werden. Ausführliche Darstellungen, insbesondere im Zusammenhang mit kritischen Phänomenen, finden sich z.B. in [2] oder in [30].
Für die Zwecke dieser Arbeit ist vor allem die Methode der *Ortsraumrenormierung* wichtig, so daß die Darstellung im folgenden auf diese beschränkt bleiben soll. Die Ausführungen sind dabei zu einem großen Teil an die Darstellung in [2] angelehnt.

4.1 Motivation

Alle Anwendungen der Renormierungsgruppe haben eine Grundidee gemeinsam. Man versucht die Freiheitsgrade eines physikalischen Systems durch geeignete Transformationen des Systems zu reduzieren, ohne dabei die wesentlichen physikalischen Aspekte zu verfälschen. Dabei gelangt man stets zu *Renormierungsgruppenflüssen* in einem i.a. komplizierten Parameterraum. Man versucht nun durch das Studium dieser Flüsse Aussagen über das betrachtete System zu gewinnen.
In der unmittelbaren Nähe eines kontinuierlichen Phasenübergangs treten Fluk-

tuationen über alle Längenskalen auf. Das makroskopische Verhalten eines physikalischen Systems am Phasenübergang wird jedoch in erster Linie von den langreichweitigen Fluktuationen bestimmt. Dies gilt insbesondere für die Gittermodelle der statistischen Mechanik.
Hier setzt nun die Renormierungsgruppe an: Man reduziert die Freiheitsgrade des Modells durch geeignete RG-Transformationen, wobei die kurzreichweitigen Fluktuationen 'ausintegriert' werden. Dabei bleibt die Physik auf langen Skalen erhalten. Das reduzierte und damit einfacher zu behandelnde System zeigt dann qualitativ dasselbe kritische Verhalten wie das ursprüngliche.
Bei den für diese Arbeit relevanten Modellen weist der dabei entstehende RG-Fluß einen nichttrivialen Fixpunkt auf, der das kritische Verhalten der Modelle bestimmt.

4.2 Renormierungsgruppe im Ortsraum

RG-Transformationen sind sowohl im Ortsraum, als auch im Impulsraum durchführbar. Der Impulsraum vereinfacht analytische Rechnungen, der Ortsraum bietet dafür ein besseres Verständnis und ist als Basis für Monte-Carlo-Simulationen geeigneter. Eine konkrete Realisierung der Reduzierung der Freiheitsgrade eines gegebenen Systems im Ortsraum sind die sogenannten *Blockspintransformationen.*

4.2.1 Blockspintransformationen

Die Idee der Blockspintransformation geht zurück auf L.P. Kadanoff [31]. Zur Veranschaulichung der Methode soll das Ising-Modell in d Dimensionen dienen. Als Startpunkt der Transformation („Startsystem") ist jede beliebige Konfiguration C denkbar. Die Freiheitsgrade des Startsystems seien wie üblich als Spins $s_x \in \{-1, 1\}$ bezeichnet. Zur Durchführung der Blockspintransformation teilt man nun das Gitter in Blöcke der Größe b^d ein [1] und weist nach einer bestimmten Vorschrift (*Blockungsregel*) jedem Block einen *Blockspin* s'_X zu, wobei X die entstandenen Blöcke numeriert. b heißt hierbei *Blockungsfaktor* der Transformation. Anschließend reskaliert man das erhaltene geblockte Gitter um den Faktor b^{-1}, um wieder die ursprüngliche Gitterkonstante zu erhalten (siehe Abbildung 4.1).
Es sind verschiedene Blockungsregeln denkbar. Für das Ising-Modell wählt man oft die sogenannte *Majoritätsregel.* Das bedeutet, daß der Blockspin s'_X den Wert 1 (-1) annimmt, falls im Block X mehr Spins s_x den Wert 1 (-1) haben als den Wert -1 (1). Falls X eine gerade Anzahl von Spins enthält, und die Summe der Spins

[1] Das Blockungsschema, also die Form der Blöcke, ist im Prinzip beliebig. Auf kubischen Gittern bieten sich kubische Blöcke an.

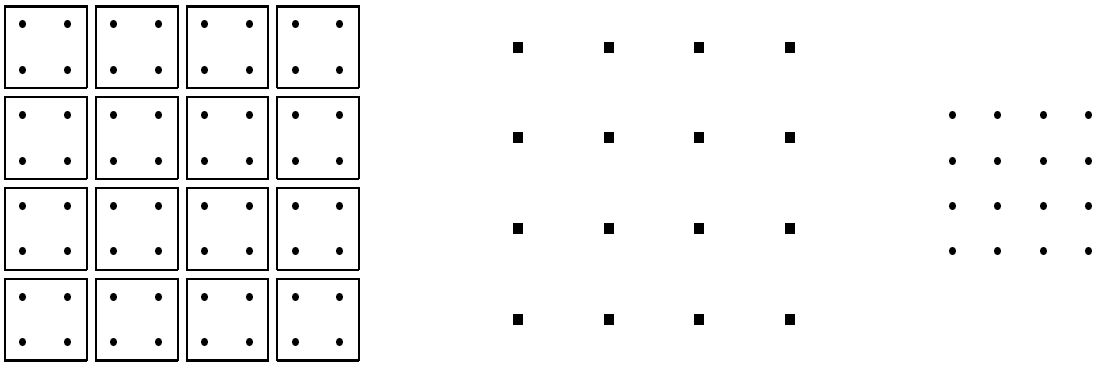

Abbildung 4.1: Blockspintransformation an einem zweidimensionalen Gitter. Das ursprüngliche Gitter (links) wird in quadratische Blöcke der Größe b^2 mit Blockungsfaktor $b = 2$ eingeteilt und geblockt (Mitte). Anschließend wird um den Faktor b^{-1} reskaliert (rechts).

gleich 0 ist, so wählt man für den Blockspin 1 oder -1 mit der Wahrscheinlichkeit 1/2 aus. Eine weitere oft benutzte Vorschrift ist die sogenannte *lineare Blockung*:

$$s'_X = \frac{1}{b^y} \sum_{x \in X} s_x \ . \tag{4.1}$$

Der Faktor b^y ist hierbei keineswegs trivial, sondern bedarf einer genaueren Untersuchung. Näheres hierzu findet man z.B. in [30]. Man beachte, daß diese Blockungsregel für das Ising-Modell aus der Systemspezifikation herausführt, denn der Blockspin kann nun reell werden [2].
Im folgenden sei zur Vereinfachung der Schreibweise der Faktor $\beta = 1/k_b T$ in die Hamiltonfunktion H integriert und die Vorfaktoren der einzelnen Wechselwirkungsterme in H mit $K_1, K_2, ...$ bezeichnet [3]. Beispielsweise gilt dann für das Ising-Modell in Anwesenheit eines äußeren Feldes:

$$H = K_1 \sum_{<xy>} s_x s_y + K_2 \sum_x s_x \tag{4.2}$$

mit $K_1 = -\beta J$ und $K_2 = -\beta h$. Die K_i seien im folgenden als Kopplungen bezeichnet.
Die Zustandssumme des Startsystems schreibt sich dann als:

$$Z = \sum_C \exp(-H(C)) \ . \tag{4.3}$$

[2] Neben der Majoritätsregel und der linearen Blockung existieren noch weitere Blockungsregeln, siehe z.B. [2]. Die konkrete Wahl einer bestimmten Blockspintransformation ist jedoch für die *qualitativen* Ergebnisse, die aus der Renormierungsgruppe folgen, unerheblich, deshalb muß diesbezüglich für die Zwecke dieser Arbeit keine Festlegung erfolgen.

[3] Dies bezeichnet man mitunter als „reduzierte Hamiltonfunktion“.

Der Boltzmannfaktor einer Konfiguration C', die durch Ausführung von Blockspintransformation auf die Menge aller denkbaren Startkonfigurationen entsteht, lautet:

$$\exp(H'(C')) = \sum_C T(C', C) \exp(H(C)) \ , \tag{4.4}$$

wobei $T(C', C)$ die Blockspintransformation beschreibt [4]. Hierbei sind alle möglichen Startkonfigurationen zu berücksichtigen. Dabei soll $T(C', C)$ folgenden Bedingungen genügen:

$$1. \quad \sum_{C'} T(C', C) \ = 1 \ . \tag{4.6}$$

$$2. \quad T(C', C) \ \geq 0 \ . \tag{4.7}$$

Die Bedingungen 1. und 2. besagen, daß die Blockspintransformation $T(C', C)$ als Wahrscheinlichkeit, der Konfiguration C eine Block-Konfiguration C' zuzuordnen, interpretiert werden kann.
Die Zustandssumme bleibt unter der Blockspintransformation unverändert:

$$\begin{aligned} Z' &= \sum_{C'} \exp(-H(C')) \\ &= \sum_{C'} \sum_{C} T(C', C) \exp(-H(C)) \\ &= \sum_{C} \sum_{C'} T(C', C) \exp(-H(C)) \\ &= \sum_{C} \exp(-H(C)) \ = \ Z \ . \end{aligned}$$

Bei der letzten Umformung wurde Bedingung 1. benutzt.
Der Vergleich der Boltzmannfaktoren des Startsystems und des geblockten Systems zeigt, daß die Blockspintransformation eine Abbildung

$$H \rightarrow H' \tag{4.8}$$

bewirkt. Die Hamiltonfunktion H' des geblockten Systems wird nun i.a. nicht mehr die einfache Form der Hamiltonfunktion H des Startsystems haben. Durch Anwendung der Blockspintransformation können vielmehr Wechselwirkungsterme entstehen, die beliebig weit entfernte Blockspins miteinander koppeln. Zu

[4] Als Beispiel betrachte man das zweidimensionale Modell mit $b = 3$. Dann enthält jeder Block $b^d = 9$ Spins $s_1, ..., s_9$, die zu einem Blockspin s' zusammengefaßt werden. Unter Benutzung der Majoritätsregel läßt sich dann $T(C', C)$ schreiben als $T = \prod_X T_X$, wobei

$$T_X(s', s_1, ..., s_9) = 1, \text{ falls } s' \sum_i s_i > 0 \ \text{ und } \ T_X(s', s) = 0 \text{ sonst.} \tag{4.5}$$

Die T_X sind dabei für jeden Block X zu definieren.

jedem dieser Terme gehört eine Kopplungskonstante K_i. Man kann also die Blockspintransformation als eine Abbildung $\mathcal{R}$ im Raum der Kopplungen verstehen:

$$\vec{K}' = \mathcal{R}(\vec{K}) \ . \tag{4.9}$$

(4.9) wird als *Renormierungsgruppengleichung* bezeichnet. Hierbei ist es sinnvoll, die Kopplungen in Vektorform zu schreiben mit $\vec{K} = (K_1, K_2, ...)$. Für z.B. das Ising-Modell ohne äußeres Feld als Startsystem schreibt man $\vec{K} = (K_1, 0, 0, ...)$, da die Hamiltonfunktion lediglich die Kopplung $K_1 = -\beta J$ enthält.
Es ist eine der Hauptannahmen der Renormierungsgruppe, daß die Stärke der Kopplungen exponentiell mit dem Abstand der Blockspins abnimmt. Hierfür hat sich der Begriff *kurzreichweitig* eingebürgert. Man kann deshalb Wechselwirkungsterme, die weit entfernte Blockspins miteinander koppeln, i.a. vernachlässigen. Der Kopplungsraum wird dann endlich.
Die iterierte Anwendung von Blockspintransformationen führt nun zu einem (diskreten) *Renormierungsgruppenfluß* (RG-Fluß) im Kopplungsraum.

4.2.2 Renormierungsgruppenfluß und Fixpunkte der Transformation

Im folgenden soll die Bezeichnung „Blockspintransformation“ durch die allgemeinere Bezeichnung „Renormierungsgruppentransformation“ ersetzt werden. Der Fluß, der durch eine RG-Transformation beschrieben wird, kann verschiedene Formen annehmen, die vom zugrundeliegenden Modell abhängen (siehe z.B. [30]). Wichtig für die Behandlung kritischer Phänomene sind Fixpunkte des Flusses:

$$\vec{K}^* = \mathcal{R}(\vec{K}^*) \ . \tag{4.10}$$

Solche Fixpunkte klassifiziert man als attraktiv, repulsiv oder gemischt-attraktiv-repulsiv, je nachdem, ob sie alle Punkte ihrer Umgebung nach iteriertem Anwenden der RG-Transformation in sich hineinziehen, abstoßen oder in verschiedenen Richtungen anziehend bzw. abstoßend sind.
Für eine Reihe von Systemen findet man drei Fixpunkte: Zum einen zwei sogenannte *triviale* Fixpunkte, die Tief- und Hochtemperaturfixpunkt genannt werden, und zum anderen einen *nichttrivialen* Fixpunkt („Wilson-Fisher-Fixpunkt“ [32, 33]), der das kritische Verhalten des betrachteten Systems bestimmt. Allgemein bezeichnet man Modelle, die unter RG-Transformationen ein solches Verhalten zeigen, als *isingartige Systeme*. Hierzu zählen u.a. die $\mathcal{O}(N)$-invarianten nichtlinearen σ-Modelle sowie das ϕ^4-Modell. Der Wilson-Fisher-Fixpunkt kann verschiedene Werte im Kopplungsraum annehmen. Hier kommt nun die in der Einleitung erwähnte Universalität ins Spiel: *Alle Systeme, deren kritisches Verhalten von demselben Wilson-Fisher-Fixpunkt bestimmt wird, gehören zu derselben Universalitätsklasse!*

Für das anschauliche Verständnis des Zustandekommens der Fixpunkte betrachte man das Transformationsverhalten der Korrelationslänge [5] ξ:

$$\xi' = \frac{\xi}{b} \,. \tag{4.11}$$

Der Strich in (4.11) soll besagen, daß genau eine RG-Transformation ausgeführt wurde. Startet man mit einem System endlicher Korrelationslänge und führt die RG-Transformation n-mal aus, so wird die Korrelationslänge nach jeder RG-Transformation um den Faktor b kleiner. Im Limes $n \to \infty$ gilt $\xi = 0$.
Dies ist aber nur bei $T = 0$ und $T = \infty$ der Fall. Das bedeutet, daß jedes beliebige Startsystem mit endlicher Korrelationslänge durch iterierte RG-Transformationen entweder zum Tieftemperaturfixpunkt ($T = 0$) oder zum Hochtemperaturfixpunkt ($T = \infty$) getrieben wird. Welcher der beiden Fälle hierbei eintritt, hängt davon ab, in welcher Phase sich das Startsystem befindet.
Lediglich bei $T = T_c$ ist die Korrelationslänge unendlich. Startet man also genau am kritischen Punkt, so ändern die RG-Transformationen die Korrelationslänge nicht. Das System bleibt stets kritisch. Man spricht hierbei von *Selbstähnlichkeit* des Systems am kritischen Punkt. In diesem Fall wird das System unter RG-Transformationen entlang der sogenannten „kritischen Oberfläche“ (*critical surface*) zum Wilson-Fisher-Fixpunkt getrieben.
Startet man in der unmittelbaren Umgebung des kritischen Punktes, so wird das System unter RG-Transformationen zunächst in die Umgebung des Wilson-Fisher-Fixpunktes gelangen, schließlich aber zu einem der beiden trivialen Fixpunkte abgetrieben werden.
Die Grundidee der Renormierungsgruppe ist, wie eingangs erwähnt, daß die langreichweitigen Eigenschaften des Startsystems durch RG-Transformationen nicht verändert werden, obwohl die Zahl der Freiheitsgrade stark reduziert wird. Das bedeutet, daß das Startsystem und das daraus durch RG-Transformationen gewonnene System qualitativ dasselbe (makroskopische) Verhalten zeigen. Zur qualitativen Untersuchung des kritischen Verhaltens eines isingartigen Systems genügt es also, das Verhalten des Systems unter RG-Transformationen in der Umgebung des Wilson-Fisher-Fixpunktes zu betrachten.

4.2.3 Die Renormierungsgruppe in der Umgebung des Wilson-Fisher-Fixpunktes

Die Abbildung $\mathcal{R}$ in (4.9) hängt allgemein von der konkret gewählten RG-Transformation und im Besonderen vom gewählten Blockungsfaktor b ab. Unter der Annahme, daß $\mathcal{R}$ am Fixpunkt differenzierbar ist, läßt sich (4.9) in der Umgebung

[5] Die Korrelationslänge soll hier in Einheiten der Gitterkonstanten a betrachtet werden, sie ist also eine dimensionslose Größe.

des Wilson-Fisher-Fixpunktes linearisieren:

$$K'_a - K^*_a \approx \sum_b T_{ab}(K_b - K^*_b) \ , \tag{4.12}$$

wobei $T_{ab} = \partial K'_a / \partial K_b|_{\vec{K}=\vec{K}^*}$ ist. Die Eigenwerte der Matrix $\mathbf{T}$ seien mit λ^i und ihre Linkseigenvektoren mit $\vec{\phi}^i$ bezeichnet, so daß gilt:

$$\sum_a \phi^i_a T_{ab} = \lambda^i \phi^i_b \ . \tag{4.13}$$

Zur Untersuchung des RG-Flusses in der Umgebung des Wilson-Fisher-Fixpunktes ist die Einführung sogenannter *Skalenfelder* sinnvoll:

$$u_i \equiv \sum_a \phi^i_a (K_a - K^*_a) \ . \tag{4.14}$$

Diese sind Projektionen des Vektors $\delta\vec{K} = \vec{K} - \vec{K}^*$ ('Abstand' zum Fixpunkt) auf die Eigenvektoren $\vec{\phi}^i$. Die Skalenfelder verhalten sich unter RG-Transformationen in der Nähe des Fixpunktes wie folgt:

$$u'_i = \lambda_i u_i \ . \tag{4.15}$$

Man führt noch sogenannte *Renormierungsgruppeneigenwerte* y_i über $\lambda^i = b^{y_i}$ ein, um sich von der konkreten Wahl des Blockungsfaktors b unabhängig zu machen. Es gilt dann:

$$u'_i = b^{y_i} u_i \ . \tag{4.16}$$

Es sind nun drei Fälle zu unterscheiden:
Ist $y_i > 0$, so gilt: $u'_i > u_i$. In diesem Fall wird u_i als *relevantes* Skalenfeld bezeichnet. Wiederholte RG-Transformationen treiben u_i von seinem Fixpunktwert Null weg.
Ist hingegen $y_i < 0$, so gilt: $u'_i < u_i$. In diesem Fall wird u_i als *irrelevantes* Skalenfeld bezeichnet. Startet man hinreichend nahe am Fixpunkt, so konvergiert u_i unter RG-Transformationen gegen Null.
Ist schließlich $y_i = 0$, so gilt: $u'_i = u_i$. In diesem Fall wird u_i als *marginales* Skalenfeld bezeichnet. Es ist nicht zu erkennen, ob sich u_i unter RG-Transformationen zum Fixpunkt hin oder von ihm weg bewegt. Um dies zu entscheiden, reicht (4.12) nicht aus, es ist dann eine höhere Entwicklung vorzunehmen.

4.3 Skalengesetze und kritische Exponenten

In diesem Abschnitt soll die Herleitung der Skalengesetze mit Hilfe der Renormierungsgruppe beschrieben werden. Dazu seien zunächst die Skalengesetze am Beispiel des Ferromagneten in knapper Form vorgestellt (für eine ausführliche Diskussion der Skalengesetze siehe z.B. [2]).

Die spezifische Wärme C zeigt bei Abwesenheit eines äußeren Feldes folgendes Verhalten:

$$C \sim |t|^{-\alpha} \ . \tag{4.17}$$

Die spontane Magnetisierung M verhält sich im Grenzfall eines verschwindenden äußeren Feldes wie:

$$M \sim (-t)^{\beta} \ . \tag{4.18}$$

Für die magnetische Suszeptibilität gilt in Abwesenheit eines äußeren Feldes:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \ . \tag{4.19}$$

Bei $t = 0$ gilt für die Magnetisierung in Abhängigkeit vom äußeren Feld:

$$M \sim |h|^{1/\delta} \ . \tag{4.20}$$

Die Korrelationslänge ξ verhält sich in Abwesenheit eines äußeren Feldes wie folgt:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \ . \tag{4.21}$$

Die Exponenten α, β, γ und δ werden oft als 'thermodynamische' kritische Exponenten bezeichnet. Schließlich gibt es noch den kritischen Exponenten η, dieser wird über das Verhalten der Korrelationsfunktion [6]

$$G(x,y) = \langle \phi_x \phi_y \rangle - \langle \phi_x \rangle \langle \phi_y \rangle \tag{4.22}$$

bei $t = 0$ definiert. Dort gilt:

$$G(x,y) \propto \frac{1}{|x-y|^{d-2+\eta}} \ .$$

Zur Herleitung dieser Gesetze sei als Startsystem der RG-Transformationen ein System betrachtet, dessen Hamiltonfunktion zwei Kopplungen K_1 und K_2 enthält, die von den 'physikalischen' Parametern t und h abhängen (also beispielsweise das Ising-Modell mit den Kopplungen $K_1 = -\beta J$ und $K_2 = -\beta h$). Es sei also ein äußeres Feld in Betracht gezogen.
Für ein solches System existieren zwei relevante Skalenfelder: das sogenannte *thermische* Skalenfeld u_t und das sogenante *magnetische* Skalenfeld u_h. Zusätzlich existieren (im Prinzip unendlich viele) irrelevante Skalenfelder $u_3, u_4, ...$ mit $y_3 > y_4 > ...$ [7]. Das kritische Verhalten solcher Systeme wird vom Wilson-Fisher-Fixpunkt bestimmt, dabei gelten die linearisierten RG-Gleichungen lediglich in der Nähe des Fixpunktes. Das Startsystem läßt sich jedoch stets durch eine endliche Zahl von RG-Transformationen in die Nähe des Fixpunktes bringen.

[6] Es wird hier die Definition der Korrelationsfunktion („Zweipunktfunktion") für Gittermodelle verwendet. ϕ_x sei eine beliebige Feldvariable und x, y zwei beliebige Gitterpunkte.

[7] u_3 ist also das irrelevante Skalenfeld mit dem größten RG-Eigenwert kleiner Null. Es wird als „führendes irrelevantes Skalenfeld" bezeichnet.

Die Skalenfelder u_i hängen in der Umgebung des Fixpunktes analytisch von t und h ab [2]. Die irrelevanten Skalenfelder werden unter RG-Transformationen kleiner, sie sollen daher in der Umgebung des Fixpunktes, d.h. nachdem schon endlich viele Transformationen ausgeführt wurden, vernachlässigt werden. Für die relevanten Skalenfelder gilt [2]:

$$u_t = t/t_0 + \mathcal{O}(t^2, h^2) \tag{4.23}$$

$$u_h = h/h_0 + \mathcal{O}(th) \; . \tag{4.24}$$

Die Konstanten t_0 und h_0 sind hierbei abhängig vom betrachteten Startsystem und somit nicht universell.
Man beachte, daß die relevanten Skalenfelder auf der kritischen Oberfläche zu Null werden [8].
Der singuläre Anteil [9] der freien Energiedichte f_s zeigt unter Ausführung von n RG-Transformationen folgendes Verhalten [2] [10]:

$$f_s(\vec{K}) = b^{-nd} f_s(\vec{K}') \; , \tag{4.25}$$

wobei d die räumliche Dimension des betrachteten Systems und b der Blockungsfaktor der RG-Transformation sind.
In der Nähe des Fixpunktes läßt sich (4.25) mit (4.16) als Funktion der relevanten Skalenfelder schreiben:

$$f_s(u_t, u_h) = b^{-nd} f_s(b^{ny_t} u_t, b^{ny_h} u_h) \; . \tag{4.26}$$

Hierbei muß, damit die Linearisierung der RG-Gleichungen Gültigkeit behält, n geeignet beschränkt werden [2].
Unter Benutzung von (4.23) und (4.24) läßt sich der singuläre Anteil der freien Energiedichte als Funktion der physikalischen Parameter des Startsystems schreiben [2]:

$$f_s(t, h) = |t/t_0|^{d/y_t} \, \Phi\left(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right) \; . \tag{4.27}$$

Hierbei wurden höhere Ordnungen in (4.23) und (4.24) vernachlässigt [11].
Φ wird als *Skalenfunktion* bezeichnet. Skalenfunktionen sind universell, eine Abhängigkeit vom betrachteten Startsystem besteht lediglich über die Konstanten t_0 und h_0. Man beachte, daß für $t > 0$ und $t < 0$ zwei verschiedene Skalenfunktionen existieren.

[8] Am Fixpunkt sind alle Skalenfelder per definitionem Null. Das System kann den Fixpunkt jedoch nur erreichen, wenn das Startsystem auf der kritischen Oberfläche liegt. Da relevante Skalenfelder unter RG-Transformationen anwachsen, müssen sie also auf der kritischen Oberfläche den Wert Null haben.

[9] Zur Ableitung der Skalengesetze genügt es, den singulären Anteil der freien Energiedichte zu betrachten.

[10] Dies folgt aus der Invarianz der Zustandssumme unter RG-Transformationen.

[11] Diese führen zu analytischen Korrekturen zu den Skalengesetzen.

Aus dem Skalenverhalten des singulären Anteils der freien Energiedichte lassen sich die Skalengesetze (4.17) bis (4.20) herleiten, so gilt z.B. für die magnetische Suszeptibilität χ:

$$\chi = \left.\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}\right|_{h=0} \propto |t|^{(d-2y_h)/y_t} \ , \tag{4.28}$$

so daß mit $\chi \sim |t|^{-\gamma}$ folgt:

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} \ . \tag{4.29}$$

Für die anderen thermodynamischen kritischen Exponenten gilt [2]:

$$\alpha = 2 - d/y_t \ , \tag{4.30}$$

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} \ , \tag{4.31}$$

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h} \ . \tag{4.32}$$

Aus der Korrelationsfunktion (4.22) lassen sich durch ähnliche Betrachtungen die restlichen kritischen Exponenten herleiten [2]:

$$\nu = 1/y_t \ , \tag{4.33}$$

$$\eta = d + 2 - 2y_h \ . \tag{4.34}$$

Die kritischen Exponenten lassen sich also auf die zwei RG-Eigenwerte y_t und y_h zurückführen. Daher existieren sogenannte *Skalenrelationen*, die die kritischen Exponenten miteinander verknüpfen:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \ , \tag{4.35}$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2 \ , \tag{4.36}$$

$$\alpha = 2 - d\nu \ , \tag{4.37}$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \ . \tag{4.38}$$

An dieser Stelle sei die Methode der *Monte-Carlo-Renormierungsgruppe* [34] erwähnt. Dabei versucht man (auf einem endlichen Gitter) die Matrixelemente in (4.12) zu berechnen und durch Diagonalisierung der Matrix $\mathbf{T}$ die RG-Eigenwerte y_t und y_h zu bestimmen, aus denen sich dann sofort die kritischen Exponenten ergeben.

4.4 Finite size scaling

In diesem Abschnitt kann *finite size scaling* nur knapp behandelt werden. Zur Vertiefung sei, insbesondere im Zusammenhang mit numerischen Simulationen, auf [35] verwiesen.
Skalengesetze der Form

$$A \sim |t|^{-x} \tag{4.39}$$

gelten nur im thermodynamischen Limes (d.h. für das unendlich große System) [12].
Oft (insbesondere bei Monte-Carlo-Simulationen) möchte oder muß man jedoch bei der Untersuchung kritischer Phänomene endliche Systeme betrachten.
Mit Hilfe der Renormierungsgruppe läßt sich für ein kubisches Gitter mit Gitterlänge L in Abwesenheit eines äußeren Feldes sogenanntes *finite size scaling* herleiten [13]:

$$A(t, L) \sim L^{x/\nu} \psi \left(\frac{t}{t_0} L^{1/\nu} \right) \ . \tag{4.40}$$

Die Skalenfunktion ψ ist universell und für $t > 0$ bzw. $t < 0$ verschieden. Die Konstante t_0 hängt vom betrachteten System ab. Gesetze dieser Form seien im folgenden als „Finite-Size-Skalengesetze“ bezeichnet.
Bei der Herleitung solcher Gesetze wird vorausgesetzt, daß die endliche Ausdehnung des System den RG-Fluß in der Umgebung des Fixpunktes nicht beeinflußt. Dies ist für kurzreichweitige isingartige Systeme bei hinreichend großem L plausibel.
(4.40) ist auch im thermodynamischen Limes gültig: Im Limes $t \to 0$ nimmt die Skalenfunktion einen konstanten Wert $\psi(0)$ an, es gilt dann:

$$A \sim L^{x/\nu} \ . \tag{4.41}$$

Im Limes $L \to \infty$ kann man nun L durch die Korrelationslänge ξ ersetzen:

$$A \sim L^{x/\nu} \approx \xi^{x/\nu} \sim (|t|^{-\nu})^{x/\nu} = |t|^{-x} \ , \tag{4.42}$$

womit (4.39) reproduziert ist.
Finite-Size-Skalengesetze stellen also 'modifizierte' Skalengesetze für endliche Systeme dar. Wichtig ist, daß die kritischen Exponenten dieselben sind wie in den ursprünglichen Skalengesetzen. Mit Hilfe der Finite-Size-Skalengesetze ist es nun möglich, Monte-Carlo-Simulationen in der Umgebung kontinuierlicher Phasenübergänge zur Bestimmung kritischer Exponenten durchzuführen, ohne die Bedingung $\xi << L$ einhalten zu müssen.

[12] In diesem Abschnitt seien Korrekturen zu den Skalengesetzen vernachlässigt. Werden diese berücksichtigt, so ist für die Gültigkeit von (4.39) zusätzlich zu fordern, daß t infinitesimal klein ist.

[13] Auf die Herleitung sei an dieser Stelle verzichtet, sie findet sich im nächsten Abschnitt. Dort werden auch Korrekturen zu Skalengesetzen berücksichtigt.

4.5 Korrekturen zu Skalengesetzen

Bei der Herleitung der Skalengesetze in Abschnitt 4.3 wurde ein unendlich großes System betrachtet, sowie die irrelevanten Skalenfelder vernachlässigt. Mit Hilfe der irrelevanten Skalenfelder lassen sich nicht-analytische Korrekturen zu Skalengesetzen erklären.
In diesem Abschnitt soll die Herleitung der Finite-Size-Skalengesetze unter Berücksichtigung des führenden irrelevanten Skalenfeldes u_3 durchgeführt werden, die restlichen irrelevanten Skalenfelder seien vernachlässigt. Es seien die gleichen Systeme wie in Abschnitt 4.3 betrachtet.
Das irrelevante Skalenfeld u_3 transformiert sich wie folgt:

$$u_3' = b^{y_3} u_3 \ , \tag{4.43}$$

mit $y_3 < 0$. In der Nähe des Fixpunktes gilt [2]:

$$u_3 = u_3^0 + \mathcal{O}(t, h^2) \ . \tag{4.44}$$

Man beachte, daß u_3 auf der kritischen Oberfläche nicht Null sein muß.
Es sei ein kubisches Gitter mit Gitterlänge L zugrundegelegt. Nun sollen n RG-Transformationen durchgeführt werden. Aufgrund des Anwachsens der relevanten Skalenfelder muß n beschränkt werden. Dies soll hier dadurch geschehen, daß lediglich solange geblockt wird, bis die geblockten Gitter eine konstante Gitterlänge $\tilde{L}$ erreichen. Dann gilt:

$$\tilde{L}^{-1} = b^n L^{-1} \ . \tag{4.45}$$

Man kann also L^{-1} als relevantes Skalenfeld mit RG-Eigenwert 1 auffassen.
Der singuläre Anteil der freien Energiedichte zeigt dann unter Berücksichtigung von u_3 und L folgendes Transformationsverhalten (vergleiche (4.26)):

$$f_s(u_t, u_h, u_3, L^{-1}) = b^{-nd} f_s \left(b^{ny_t} u_t, b^{ny_h} u_h, b^{ny_3} u_3, b^n L^{-1} \right) \ . \tag{4.46}$$

Der Faktor b^n läßt sich nach (4.45) durch $L\tilde{L}^{-1}$ ersetzen, wodurch L eliminiert wird. Benutzt man nun noch (4.23), (4.24) unter Vernachlässigung höherer Ordnungen in t und h sowie (4.44) mit $u_3 = u_3^0 = const$, so läßt sich f_s als Funktion der physikalischen Parameter t und h sowie der Gitterlänge L schreiben:

$$f_s(t, h, L) \sim L^{-d} \Psi \left(\frac{t}{t_0} L^{1/\nu}, \frac{h}{h_0} L^{y_h}, u_3^0 L^{-\omega} \right) \ , \tag{4.47}$$

wobei Ψ eine universelle Skalenfunktion ist. In (4.47) wurde noch die Ersetzung $y_t = 1/\nu$ (4.33) vorgenommen, sowie der Exponent ω über $\omega = -y_3$ eingeführt.
Nun läßt sich das Skalenverhalten thermodynamischer Größen berechnen. Für die magnetische Suszeptibilität $\chi = \partial^2 f / \partial h^2|_{h=0}$ gilt beispielsweise:

$$\chi(t, L) \sim L^{\gamma/\nu} \tilde{\Psi} \left(\frac{t}{t_0} L^{1/\nu}, u_3^0 L^{-\omega} \right) \ . \tag{4.48}$$

Hierbei wurde u.a. finite size scaling reproduziert (vergleiche (4.40)).
Die Funktion $\tilde{\Psi}$ in (4.48) ist analytisch und läßt sich für kleine Argumente entwickeln:

$$\chi(t,L) \sim L^{\gamma/\nu}(1 + atL^{1/\nu} + bL^{-\omega} + ...) \; . \tag{4.49}$$

Der Term $bL^{-\omega}$ wird als führende Skalenkorrektur bezeichnet.
Die in obiger Herleitung vernachlässigten weiteren irrelevanten Skalenfelder führen ebenfalls zu nicht-analytischen Korrekturtermen, die jedoch eine schwächere Rolle spielen.

4.6 Phänomenologische Kopplungen

Unter einer phänomenologischen Kopplung R versteht man eine Größe, die invariant unter RG-Transformationen ist, d.h. es gilt:

$$R' = R \; . \tag{4.50}$$

Ein einfaches Beispiel für eine phänomenologische Kopplung ist die Größe ξ/L. Unter einer RG-Transformationen verhält sich ξ/L wie folgt:

$$\left(\frac{\xi}{L}\right)' = \frac{\xi'}{L'} = \frac{\xi/b}{L/b} = \frac{\xi}{L} \; . \tag{4.51}$$

Im folgenden soll das Finite-Size-Skalenverhalten einer beliebigen phänomenologischen Kopplung R unter Berücksichtigung der führenden Skalenkorrektur hergeleitet werden.
R bleibt unter RG-Transformationen erhalten, so daß gilt (vergleiche mit (4.46):

$$R(u_t, u_h, u_3, L^{-1}) = R(b^{ny_t}u_t, b^{ny_h}u_h, b^{ny_3}u_3, b^n L^{-1}) \; . \tag{4.52}$$

In Analogie zu (4.47) gilt dann in Abwesenheit eines äußeren Feldes:

$$R(t,L) \sim \Phi\left(\frac{t}{t_0}L^{1/\nu}, u_3^0 L^{-\omega}\right) \; , \tag{4.53}$$

mit der universellen Skalenfunktion Φ, die analytisch ist und sich entwickeln läßt:

$$R(t,L) = R^* + ctL^{1/\nu} + dL^{-\omega} + ... \tag{4.54}$$

Die Konstante R^* ist universell, c und d hängen vom betrachteten System ab.
Zur Bestimmung des kritischen Exponenten ν der Korrelationslänge werden in dieser Arbeit Ableitungen phänomenologischer Kopplungen nach der reduzierten Temperatur verwendet (siehe Abschnitt 5.4). Es gilt nach (4.53):

$$\frac{\partial R}{\partial t} \sim L^{1/\nu}\tilde{\Phi}\left(\frac{t}{t_0}L^{1/\nu}, u_3^0 L^{-\omega}\right) \; . \tag{4.55}$$

Nach Entwicklung von $\tilde{\Phi}$ erhält man:

$$\frac{\partial R}{\partial t} \sim L^{1/\nu}(1 + etL^{1/\nu} + fL^{-\omega} + ...) \; , \tag{4.56}$$

mit systemabhängigen Konstanten e und f.

Kapitel 5

Methode der verbesserten Wirkung

5.1 Schwierigkeiten bei der Bestimmung kritischer Exponenten mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen

Die in Abschnitt 4.5 beschriebenen Korrekturen zu Skalengesetzen sind die Hauptursache systematischer Fehler bei der Bestimmung kritischer Exponenten mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen, da diese an endlichen Systemen durchgeführt werden müssen [1]. Dies sei im folgenden näher erläutert.
Sei A eine thermodynamische Größe, die im kritischen Bereich ein Verhalten der Form

$$A \sim t^{-x}(1 + a_1|t|^{\theta} + a_2|t| + ...) \tag{5.1}$$

aufweist. Mit Hilfe der Renormierungsgruppe läßt sich für endliche Systeme herleiten:

$$A(\beta, L) \sim L^{x/\nu}(1 + aL^{1/\nu}(\beta - \beta_c) + bL^{-\omega} + ...) \; . \tag{5.2}$$

Dies wurde in Abschnitt 4.5 am Beispiel der magnetischen Suszeptibilität durchgeführt (vergleiche mit (4.49)). In (5.2) wurde t durch $\beta - \beta_c$ ersetzt.
Genau am kritischen Punkt gilt:

$$A(\beta, L)|_{\beta=\beta_c} \propto L^{x/\nu}(1 + bL^{-\omega} + ...) \; . \tag{5.3}$$

Im folgenden seien die höheren Korrekturen der Einfachheit halber weggelassen, man sollte sich jedoch ihres Vorhandenseins bewußt bleiben, sie spielen insbesondere bei der Behandlung systematischer Fehler (siehe Abschnitt 7.1) eine wichtige

[1] Ähnliches gilt für die experimentelle Bestimmung kritischer Exponenten, sofern die Messungen in einer endlichen Entfernung von der kritischen Temperatur durchgeführt werden.

Rolle. Es gelte also:

$$A(\beta, L)|_{\beta=\beta_c} = c_1 L^{x/\nu}(1 + c_2 L^{-\omega}) \ . \tag{5.4}$$

Möchte man nun x/ν bestimmen, so ist der naheliegendste Zugang die Größe A bei $\beta = \beta_c$ für verschiedene L zu messen und gemäß (5.4) zu fitten, wobei die führende Korrektur berücksichtigt wird.
Dies erfordert jedoch einen nichtlinearen Fit mit mehreren freien Parametern, was viel CPU-Zeit zur Folge hat, da mehrere freie Fitparameter eine sehr hohe Genauigkeit der Daten erzwingen.
Eine andere Möglichkeit besteht darin, durch Simulationen an sehr großen Gittern die führende Korrektur (näherungsweise) zu eliminieren, diese im Fitansatz nicht mehr zu berücksichtigen und somit die Zahl der freien Fitparameter zu reduzieren. Die Simulation großer Gitter erfordert jedoch ebenfalls viel CPU-Zeit.
Die geschilderten Zugänge sind also nicht befriedigend. Im folgenden sei nun die in dieser Arbeit angewandte Methode der verbesserten Wirkung zur Bestimmung von kritischen Exponenten beschrieben, mit deren Hilfe es gelingt, die erläuterten Schwierigkeiten zu umgehen.

5.2 Die Methode der verbesserten Wirkung

Zum Verständnis der Methode der verbesserten Wirkung ist es nützlich, auf die Renormierungsgruppe zurückzugreifen.
Beim Ising-Modell liegen die relevanten Skalenfelder $u_t(t, h)$ und $u_h(t, h)$ in zwei getrennten Unterräumen des Kopplungsraumes, die „gerader“ und „ungerader“ Unterraum genannt werden [2]. Terme der Hamiltonfunktion im geraden Unterraum ändern ihr Vorzeichen nicht, wenn alle Spins des Gitters mit -1 multipliziert werden, während sich das Vorzeichen für die Terme der Hamiltonfunktion im ungeraden Unterraum ändert. Startet man im geraden Unterraum (so wie das beim Ising-Modell mit $h = 0$ der Fall ist), so bleibt man unter RG-Transformationen im geraden Unterraum, da diese die Z_2 Symmetrie erhalten. Das thermische Skalenfeld u_t liegt also im geraden, das magnetische u_h im ungeraden Unterraum. Da das Ising-Modell seinen kritischen Punkt bei $h = 0$ erreicht, muß der Wilson-Fisher-Fixpunkt im geraden Unterraum liegen.
Abbildung 5.1 zeigt schematisch RG-Flüsse in der Umgebung des Wilson-Fisher-Fixpunktes im geraden Unterraum. Der Einfachheit halber sei dieser als zweidimensional angenommen. Er enthält somit genau ein irrelevantes Skalenfeld, dies sei o.B.d.A. $u_3(t, h)$. Dann existiert eine eindimensionale kritische Oberfläche. Dies ist die Linie in Abbildung 5.1, auf der alle Punkte unter RG-Transformationen in den Fixpunkt hineingezogen werden.
Um Informationen über das kritische Verhalten zu gewinnen, betrachtet man das zu simulierende Ising-Modell als Startsystem einer RG-Transformation. In Abwesenheit eines äußeren Feldes ($h = 0$) enthält es dann lediglich die Kopplung

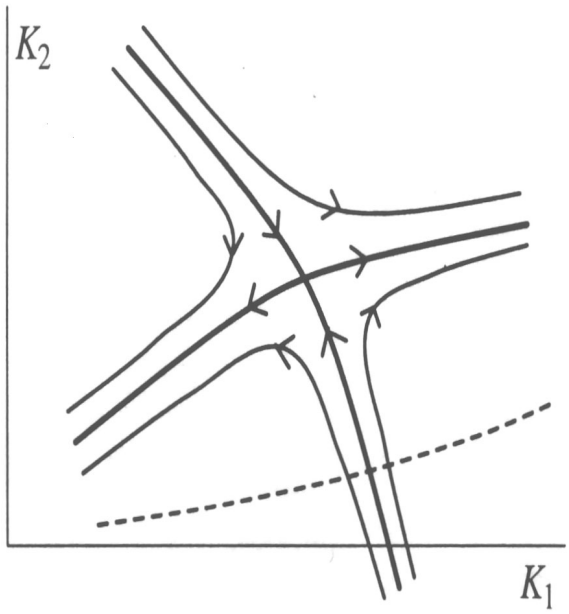

Abbildung 5.1: RG-Fluß in der Umgebung des Wilson-Fisher-Fixpunktes in einem zweidimensionalen Kopplungsraum. Die Abbildung stammt aus [2].

$K_1 = -\beta J$. Variiert man nun den pysikalischen Parameter t (d.h. man simuliert bei verschiedenen Werten von β), so kann das Startsystem nur entlang der K_1-Achse verschoben werden. Am Schnittpunkt dieser Achse mit der kritischen Oberfläche liegt der kritische Punkt des Ising-Modells ($t = 0$). Dort gilt zwar $u_t(0,0) = u_h(0,0) = 0$, aber $u_3(0,0) \neq 0$. Das bedeutet, daß am kritischen Punkt die führende Skalenkorrektur nicht verschwindet. Lediglich am Fixpunkt ist $u_3 = 0$. Optimal wäre es also, wenn man genau am Fixpunkt simulieren könnte. Dies ist jedoch mit dem Ising-Modell nicht möglich, da es die K_1-Achse nicht verlassen kann.
Es sei nun ein zweites Startsystem betrachtet, das in seiner Hamiltonfunktion bereits die Kopplungen K_1 und K_2 enthält. K_2 kann beispielsweise eine Kopplung zwischen übernächsten Nachbarn sein, die durch eine RG-Transformation, angewandt auf das Ising-Modell, entsteht. Diese Kopplung wird in irgendeiner Form von t und h abhängen. Variiert man erneut t bei festem $h = 0$, so wird sich das Startsystem nun irgendwie in der K_1-K_2-Ebene bewegen (in Abbildung 5.1 durch die gestrichelte Linie angedeutet). Der kritische Punkt des Systems liegt auf dem Schnittpunkt der gestrichelten Linie mit der kritischen Oberfläche.
Nach der Universalitätshypothese liegt dieses System in derselben Universalitätsklasse wie das Ising-Modell, da das kritische Verhalten beider Systeme von demselben Wilson-Fisher-Fixpunkt bestimmt wird.
Dies führt nun zur Idee der „verbesserten Wirkung“ (*improved action*): Zur Bestimmung universeller Größen erweitert man die Hamiltonfunktion des Ising-

Modells um einen geeignet gewählten Wechselwirkungsterm mit einer weiteren Kopplungskonstante $\tilde{\beta}$ und versucht durch geschickte Wahl von β und $\tilde{\beta}$ („Tuning“) möglichst nahe am Fixpunkt zu simulieren [2].
Die Idee läßt sich auf eine Reihe weiterer Modelle und Universalitätsklssen anwenden. Allerdings ist die Sache in der Praxis nicht so einfach wie gerade beschrieben, denn der Kopplungsraum muß prinzipiell als unendlich dimensional angenommen werden. Der Fixpunkt liegt dann 'irgendwo' in diesem Raum. Somit existieren prinzipiell auch unendlich viele irrelevante Skalenfelder, die alle zu verschiedenen Skalenkorrekturen führen.
Es ist jedoch eine der Hauptannahmen der Renormierungsgruppe, daß bei kurzreichweitigen isingartigen Systemen die Stärke der Kopplungen exponentiell mit dem Abstand der Feldvariablen abnimmt. Deshalb ist es möglich, für praktische Berechnungen einer verbesserten Wirkung von einem endlich dimensionalen Kopplungsraum auszugehen, indem man nur die 'wichtigsten' Kopplungen beibehält. Um jedoch in guter Näherung an den Fixpunkt 'heranzukommen', ist i.a. eine große Zahl beibehaltener Kopplungen notwendig. Die Rechnungen sind also sehr kompliziert. Zudem ist es oft schwer zu entscheiden, welche Kopplungen man beibehalten und welche man verwerfen soll [3].
In dieser Arbeit wurde deshalb lediglich versucht, die führende Skalenkorrektur zu eliminieren. Es ist dann zu erfüllen [4]:

$$u_t(\beta, \tilde{\beta}, h) = u_h(\beta, \tilde{\beta}, h) = u_3(\beta, \tilde{\beta}, h) = 0 \ . \tag{5.5}$$

Dies ist mit Hilfe der drei Kopplungskonstanten im Prinzip möglich. Es ist jedoch von vornherein nicht klar, ob überhaupt eine Lösung existiert. Dies hängt vom Abstand des Wilson-Fisher-Fixpunktes zu dem Unterraum des Kopplungsraumes ab, der von β und $\tilde{\beta}$ (bei $h = 0$) aufgespannt wird, da lediglich in diesem simuliert werden kann.
Rechnungen des ϕ^4-Modells im Kontinuum haben ergeben, daß der Wilson-Fisher-Fixpunkt in guter Näherung in der Ebene liegt, die durch die beiden Kopplungskonstanten des Modells aufgespannt wird (siehe hierzu z.B. [37]).
Aus diesem Grunde wurde in dieser Arbeit für die Simulationen zur Bestimmung der kritischen Exponenten der 3d-XY-Universalitätsklasse das zweikomponentige ϕ^4-Modell auf dem Gitter (Abschnitt 2.4) gewählt [5]. Dieses enthält die Kopplungskonstanten β und λ.

[2] Gelingt es dabei, genau am Fixpunkt zu simulieren, so kann man von einer „perfekten Wirkung“ (*perfect action*) sprechen.

[3] Als Beispiel für eine konkrete Durchführung dieser Rechnungen für das zweidimensionale nichtlineare $\mathcal{O}(3)$-σ-Modell siehe [36].

[4] Man erkennt, daß diese Bedingung mit dem Standard-Ising-Modell nicht zu erfüllen ist, da nur die zwei Parameter β und h eingestellt werden können.

[5] Eine andere Möglichkeit wäre gewesen, das XY-Modell (Abschnitt 2.3) wie oben beschrieben um eine Kopplungskonstante zu erweitern.

Für dieses Modell schreibt sich (5.2) in der Form:

$$A(\beta, \lambda, L) \sim L^{x/\nu}(1 + a(\lambda)L^{1/\nu}(\beta - \beta_c) + b(\lambda)L^{-\omega}) \ . \tag{5.6}$$

Vorfaktoren zu Termen in L („Amplituden") sind nun nicht mehr konstant, sondern hängen von λ ab. Dies gilt insbesondere für die führende Korrekturamplitude $b(\lambda)$.
Ist die Bedingung (5.5) erfüllt, so ist $b(\lambda) = 0$. Es existiert dann mindestens eine Nullstelle der führenden Korrekturamplitude.
Seien nun A_1 und A_2 zwei beliebige Größen, die ein Verhalten der Form (5.6) mit führenden Korrekturamplituden $b_1(\lambda)$ und $b_2(\lambda)$ aufweisen. Die Amplituden werden i.a. verschiedene Funktionen von λ sein. Das Amplitudenverhältnis $b_1(\lambda)/b_2(\lambda)$ ist jedoch universell [38], d.h. also von λ unabhängig und somit für alle Größen gleich. Das bedeutet, daß die Nullstellen, falls sie existieren, für alle Größen gleich sind.
Es ist nun a priori nicht klar, ob Nullstellen überhaupt existieren und wenn ja, wie viele. In den letzten beiden Jahren haben sich Monte-Carlo-Simulationen unter Anwendung von Finite-Size-Techniken als die beste Methode herausgestellt, um dies zu überprüfen, da Finite-Size-Techniken sehr 'sensibel' auf nicht-analytische Korrekturen reagieren. Im Falle des einkomponentigen ϕ^4-Modells wurde gefunden [39, 40], daß genau eine Nullstelle existiert.
Im folgenden sei davon ausgegangen, daß auch für das zweikomponentige Modell ein λ mit $b(\lambda) = 0$ existiert. Dieses sei als λ_{opt} bezeichnet. λ_{opt} ist dann für alle Größen gleich, zur Auffindung kann also eine beliebige Größe eingesetzt werden. An der Stelle $\lambda = \lambda_{opt}$ gilt dann in (5.4):

$$A(\beta, \lambda, L)|_{\beta=\beta_c(\lambda_{opt})} = cL^{x/\nu} \ , \tag{5.7}$$

womit die in Abschnitt 5.1 beschriebenen Schwierigkeiten beseitigt sind.

5.3 Die Bestimmung von λ_{opt}

Am besten geeignet für die Bestimmung der Nullstelle der führenden Korrekturamplitude sind Größen, bei denen die führende Skalenkorrektur deutlich hervortritt. Dies ist bei phänomenologischen Kopplungen der Fall.
Seien R_1 und R_2 zwei beliebige phänomenologische Kopplungen. Für diese gilt nach (4.54) unter Vernachlässigung höherer Korrekturen:

$$R_1(\beta, \lambda, L) = R_1^* + a_1(\lambda)L^{1/\nu}(\beta - \beta_c) + b_1(\lambda)L^{-\omega} \ , \tag{5.8}$$

und analog

$$R_2(\beta, \lambda, L) = R_2^* + a_2(\lambda)L^{1/\nu}(\beta - \beta_c) + b_2(\lambda)L^{-\omega} \ . \tag{5.9}$$

Die Größen R_1^* und R_2^* sind universell, d.h. von λ unabhängig. Sie nehmen am Phasenübergang für das unendlich große System nichttriviale, konstante Werte an. Es gilt für $i = 1, 2$:

$$R_i^* = \lim_{L \to \infty} R_i(\beta, \lambda, L) \mid_{\beta = \beta_c(\lambda)} \ . \tag{5.10}$$

An dieser Stelle eine Bemerkung zur Notation:
Sei $R_f = const$ ein fest gewählter Wert einer phänomenologischen Kopplung $R(\beta, \lambda, L)$. Dann sei im weiteren Verlauf dieser Arbeit mit $\bar{A}(\lambda, L)$ der „Wert der Größe $A(\beta, \lambda, L)$ bei festem $R = R_f$“ bezeichnet. Damit ist gemeint:

$$\bar{A}(\lambda, L) = A(\beta_f(\lambda, L), \lambda, L) \ , \tag{5.11}$$

wobei $\beta_f(\lambda, L)$ festgelegt wird über:

$$R(\beta_f(\lambda, L), \lambda, L) = R_f \ . \tag{5.12}$$

Betrachtet man R_1 bei festem $R_2 = R_{2_f}$, so gilt:

$$\bar{R}_1(\lambda, L) = R_1^* + \frac{a_1(\lambda)}{a_2(\lambda)} \left(R_{2_f} - R_2^* \right) + \left(b_1(\lambda) - \frac{a_1(\lambda)}{a_2(\lambda)} b_2(\lambda) \right) L^{-\omega} \ . \tag{5.13}$$

Das Amplitudenverhältnis $a_1(\lambda)/a_2(\lambda)$ ist universell [38], also ebenfalls von λ unabhängig. Somit läßt sich (5.13) schreiben als:

$$\bar{R}_1(\lambda, L) = \tilde{R}_1^* + c(\lambda) L^{-\omega} \ , \tag{5.14}$$

wobei

$$\tilde{R}_1^* = R_1^* + \frac{a_1(\lambda)}{a_2(\lambda)} \left(R_{2_f} - R_2^* \right) \tag{5.15}$$

ist. Bei $\lambda = \lambda_{opt}$ ist $c(\lambda) = 0$, so daß gilt:

$$\bar{R}_1(\lambda_{opt}, L) = \tilde{R}_1^* \ . \tag{5.16}$$

Zur Bestimmung von λ_{opt} geht man nun wie folgt vor: Man führt Simulationen für verschiedene λ durch, jeweils für eine Reihe verschieden großer Gitter und bestimmt dabei stets $\bar{R}_1(\lambda, L)$.
Welches Verhalten ist qualitativ zu erwarten ?
Mit wachsender Gittergröße konvergiert $\bar{R}_1(\lambda, L)$ für alle λ gegen $\tilde{R}_1^*$, jedoch in Abhängigkeit von λ mit unterschiedlicher Schnelligkeit. Bei $\lambda = \lambda_{opt}$ wird $\tilde{R}_1^*$ bereits für sehr kleine Gitter erreicht [6]. Man erwartet also ein Verhalten, wie es in Abbildung 7.1 zu sehen ist.

[6] Das nicht für *alle* L $\bar{R}_1(\lambda_{opt}, L) = \tilde{R}_1^*$ gilt, liegt an den vernachlässigten höheren Korrekturen. Diese spielen für kleine Gitter noch eine wichtige Rolle.

In der Praxis beginnt man mit Simulationen auf relativ kleinen Gittern für verschiedene λ und versucht λ_{opt} mit Hilfe von $\bar{R}_1$ grob abzuschätzen. Je nach verfügbarer Rechenzeit kann man die Abschätzung mit weiteren Simulationen auf größeren Gittern und λ-Werten in der Nähe des groben Schätzwertes immer mehr verfeinern.
Zur endgültigen Ermittlung von λ_{opt} bestimmt man aus allen Simulationsdaten mit Hilfe von Fits die Korrekturamplitude $c(\lambda)$ für verschiedene λ und sucht die Nullstelle durch Interpolation.
Details sind in Abschnitt 7.2 beschrieben.

5.4 Die Bestimmung kritischer Exponenten

Hat man sich mit Hilfe der im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Methode einen Schätzwert für λ_{opt} verschafft, so führt man bei diesem eine Reihe von Simulationen für verschiedene L durch. Aus diesen Simulationsdaten bestimmt man dann die kritischen Exponenten. Dies sei im folgenden genauer beschrieben: Die Skalenrelationen (4.35) - (4.38) verknüpfen die kritischen Exponenten. Es genügt also zwei von ihnen zu bestimmen. In dieser Arbeit wurden η und ν gewählt.
Den Exponent η wurde mit Hilfe der magnetischen Suszeptibilität bestimmt. Diese zeigt nach (4.49) unter Benutzung der Skalenrelation (4.38) folgendes Finite-Size-Skalenverhalten:

$$\chi(\lambda, \beta, L) = c_1(\lambda) L^{2-\eta} \left(1 + c_2(\lambda) L^{1/\nu}(\beta - \beta_c) + c_3(\lambda) L^{-\omega}\right) . \tag{5.17}$$

Betrachtet man die magnetische Suszeptibilität bei einem festen Wert einer phänomenologischen Kopplung R (siehe die Erläuterungen im vorangegangenen Abschnitt), so gilt:

$$\bar{\chi}(\lambda, L) = \tilde{c}_1(\lambda) L^{2-\eta} \left(1 + \tilde{c}_2(\lambda) L^{-\omega}\right) . \tag{5.18}$$

Bei $\lambda = \lambda_{opt}$ verschwindet die führende Korrekturamplitude, so daß gilt:

$$\bar{\chi}(L) = c L^{2-\eta} . \tag{5.19}$$

Zur Bestimmung des Exponenten ν wurde die erste Ableitung verschiedener phänomenologischer Kopplungen nach β verwendet. Diese zeigen nach (4.56) folgendes Finite-Size-Skalenverhalten:

$$\frac{\partial R}{\partial \beta}(\lambda, \beta, L) = d_1(\lambda) L^{1/\nu} \left(1 + d_2(\lambda) L^{1/\nu}(\beta - \beta_c) + d_3(\lambda) L^{-\omega}\right) . \tag{5.20}$$

Betrachtet man $\partial R / \partial \beta$ bei festem R oder einem festen Wert einer beliebigen anderen phänomenologischen Kopplung, so gilt bei $\lambda = \lambda_{opt}$:

$$\overline{\left(\frac{\partial R}{\partial \beta}\right)} = d L^{1/\nu} . \tag{5.21}$$

(5.19) und (5.21) wurden nun als Fitansätze zur Bestimmung der jeweiligen kritischen Exponenten verwendet. Details sind in Abschnitt 7.3 und Abschnitt 7.4 beschrieben.
Es sei noch erwähnt, daß das Verfahren, bestimmte Größen bei einer festen phänomenologischen Kopplung zu betrachten, nichts mit der Methode der verbesserten Wirkung zu tun hat.
Fitansätze der Art (5.19) und (5.21) gelten genauso, wenn man die Größen bei λ_{opt} und $\beta_c(\lambda_{opt})$ betrachtet.
Das Verfahren hat jedoch zwei Vorteile: um einen muß man $\beta_c(\lambda_{opt})$ nicht kennen und zum anderen führen Korrelationen zwischen der festgehaltenen phänomenologischen Kopplung und der bei dieser betrachteten Größe zu einer Reduktion des statistischen Fehlers [41].

Kapitel 6

Das Simulationsprogramm

Vor Beginn dieser Arbeit wurden bereits Monte-Carlo-Simulationen des einkomponentigen ϕ^4-Modells von M. Hasenbusch [40] durchgeführt. Dabei wurde ebenfalls die Methode der verbesserten Wirkung, kombiniert mit Finite-Size-Techniken, benutzt. Das Simulationsprogramm wurde mir von M. Hasenbusch zur Verfügung gestellt.
Zur Bestimmung von λ_{opt} wurden von M. Hasenbusch für das einkomponentige Modell die phänomenologischen Kopplungen U (6.1) und Z_a/Z_p [42] verwendet, wobei U bei festem Z_a/Z_p betrachtet wurde.
Das erste Ziel dieser Arbeit war es, für das einkomponentige Modell Z_a/Z_p durch die phänomenologische Kopplung R_{min} (6.3) zu ersetzen und das umgeschriebene Programm auf Korrektheit zu testen (Abschnitt 6.2.1).
Anschließend wurden die physikalischen und statistischen Eigenschaften der beiden Größen Z_a/Z_p und R_{min} verglichen (Abschnitt 6.2.2). Dabei wurde auch die phänomenologische Kopplung ξ_{2nd}/L (6.7) untersucht. Es stellte sich heraus, daß ξ_{2nd}/L für die Zwecke dieser Arbeit bessere Eigenschaften als R_{min} aufweist.
Zusätzlich wurden verschiedene Schritte zur Optimierung des Programms unternommen. Diese sind aus Platzgründen für das einkomponentige Modell nicht erläutert. Ebenso wird auf eine Beschreibung der Simulationsalgorithmen für das einkomponentige Modell verzichtet. Es sei lediglich erwähnt, daß die Algorithmen Metropolis, Überrelaxation und Single-Cluster verwendet wurden. (Eine Beschreibung der Algorithmen findet sich in [40], dort wurde allerdings anstatt des Single-Cluster-Algorithmus der sogenannte „Wall-Cluster-Algorithmus“ verwendet.).
Nach Beendigung der Simulationen am einkomponentigen Modell wurde das Programm für das zweikomponentige Modell umgeschrieben. Für dieses sind die Simulationsalgorithmen erläutert (Abschnitt 6.3.1). Anschließend wurden wie beim einkomponentigen Modell Tests auf Korrektheit (Abschnitt 6.3.2) und eine Optimierung des Programms (Abschnitt 6.3.3) durchgeführt.

6.1 Gemessene Größen

In diesem Abschnitt sollen die wichtigsten gemessenen Größen eingeführt werden. Dabei wird die Feldvariable stets in allgemeiner Form als Vektor geschrieben.
Die Binder-Kumulante [43] [1] U ist definiert durch

$$U := \frac{\langle(\vec{m}^2)^2\rangle}{\langle\vec{m}^2\rangle^2} \ , \tag{6.1}$$

wobei

$$\vec{m} = \frac{1}{V}\sum_x \vec{\phi}_x \tag{6.2}$$

die Magnetisierung pro Gitterpunkt bezeichnet.
R_{min} ist definiert durch:

$$R_{min} := \frac{F}{\chi} \ , \tag{6.3}$$

wobei

$$F = \frac{1}{V}\langle|\sum_x \exp\left(i\frac{2\pi}{L}x_1\right)\vec{\phi}_x|^2\rangle \tag{6.4}$$

die Fouriertransformierte der *Korrelationsfunktion* („Zweipunktfunktion“)

$$G(x,y) = \langle\vec{\phi}_x\vec{\phi}_y\rangle \tag{6.5}$$

bei 'minimalem Impuls' $p_{min} = (2\pi/L, 0, 0)$ und

$$\chi = V\langle\vec{m}^2\rangle \tag{6.6}$$

die magnetische Suszeptibilität sind.
F wird auch als „Suszeptibilität bei minimalem Moment“ bezeichnet.
Für die Korrelationslänge ξ sind mehrere sinnvolle Definitionen möglich. In dieser Arbeit wurde die sogenannte „second moment correlation length“ ξ_{2nd} [44] benutzt. ξ_{2nd}/L lautet somit:

$$\frac{\xi_{2nd}}{L} = \frac{1}{L}\left(\frac{\chi/F - 1}{4\sin^2(\pi/L)}\right)^{1/2} \ . \tag{6.7}$$

Der kritische Exponent ν der Korrelationslänge bestimmt sich am einfachsten aus der ersten Ableitung einer beliebigen phänomenologischen Kopplung nach der Kopplungskonstanten β (siehe Abschnitt 5.4).
In dieser Arbeit wurden verwendet:

$$\frac{\partial U}{\partial\beta} = U\left(\langle E\rangle + \frac{\langle(\vec{m}^2)^2 E\rangle}{\langle(\vec{m}^2)^2\rangle} - 2\frac{\langle\vec{m}^2 E\rangle}{\langle\vec{m}^2\rangle}\right) \tag{6.8}$$

[1] Hierbei wurde anders normiert als ursprünglich von Binder.

und

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{\xi_{2nd}}{L} = -\frac{\partial R_{min}}{\partial\beta}\left(8L\xi_{2nd}R_{min}^2\sin^2(\pi/L)\right)^{-1} \quad , \tag{6.9}$$

wobei

$$\frac{\partial R_{min}}{\partial\beta} = R_{min}\left(\frac{\langle FE\rangle}{F} - \frac{\langle\vec{m}^2E\rangle}{\langle\vec{m}^2\rangle}\right) \tag{6.10}$$

ist.
Hierbei gilt stets:

$$E = \sum_{<xy>}\vec{\phi}_x\vec{\phi}_y \ . \tag{6.11}$$

6.2 Das einkomponentige Modell

6.2.1 Tests auf Korrektheit des Programms

Vor Beginn ernsthafter Simulationen wurde das Programm verschiedenen Tests unterzogen, um die Korrektheit zu überprüfen. Dabei wurden die Monte-Carlo-Daten verglichen mit:

- Hochtemperaturentwicklungen
- der exakten Lösung des Gaußschen Modells
- der exakten Lösung des Ising-Modells für kleine Gitter

Im folgenden seien die Tests lediglich kurz erläutert, eine ausführliche Beschreibung sowie die Ergebnisse finden sich in Anhang B.

Hochtemperaturentwicklungen

Für kleine β ist die Kopplung zwischen den Feldvariablen benachbarter Gitterpunkte schwach, und so ist es möglich eine Reihenentwicklung verschiedener Größen in β (für beliebige λ) vorzunehmen. Dies bezeichnet man als Hochtemperaturentwicklung. Die Berechnung von Koeffizienten höherer Ordnung erfordert dabei ausgefeilte Methoden, wie z.B. die sogenannte „linked cluster expansion“ (siehe z.B. M. Wortis in[5]).
In [45] wurden Hochtemperaturentwicklungen durchgeführt, mit einigen der dort bestimmten Größen wurden die Monte-Carlo-Daten verglichen. Die Simulationen wurden bei $\lambda = 1.1$ durchgeführt. Zum Zeitpunkt dieses Tests war aus Simulationen, die von M. Hasenbusch durchgeführt wurden, bekannt: $\lambda_{opt} \approx 1.1$. In Anhang B.1 wird der Test ausführlich erläutert.

Das Gaußsche Modell

Das ϕ^4-Modell mit $\lambda = 0$ wird als Gaußsches Modell bezeichnet. Dieses ist für beliebige Raumdimension d und beliebiger Dimension der Feldvariablen exakt lösbar. In Anhang A findet sich die Lösung des einkomponentigen Gaußschen Modells für beliebige d.
Als Test wurden Simulationen bei $\lambda = 0$ durchgeführt und verschiedene gemessene Größen mit den exakten Werten, die sich aus der Lösung des Gaußschen Modells berechnen lassen, verglichen.
Diese Berechnungen und die Testergebnisse sind in Anhang B.2 zu finden.

Das Isingmodell

Das einkomponentige ϕ^4-Modell wird im Limes $\lambda \to \infty$ zum Ising-Modell (siehe Abschnitt 2.4). Für dieses lassen sich die Erwartungswerte von Observablen für ein kubisches Gitter in annehmbarer Zeit auf dem Rechner exakt berechnen, solange die Gitterlänge klein ist (L<6) [2]. Größere Gitter entziehen sich der exakten Berechnung, da die Zahl der zu erzeugenden Konfigurationen exponentiell mit der Anzahl der Gitterpunkte anwächst (siehe Abschnitt 2.2).
Es bietet sich damit eine weitere Möglichkeit, das Programm zu testen. Eine Beschreibung sowie die Testergebnisse finden sich in Anhang B.3.

6.2.2 Vergleich phänomenologischer Kopplungen

Nach erfolgreicher Beendigung der Programmtests wurden die ersten ernsthaften Simulationen in Angriff genommen.
Zur Bestimmung von λ_{opt} und der kritischen Exponenten η und ν wurden in dieser Arbeit phänomenologische Kopplungen verwendet (siehe die Abschnitte 5.3 und 5.4).
Das Ziel der Simulationen war es, die physikalischen und statistischen Eigenschaften der phänomenologischen Kopplungen R_{min} und Z_a/Z_p [42] zu vergleichen. Dabei wurde auch die phänomenologische Kopplung ξ_{2nd}/L untersucht.
Man beachte, daß ξ_{2nd} von R_{min} wie folgt abhängt:

$$\xi_{2nd} = \sqrt{\frac{1/R_{min} - 1}{4\sin^2(\pi/L)}} \,. \tag{6.12}$$

Aus Simulationen, die von M. Hasenbusch am einkomponentigen Modell durchgeführt wurden [40], lagen für eine Reihe von λ und L Daten vor. Es war aus diesen Simulationen bekannt, daß für das einkomponentige Modell $\lambda_{opt} \approx 1.1$ ist. Zudem lag $\beta_c(\lambda = 1.1) = 0.3750966(4)$ vor.

[2] Für L=4 und L=5 ist dies allerdings auch nur unter geschickter Ausnutzung von Symmetrien des Modells möglich.

L	R_{min}	ξ_{2nd}/L
4	0.071199(30)	0.638486(145)
6	0.063115(19)	0.642134(101)
8	0.060653(19)	0.642728(103)
12	0.059001(27)	0.642923(157)
16	0.058404(32)	0.643166(190)
24	0.058010(42)	0.643180(248)
32	0.057894(44)	0.643062(260)

Tabelle 6.1: R_{min} und ξ_{2nd}/L bei $\lambda = 1.1$.

Zunächst wurde untersucht, ob R_{min} und ξ_{2nd}/L genau wie Z_a/Z_p bei $\lambda = \lambda_{opt}$ am Phasenübergang mit wachsendem L gegen einen konstanten Wert konvergieren. Dazu wurden für verschiedene L Simulationen mit $\lambda = 1.1$ und $\beta = 0.3750966$ durchgeführt. Die Ergebnisse finden sich in Tabelle 6.1.
Man erkennt, daß bei beiden Größen Konvergenz auftritt, wobei ξ_{2nd}/L wesentlich schneller konvergiert. Dies ist vorteilhaft, da schnelle Konvergenz zu einer Reduktion systematischer Fehler führt.
Aus diesem Grund wurde ξ_{2nd}/L vorgezogen und R_{min} nicht mehr betrachtet.
Als nächstes wurde das Verhalten der Binder-Kumulanten U bei festem Z_a/Z_p und bei festem ξ_{2nd}/L verglichen.
Hierzu wurden zusätzlich Simulationen bei $\lambda = 0.4$ und $\lambda = 2.5$ für verschiedene L durchgeführt. Die Ergebnisse finden sich in Tabelle 6.2.
Die Werte stimmen weitestgehend überein, die physikalischen Eigenschaften der beiden Größen sind also gleichartig.
Auch die statistischen Eigenschaften sind in etwa gleich, wie man an den angegebenen statistischen Fehlern erkennt [3]. Da ξ_{2nd}/L leichter zu implementieren ist als Z_a/Z_p, wurde entschieden, für die Simulationen des zweikomponentigen Modells ξ_{2nd}/L zu verwenden.

6.3 Das zweikomponentige Modell

6.3.1 Simulationsalgorithmen

In [48] wurde gezeigt, wie man das einkomponentige ϕ^4-Modell mit Hilfe des Swendsen-Wang-Clusteralgorithmus und des Metropolis-Algorithmus simulieren kann. In dieser Arbeit wurde diese Idee zur Simulation des zweikomponentigen Modells aufgegriffen. Im Unterschied zu [48] wurde hierbei der Single-Cluster-Algorithmus eingesetzt. Der Single-Cluster-Algorithmus dient der Änderung der

[3] Die Simulationen wurden mit vergleichbarer Statistik wie in [40] ausgeführt.

L	$U\|_{Z_a/Z_p}$	$U\|_{\xi_{2nd}/L}$
$\lambda = 0.4$		
6	1.680597(254)	1.680591(215)
8	1.663237(271)	1.665520(222)
12	1.647475(262)	1.649634(287)
16	1.637989(283)	1.639756(300)
24	1.628142(318)	1.630552(391)
32	1.624319(482)	1.624578(384)
$\lambda = 1.1$		
4	1.618939(202)	1.601276(162)
6	1.605741(116)	1.601877(127)
8	1.603906(104)	1.602489(130)
12	1.603168(187)	1.602849(209)
16	1.603367(277)	1.602770(253)
24	1.603608(316)	1.603096(336)
32	1.602874(339)	1.603992(347)
$\lambda = 2.5$		
6	1.561379(215)	1.558680(171)
8	1.569403(236)	1.568474(267)
12	1.578729(250)	1.578919(209)
16	1.584285(254)	1.584166(223)
24	1.589761(295)	1.590245(279)
32	1.592872(434)	1.592943(385)

Tabelle 6.2: U bei festem $Z_a/Z_p = 0.5425$ und bei festem $\xi_{2nd}/L = 0.643$ für drei verschiedene Werte von λ. Die Werte, bei denen die phänomenologischen Kopplungen festgehalten wurden, sind Schätzwerte für Z_a/Z_p^* bzw. ξ_{2nd}/L^* (siehe (5.10)). Die statistischen Fehler sind in Klammern angegeben.

Richtung der Feldvariablen, der Metropolis-Algorithmus der Änderung ihres Betrags. Im folgenden sei die konkrete Realisierung der Algorithmen kurz beschrieben (vergleiche mit den Erläuterungen der Algorithmen in Kapitel 3).
Single-Cluster-Algorithmus:
Zunächst wird zufällig eine Richtung $\vec{n}$ in der xy-Ebene gewählt:

$$n_1 = \sin(2\pi\theta) \quad n_2 = \cos(2\pi\theta) \ , \tag{6.13}$$

wobei θ eine gleichverteilte Zufallszahl aus [0,1) ist.
Anschließend wird zufällig ein beliebiger Gitterpunkt als Startpunkt des Clusters ausgesucht. Der Cluster wird rekursiv aufgebaut, hierbei wird die Tiefensuche verwendet. Die Wahrscheinlichkeit zur Aufnahme eines neuen Gitterpunktes in

den Cluster ist hierbei gegeben durch:

$$p = 1 - \min\left[1, \exp(-2\beta(\vec{n}\vec{\phi}_x)(\vec{n}\vec{\phi}_y))\right] \ . \tag{6.14}$$

Abschließend werden alle Gitterpunkte des Clusters gespiegelt:

$$\vec{\phi}'_x = \vec{\phi}_x - 2(\vec{n}\vec{\phi}_x)\vec{n} \ . \tag{6.15}$$

Metropolis-Algorithmus:
In einem Schritt des Algorithmus wird am Gitterpunkt x vorgeschlagen, die Beträge der Komponenten der Feldvariablen zu ändern:

$$\phi'_{i,x} = \phi_{i,x} + s(r_i - 0.5) \ , \tag{6.16}$$

mit $i = 1, 2$, wobei r_i eine gleichverteilte Zufallszahl aus [0,1) und s ein Parameter ist, mit dem sich die Akzeptanzrate beeinflussen läßt [4]. Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit lautet:

$$A = \min[1, \exp(S - S')] \ , \tag{6.17}$$

wobei S die Wirkung der alten Konfiguration und S' die Wirkung der neuen Konfiguration sind.

6.3.2 Tests auf Korrektheit des Programms

Das Programm für das zweikomponentige Modell wurde ebenfalls einer Reihe von Tests unterworfen. Dabei wurden die Ergebnisse der Simulationen verglichen mit:

- Hochtemperaturentwicklungen
- der exakten Lösung des Gaußschen Modells
- Ergebnissen aus Monte-Carlo-Simulationen des XY-Modells

Hochtemperaturentwicklungen

Das Prinzip des Tests ist dasselbe wie beim einkomponentigen Modell (Abschnitt 6.2.1). Details zur Durchführung und die Testergebnisse sind in Anhang C.1 zu finden.

Das Gaußsche Modell

Bei $\lambda = 0$ lassen sich simulierte Größen auch für das zweikomponentige ϕ^4-Modell mit den exakten Ergebnissen des Gaußschen Modells vergleichen. Hierzu muß die Lösung des zweikomponentigen Gaußschen Modells nicht explizit bekannt sein, denn alle in den Tests betrachteten Größen lassen sich mit Hilfe des einkomponentigen Modells berechnen. In Anhang C.2 ist dies ausführlich beschrieben, dort sind auch die Testergebnisse aufgeführt.

[4] Man versucht durch Tuning des Parameters s eine Akzeptanzrate von ca. 50 Prozent zu erhalten. Für die Simulation des zweikomponentigen Modells erwies sich $s = 2$ als optimal.

Das XY-Modell

Analog wie beim Ising-Modell erzwingt $\lambda \to \infty$ für die Feldvariable des zweikomponentigen ϕ^4-Modells $\mid \vec{\phi}_x \mid = 1$. Sie wird zu einem zweidimensionalen Einheitsvektor. Für diesen Grenzfall geht das Modell exakt in das XY-Modell über, für das Monte-Carlo-Daten existieren [47]. Mit diesen wurde das Simulationsprogramm verglichen (siehe Anhang C.3).

6.3.3 Programmoptimierung

Zur Optimierung des Programms wurden verschiedene Schritte unternommen. Aus Platzgründen sei im folgenen nur eine Auswahl wiedergegeben. Die einzelnen Schritte wurden in ähnlicher Weise bereits für das einkomponentige Modell durchgeführt.
Die größten Anstrengungen wurden bei der Optimierung der *Performance* unternommen. Unter Performance ist das Inverse des Produkts aus der Autokorrelationszeit τ und der für einen „Update-Zyklus“ benötigten CPU-Zeit zu verstehen. Ein Update-Zyklus trennt hierbei zwei Messungen der Observablen des simulierten Systems. Unter einem Update versteht man die Erzeugung einer neuen Konfiguration des Systems mit Hilfe der in Kapitel 3 vorgestellten Algorithmen. Je mehr Updates man in einem Zyklus einsetzt, desto kleiner werden die Autokorrelationszeiten und damit der statistische Fehler der gemessenen Observablen, hält man die Anzahl der Messungen fest. Gleichzeitig steigt aber die benötigte CPU-Zeit an. Man erwartet also für das Produkt $\tau\times$ CPU-Zeit ein Minimum, dort ist die Performance optimal.
Es wurden nun eine Reihe von Testläufen bei verschieden λ und L im kritischen Bereich durchgeführt, um die optimale Performance zu ermitteln. Die Autokorrelationszeit wurde dabei für verschiedene Größen bestimmt. Für die Updates wurden die Algorithmen Metropolis, Überrelaxation und Single-Cluster eingesetzt. Der Metropolis-Algorithmus ist ineffizient (critical slowing down), wird aber für die Sicherstellung der Ergodizität benötigt. Es wurde pro Update-Zyklus deshalb nur ein Metropolis eingesetzt. Die restlichen Algorithmen wurden innerhalb eines Zyklus in verschiedener Anzahl und in verschiedenen Kombinationen ausprobiert und jeweils die Performance gemessen. Dabei wurde in allen Fällen ein Verhalten gefunden, wie in Abbildung 6.1 am Beispiel der 'inneren Energie' (6.11) pro Gitterpunkt verdeutlicht. Das Produkt $\tau\times$ CPU-Zeit zeigt kein 'scharfes' Minimum, sondern ist über ein weiten Bereich der Anzahl der eingesetzten Single-Cluster konstant. Geht man über diesen Bereich hinaus, so steigt $\tau\times$ CPU-Zeit jedoch stark an. Für die Ermittlung der optimalen Performance genügt es also, ein solches 'Tal' zu finden.
Die beste Performance wurde in fast allen Fällen erreicht, wenn zusätzlich zu Metropolis lediglich Single-Cluster verwendet wurden. Dabei steigt die optimale Zahl der Single-Cluster in etwa linear mit L an.

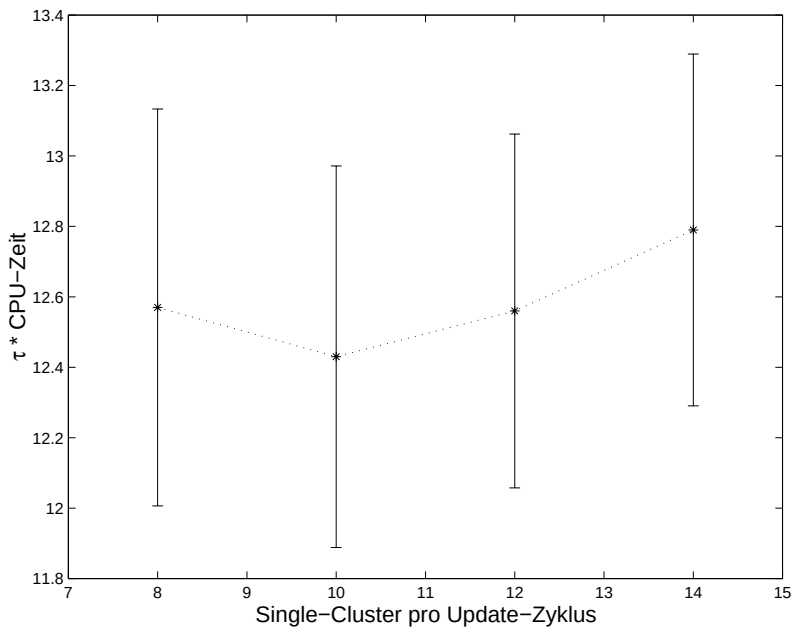

Abbildung 6.1: Ausschnitt aus einer Performancemessung am Beispiel der inneren Energie pro Gitterpunkt. Die Simulationen wurden bei $\lambda = 1.0$ im kritischen Bereich mit $L = 16$ durchgeführt. Man erahnt bei 10 Single-Clustern pro Update-Zyklus ein Optimum der Performance. Die Kurve verläuft jedoch sehr flach, der Wert ist also nicht kritisch. Innerhalb der statistischen Fehler stimmen die Werte in diesem Bereich sogar überein. Die statistischen Fehler wurden über (3.26) bestimmt.

Für das größte Gitter ($L = 48$) erwiesen sich 40 Single-Cluster pro Zyklus als optimal. Der Überrelaxations-Algorithmus wurde im weiteren Verlauf dieser Arbeit nicht mehr eingesetzt.
Eine weitere Optimierung wurde bei den Abfragen der Akzeptanzwahrscheinlichkeiten (6.14) und (6.17) vorgenommen. Beide benötigen die Berechnung der Exponentialfunktion, die auf dem Rechner viel CPU-Zeit kostet.
Die Vorgehensweise sei am Beispiel des Metropolis-Algorithmus beschrieben. Zunächst berechnet man $\Delta := S - S'$, wobei nur die nächsten Nachbarn des Gitterpunktes, an dem die Änderung vorgeschlagen wird, in Betracht gezogen werden müssen. Ist $\Delta \geq 0$, so wird der Vorschlag mit der Wahrscheinlichkeit 1 akzeptiert. Die Berechnung der Exponentialfunktion kann dann von vornherein entfallen. Ist jedoch $\Delta \leq 0$, so wird akzeptiert, falls $\exp(\Delta) > r$ oder äquivalent $\Delta > \ln(r)$ ist. Um sich die Berechnung von $\ln(r)$, die genauso zeitaufwendig ist, zu ersparen, legt man sich im Programm einmalig eine Tabelle an, in der man eine feste Anzahl n von Werten für $\ln(x)$ abspeichert, wobei x in gleichmäßigen Abständen $1/n$ von $1/n$ bis 1 zu wählen ist. Diese Werte legt man an den Positionen 2 bis

$n+1$ der Tabelle ab. Für $\ln(0)$ wählt man zusätzlich eine betraglich sehr große negative Zahl und legt sie an der Position 1 der Tabelle ab. Die Tabelle enthält dann $n+1$ Einträge. Die Abfrage der Akzeptanz geschieht nun folgendermaßen: Man vergleicht zunächst Δ mit dem $(nr+1)$-ten [5] Tabelleneintrag. Ist Δ größer als dieser Eintrag, so wird akzeptiert. Andernfalls wird geprüft, ob Δ größer als der (rn)-te Eintrag ist. Falls nein, wird nicht akzeptiert. Falls ja, so muß $\ln(r)$ berechnet werden. Dieser Fall kommt aber nur noch selten vor. Es handelt sich hierbei um ein exaktes Verfahren.
Schließlich sei noch eine weitere Optimierung erwähnt: Die für diese Arbeit äußerst wichtige phänomenologische Kopplung ξ_{2nd}/L (6.7) hängt von der Größe F (6.4) ab. Bei der Berechnung von F im Programm (Messung) wurde über die drei Raumrichtungen x_1, x_2 und x_3 gemittelt, was zu einer Reduktion des statistischen Fehlers von F und damit auch von ξ_{2nd}/L führt.

6.4 Technische Details

Die meisten Simulationen dieser Arbeit wurden auf 200 MHz Pentium Pro PCs ausgeführt. Die gesamte CPU-Zeit betrug ca. 3 Jahre. Die Simulationsprogramme wurden in der Programmiersprache C geschrieben, die Auswertung der Simulationsdaten wurde mit dem Softwarepaket MATLAB durchgeführt. Zur Erzeugung der Pseudo-Zufallszahlen wurde der linear kongruente Zufallszahlengenerator G05CAF aus der NAG-Bibliothek verwendet. Dieser erzeugt eine Zahlenfolge

$$z_i = (a\, z_{i-1} + c) \mathrm{mod}\, b \tag{6.18}$$

mit $a = 13^{13}$, $b = 2^{59}$ und $c = 0$.

[5] Dabei werden in rn die Nachkommastellen abgeschnitten.

Kapitel 7

Analyse der Daten

In diesem Kapitel wird die Auswertung der Simulationsdaten, sowie der Vergleich der Ergebnisse mit Literaturwerten beschrieben. Bei der Bestimmung der meisten Größen (insbesondere der kritischen Exponenten) waren dabei nichtlineare Fits vonnöten. Dazu wurde die Methode des χ^2-*Fittings* [49] verwendet. Die Minimierung der χ^2-Funktion wurde stets mit Hilfe der *Downhill Simplex*-Methode [49] durchgeführt.

7.1 Systematische Fehler

Die in Kapitel 3.5.1 vorgestellte Fehleranalyse von Monte-Carlo-Daten gibt uns lediglich Auskunft über *statistische* Fehler. Da heutzutage aufgrund der rasanten Entwicklung der Computertechnik statistische Fehler sehr klein gehalten werden können [1], ist eine sorgfältige Analyse der *systematischen* Fehler unerläßlich, da diese von der Rechenzeit unabhängig sind.
Die Hauptursache systematischer Fehler bei der Bestimmung universeller Größen sind nicht-analytische Korrekturen zu Skalengesetzen. Dies gilt insbesondere für die Bestimmung kritischer Exponenten mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen. Diese Korrekturen werden mit wachsender Gittergröße geringer. Die einfachste Methode zur Kontrolle systematischer Fehler besteht deshalb darin, Fits mehrmals durchzuführen und dabei L_{min} sukzessive zu erhöhen, wobei L_{min} die Gitterlänge des kleinsten, in den Fit mit einbezogenen Gitters sein soll (dabei steigt allerdings der statistische Fehler an, da die Anzahl der Daten sinkt). Tritt ab einem bestimmten L_{min} im Rahmen der statistischen Ungenauigkeit eine Stabilisierung der gefitteten Größe auf, so kann das Ergebnis aus dem Fit bei diesem L_{min} als Schätzwert angegeben werden. Der systematische Fehler ist dann für diesen Fit abzuschätzen.
In dieser Arbeit wurde mit Hilfe der Methode der verbesserten Wirkung die füh-

[1] Es gilt: $\sigma \propto N^{-1/2}$, wobei N die Anzahl der Messungen ist.

rende Skalenkorrektur $\sim L^{-\omega}$ eliminiert [2], höhere Korrekturen sind jedoch nach wie vor vorhanden. Diese wurden aber in den Fitansätzen zur Bestimmung der kritischen Exponenten nicht berücksichtigt, führen also zu einem systematischen Fehler.
Des weiteren ist zu beachten, daß die Bestimmung der Nullstelle der führenden Korrekturamplitude (m.a.W. die Bestimmung von λ_{opt}) numerisch geschieht und somit fehlerbehaftet ist. Zudem kann eine genaue Bestimmung von λ_{opt} erst nach Beendigung der Simulationen erfolgen [3]. Simulationen, die der Bestimmung kritischer Exponenten dienen, müssen also zwangsläufig bei einem vorläufigen Schätzwert für λ_{opt} durchgeführt werden, der aus vorbereitenden Simulationen mit kleinen Gittern gewonnen wird. Daher ist bei der Bestimmung der kritischen Exponenten mit einer (wenn auch kleinen) verbleibenden führenden Korrektur zu rechnen, die ebenfalls nicht in die Fitansätze aufgenommen wird und somit zu einem weiteren systematischen Fehler führt.
Methoden zur Abschätzung dieses systematischen Fehlers werden in Abschnitt 7.3 beschrieben.
Im folgenden sei erläutert, wie der systematische Fehler, der durch die Vernachlässigung höherer Korrekturen entsteht, abgeschätzt werden kann.
Als führende in den Fitansätzen vernachlässigte höhere Korrektur wird $\sim L^{-2}$ angenommen. Diese ist aus dem Gaußschen Modell bekannt [4].
Es gibt zusätzlich eine Vielzahl weiterer höherer Korrekturen, die jedoch gegenüber der gerade genannten vernachlässigbar sind.
Zur Abschätzung des Fehlers führt man nun zwei getrennte Fits durch, einmal mit Gittern im Bereich $L_{min}, ..., L_{max}$ und einmal mit $L'_{min}, ..., L'_{max}$, wobei $L'_{min} = 2L_{min}$ und $L'_{max} = 2L_{max}$ sind.
Der systematische Fehler beträgt dann beim zweiten Fit nur noch ein Viertel des systematischen Fehlers beim ersten Fit. Aus der Differenz der Fitergebnisse lässt sich nun (unter Berücksichtigung des statistischen Fehlers) der systematische Fehler abschätzen: Er beträgt ein Drittel der Differenz.
Dies läßt sich verallgemeinern: Geht man davon aus, daß die führende vernachlässigte Korrektur $\sim L^{-\alpha}$ ist, so beträgt der systematische Fehler $\Delta/(\alpha^2 - 1)$, wenn Δ die Differenz der beiden Fitergebnisse ist.

7.2 Bestimmung von λ_{opt}

Das Verfahren zur Bestimmung von λ_{opt} wurde in Abschnitt 5.3 ausführlich erläutert. Als phänomenologische Kopplungen R_1 und R_2 wurden die Binder-Kumulante U (6.1) und ξ_{2nd}/L (6.7) gewählt.

[2] Und damit auch alle Korrekturen $\sim L^{-n\omega}$, mit $n > 1$.
[3] Vor Beginn dieser Arbeit war λ_{opt} vollkommen unbekannt.
[4] Die Ergebnisse aus [50] weisen darauf hin, daß solche Korrekturen auch am Wilson-Fisher-Fixpunkt existieren.

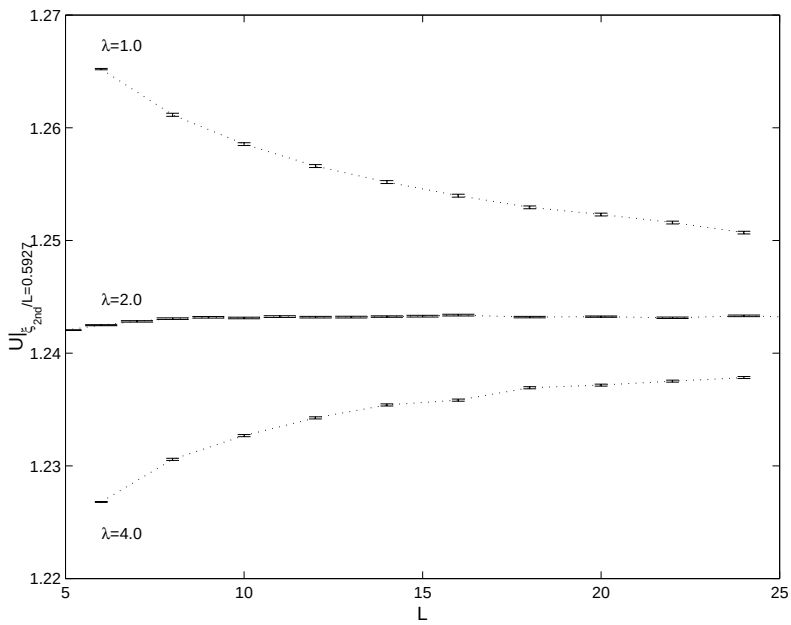

Abbildung 7.1: Die Binder-Kumulante bei festem $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ für drei verschiedene Werte von λ als Funktion von L. Die Fehlerbalken stellen den statistischen Fehler dar.

Aus vorbereitenden Simulationen, die für verschiedene λ bei verhältnismäßig kleinen Gittern (i.a. $L \leq 24$) durchgeführt wurden, wurde mit Hilfe der „cumulant-crossing"-Methode [43] ein Schätzwert für ξ_{2nd}/L^* ermittelt:

$$\xi_{2nd}/L^* = \lim_{L\to\infty} \frac{\xi_{2nd}}{L}|_{\beta=\beta_c} \approx 0.5927 \ , \tag{7.1}$$

sowie für diese Simulationen U bei festem $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ ausgewertet.
Zur Bestimmung von U bei $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ bestimmt man zunächst für alle λ und L jeweils dasjenige $\beta_f(\lambda, L)$, bei dem $\xi_{2nd}/L(\beta, \lambda, L)$ den Wert 0.5927 annimmt. Anschließend bestimmt man für alle λ und L den Wert von U bei $\beta_f(\lambda, L)$. Diese 'Umwichtung' der Größe U wird mit Hilfe einer Taylorreihe zweiter Ordnung in β durchgeführt. Die erforderlichen Koeffizienten stammen aus der ursprünglichen Simulation. Es wurde dabei sehr gründlich darauf geachtet, daß der systematische Fehler, der durch die Trunkierung der Reihe entsteht, stets kleiner als der statistische Fehler ist [5].
Abbildung 7.1 [6] zeigt die Ergebnisse für $\lambda = 1.0$, $\lambda = 2.0$ und $\lambda = 4.0$.

[5] Dies gilt auch für alle anderen Größen, die in dieser Arbeit bei einem festen Wert einer phänomenologischen Kopplung ausgewertet wurden.

[6] Aus Gründen der Anschaulichkeit sind in Abbildung 7.1 auch Ergebnisse aus Simulationen zu sehen, die zu einem späteren Zeitpunkt durchgeführt wurden.

λ	L	stat/3×10^6
0.5	8,16	17,5
1.0	6,8,10,12,14,16,18,20,22,24	50,10,10,10,10,10,10,10,10,11
1.5	8,16	13,6
1.7	8,12,24	15,10,2.5
1.8	3,4,5,6,7,8,9,10,12,16	20,67,67,20,40,15,45,30,15,8
1.9	3,4,5,6,7,8,12,16,20,24	33,27,20,20,15,20,10,10,11,10
1.98	8,12,16,20,24	20,15,10,11,15
2.0	3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14	133,67,67,50,25,20,24,20,20,20,20,30
	15,16,18,20,22,24,26,28,32,40,48	20,20,25,25,25,20,16,15,22,10,10
2.2	3,4,5,6,7,8,9,10,12,16,24	133,67,67,50,40,15,45,30,15,8,5
4.0	6,7,8,9,10,11,12,14,16,18,20,22,24	50,20,10,10,10,9,10,10,10,10,10,10,10

Tabelle 7.1: Auflistung der Simulationsparameter. In der ersten Spalte finden sich die λ-Werte, in der zweiten Spalte die Gitterlänge L und in der dritten Spalte die Anzahl der Messungen geteilt durch 3×10^6.

Im Limes $L \to \infty$ erwartet man für alle λ Konvergenz gegen eine universelle Konstante. Dieses Verhalten ist deutlich zu erkennen. Man erkennt weiterhin, daß bei $\lambda = 2.0$ diese Konstante bereits für sehr kleine Gitter im Rahmen der durch statistische Fehler bedingten Ungenauigkeit erreicht wird, d.h. $\lambda = 2.0$ war ein guter vorläufiger Schätzwert für λ_{opt}.
Nach diesen vorbereitenden Betrachtungen wurde nun eine Vielzahl weiterer Simulationen durchgeführt, wobei das Hauptgewicht auf Simulationen bei $\lambda = 2.0$ gelegt wurde. In Tabelle 7.2 sind die Simulationsparameter aufgelistet.
Für die Binder-Kumulante bei festem $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ gilt nach (5.14):

$$\bar{U}(L, \lambda) = \tilde{U}^* + c(\lambda) L^{-\omega}. \tag{7.2}$$

Hierbei ist $\tilde{U}^*$ die oben erwähnte universelle Konstante.
Zur genaueren Bestimmung von λ_{opt} wurden nun alle Daten gemäß Ansatz (7.2) gemeinsam gefittet. Der Fit enthält die freien Parametern $\tilde{U}^*$, ω sowie die $c(\lambda)$ für alle λ.
Die Ergebnisse für $\tilde{U}^*$ und ω sind in Tabelle 7.2 aufgeführt. Man erkennt, daß die χ^2/d.o.f.-Werte trotz steigendem L_{min} relativ groß bleiben. Dieses Verhalten konnte nicht erklärt werden. Andererseits stabilisiert sich ω im Rahmen der statistischen Fehler bereits für kleine L_{min}. Dies deutet darauf hin, daß der systematische Fehler verhältnismässig klein ist. Eine sorgfältige Abschätzung des systematischen Fehlers wäre nur unter großen Anstrengungen durchführbar gewesen. Als Schätzwert für ω sei angegeben:

$$\omega = 0.79(2) \ . \tag{7.3}$$

Tabelle 7.3 enthält die Korrekturamplitude $c(\lambda)$ für alle λ.

L_{min}	χ^2/d.o.f.	$\tilde{U}^*$	ω
6	5.42	1.24357(3)	0.7863(57)
8	2.34	1.24324(4)	0.7753(61)
10	2.15	1.24311(5)	0.7879(97)
12	1.80	1.24297(6)	0.7815(135)
14	1.75	1.24279(8)	0.7902(197)
16	1.86	1.24274(9)	0.8186(311)

Tabelle 7.2: Fitergebnisse für die Binder-Kumulante U bei $\xi_{2nd}/L = 0.5927$.

λ	$L_{min} = 12$	$L_{min} = 14$	$L_{min} = 16$
0.5	0.2152(83)	0.2220(122)	0.2408(207)
1.0	0.0956(37)	0.0999(57)	0.1094(100)
1.5	0.0398(21)	0.0424(27)	0.0464(42)
1.7	0.0229(12)	0.0280(32)	0.0314(42)
1.8	0.0153(8)	0.0186(16)	0.0207(22)
1.9	0.0077(8)	0.0099(11)	0.0114(15)
1.98	0.0038(7)	0.0067(10)	0.0079(13)
2.0	0.0022(6)	0.0043(8)	0.0057(13)
2.2	– 0.0074(7)	– 0.0057(13)	– 0.0056(16)
4.0	– 0.0604(24)	– 0.0601(36)	– 0.0649(63)

Tabelle 7.3: Korrekturamplitude $c(\lambda)$ als Funktion von λ für verschiedene L_{min}.

Aus den Ergebnissen für die Korrekturamplitude läßt sich λ_{opt} abschätzen. Lineare Interpolation der Ergebnisse bei $\lambda = 2.0$ und $\lambda = 2.2$ führt auf $\lambda_{opt} = 2.046(9), 2.086(9)$ und $2.101(10)$, jeweils für $L_{min} = 12, 14$ und 16.
Man erkennt ein Ansteigen des Wertes mit wachsendem L_{min}, welches jedoch mit wachsendem L_{min} geringer wird. Als endgültiger Schätzwert sei angegeben:

$$\lambda_{opt} = 2.10(1)[5] \ . \tag{7.4}$$

Der groben Abschätzung des systematischen Fehlers dient hierbei die Differenz der Ergebnisse für $L_{min} = 12$ und $L_{min} = 16$.
Abschließend wurde noch ein Fit der Differenz von $\bar{U}$ bei $\lambda = 2.0$ und $\lambda = 2.2$ durchgeführt. Der Fitansatz hierzu lautet:

$$\bar{U}(L, \lambda = 2.0) - \bar{U}(L, \lambda = 2.2) = \tilde{c}L^{-\omega} \ . \tag{7.5}$$

Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.4 aufgeführt.
χ^2/d.o.f.$\approx$ 1 wird bereits für $L_{min} = 3$ erreicht. Auch das Ergebnis für ω ist bereits für $L_{min} = 3$ mit (7.3) konsistent.

L_{min}	ω	$\tilde{c}(2.0) - \tilde{c}(2.2)$	χ^2/d.o.f.
3	0.787(18)	0.0106(3)	0.98
4	0.780(31)	0.0104(5)	1.09
5	0.794(43)	0.0107(9)	1.21

Tabelle 7.4: Fits der Differenz von $\bar{U}$ bei $\lambda = 2.0$ und $\lambda = 2.2$.

Dies deutet darauf hin, daß höhere Korrekturen nur sehr wenig von λ abhängen und sich in $\bar{U}(L, \lambda = 2.0) - \bar{U}(L, \lambda = 2.2)$ kompensieren. Diese Beobachtung wurde bereits in [40] für das einkomponentige Modell gemacht.

7.3 Der Exponent η

Der kritische Exponent η wurde aus dem Finite-Size-Skalenverhalten der magnetischen Suszeptibilität χ bestimmt. Dabei wurde χ sowohl bei festem $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ als auch bei festem $U = 1.243$ betrachtet. $U = 1.243$ ist ein guter Schätzwert für

$$U^* = \lim_{L \to \infty} U(\lambda, L)|_{\beta = \beta_c(\lambda)} \ , \tag{7.6}$$

und wurde wie ξ_{2nd}/L^* mit Hilfe der cumulant-crossing-Methode ermittelt. Im folgenden bezeichne $\bar{\chi}$ die magnetische Suszeptibilität bei einer der beiden festgehaltenen phänomenologischen Kopplungen. Die Daten wurden bei $\lambda = 2.0$, also in der Nähe von λ_{opt}, ausgewertet.
Es wurde nach (5.19) zunächst folgendes Skalenverhalten zugrunde gelegt:

$$\bar{\chi} = dL^{2-\eta} \ . \tag{7.7}$$

Die Ergebnisse finden sich in Tabelle 7.5 (für festes U) und in Tabelle Tabelle 7.6 (für festes ξ_{2nd}/L).
Man erkennt, daß in beiden Fällen große L_{min} notwendig waren, um χ^2/d.o.f ≈ 1 zu erhalten. Aus diesem Grund wurden die Fits wiederholt, diesmal mit folgendem Ansatz:

$$\bar{\chi} = c + dL^{2-\eta} \ . \tag{7.8}$$

Der Fitparameter c berücksichtigt den analytischen Anteil der freien Energiedichte. Man beachte, daß dieser Ansatz effektiv auch Skalenkorrekturen $\sim L^{-x}$ mit $x \approx 2$ parametrisiert.
Die Ergebnisse befinden sich in Tabelle 7.7 (für festes ξ_{2nd}/L) und in Tabelle 7.8 (für festes U). Man erkennt, daß in beiden Fällen bereits für kleine Gitter χ^2/d.o.f. ≈ 1 erreicht wird. Dennoch stimmen die Werte für kleine Gitter noch nicht im Rahmen der statistischen Ungenauigkeit überein. Dies ist ein Beispiel dafür, daß ein kleines χ^2/d.o.f. nicht bedeuten muß, daß der systematische Fehler von der gleichen Größenordnung wie der statistische ist.

L_{min}	d	η	χ^2/d.o.f.
10	1.2556(4)	0.03639(12)	8.25
14	1.2598(6)	0.03740(16)	2.27
16	1.2617(8)	0.03785(21)	1.24
18	1.2616(9)	0.03784(23)	1.42
20	1.2628(11)	0.03811(27)	1.00
22	1.2628(13)	0.03811(31)	1.20
24	1.2644(16)	0.03845(38)	0.83
26	1.2625(20)	0.03804(46)	0.29

Tabelle 7.5: Fits der magnetischen Suszeptibilität bei $U = 1.243$ nach Ansatz (7.7).

L_{min}	d	η	χ^2/d.o.f.
14	1.25629(20)	0.03667(5)	10.28
24	1.25957(50)	0.03742(11)	2.91
26	1.26067(61)	0.03766(14)	0.70
28	1.26117(75)	0.03777(17)	0.40

Tabelle 7.6: Fits der magnetischen Suszeptibilität bei $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ nach Ansatz (7.7).

Die Ergebnisse aus den Fits nach Ansatz (7.7), also ohne die Korrektur c, stimmen für hinreichend große Gitter mit den Ergebnissen aus den Fits mit dieser (7.8) überein. Die statistischen Fehler aus den Fits bei festem ξ_{2nd}/L nach Ansatz (7.8) sind kleiner als die aus den Fits bei festem U. Deshalb wurde der endgültige Schätzwert für η (7.10) aus den Fits bei festem ξ_{2nd}/L entnommen.
Zur Abschätzung des systematischen Fehlers aufgrund der vernachlässigten Korrektur $\sim L^{-2}$ wurde wie in Abschnitt 7.1 beschrieben vorgegangen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.9 aufgeführt. Als endgültiger Schätzwert für η (7.10) wurde der Wert aus dem Fit mit $L_{min} = 14$ und $L_{max} = 48$ gewählt, da dieser den kleinsten systematischen Fehler aufweist. Der systematische Fehler beträgt $\approx 0.00036/3 = 0.00012$.
Aufgrund der effektiven Parametrisierung von Korrekturen $\sim L^{-x}$ mit $x \approx 2$ in Ansatz (7.8) ist der systematische Fehler möglicherweise überschätzt, man ist jedoch unter der Annahme, daß die führende vernachlässigte Skalenkorrektur $\propto L^{-2}$ ist, auf der sicheren Seite.
Zur Abschätzung des systematischen Fehlers aufgrund der verbleibenden Korrektur $\sim L^{-\omega}$ bei $\lambda = 2.0$ wurde wie folgt vorgegangen:
Es wurden Fits nach Ansatz (7.8) für $\lambda = 1.0$ und $\lambda = 4.0$, ebenfalls bei festem ξ_{2nd}/L und bei $L_{min} = 14$ durchgeführt (siehe Tabelle 7.10, diese enthält

L_{min}	c	d	η	χ^2/d.o.f.
6	-0.3602(40)	1.26187(21)	0.03784(5)	2.07
7	-0.3809(68)	1.26246(26)	0.03798(6)	1.33
8	-0.395(11)	1.26280(34)	0.03805(8)	1.17
10	-0.381(18)	1.26254(43)	0.03800(10)	1.06
12	-0.393(32)	1.26275(62)	0.03804(14)	1.21
14	-0.405(43)	1.26289(73)	0.03807(16)	1.40
16	-0.436(72)	1.26330(99)	0.03815(21)	1.32
18	-0.52(10)	1.2642(13)	0.03833(26)	1.33
20	-0.47(15)	1.2637(16)	0.03823(32)	1.55
22	-0.74(23)	1.2660(22)	0.03869(44)	1.29
24	-0.90(34)	1.2673(30)	0.03893(59)	1.59
26	-0.22(53)	1.2624(42)	0.03799(81)	0.97

Tabelle 7.7: Fits der magnetischen Suszeptibilität bei $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ nach Ansatz (7.8).

auch Werte für $L_{min} = 12$). $|\Delta\eta_{eff}|$ bezeichne den Betrag der Differenz in η aus den beiden Fits unter Berücksichtigung der statistischen Fehler. In Tabelle 7.3 sind die Werte für die Korrekturamplitude $c(\lambda)$ aufgeführt. $|\Delta c(\lambda)|$ bezeichne die Differenz der Korrekturamplituden bei $\lambda = 1.0$ und $\lambda = 4.0$, ebenfalls unter Berücksichtigung der statistischen Fehler. Es gilt:

$$\left|\frac{\Delta\eta_{eff}}{\Delta c(\lambda)}\right| < 0.018 \quad . \tag{7.9}$$

Ebenfalls aus Tabelle 7.3 entnimmt man, daß unter Berücksichtigung des statistischen Fehlers $c(2.0) = 0.007$ gilt (hierbei wurde der Fit mit $L_{min} = 16$ zugrunde gelegt). Das bedeutet, daß der systematische Fehler kleiner als 0.00013 sein sollte. Hierbei wird vorausgesetzt, daß sich η_{eff} als Funktion der Korrekturamplitude im betrachteten λ-Bereich linear verhält, was im Rahmen der Ungenauigkeit aufgrund statistischer Fehler der Fall ist.
Als Check wurde dasselbe Verfahren bei $L_{min} = 12$ durchgeführt. Es wurde, wie erwartet, ein leicht größerer systematischer Fehler gefunden. Eine weitere Methode zur Abschätzung des systematischen Fehlers ist in [52] beschrieben. Diese wurde ebenfalls durchgeführt und führte auf ein übereinstimmendes Ergebnis [7].
Der endgültige Schätzwert für η lautet somit:

$$\eta = 0.0381(2)[2] \ . \tag{7.10}$$

In den runden Klammern steht der statistische Fehler, in den eckigen Klammern der systematische.

[7] Die erwähnte Methode ist umfangreicher als die oben beschriebene und wird deshalb aus Platzgründen nicht erläutert.

L_{min}	c	d	η	χ^2/d.o.f.
4	-0.464(4)	1.2651(4)	0.03845(11)	3.27
6	-0.525(12)	1.2681(6)	0.03917(16)	0.76
8	-0.526(30)	1.2682(10)	0.03918(23)	0.85
10	-0.553(55)	1.2688(14)	0.03931(31)	0.96
12	-0.574(90)	1.2691(18)	0.03937(40)	1.05
14	-0.47(13)	1.2676(22)	0.03907(49)	1.17
16	-0.24(23)	1.2649(32)	0.03851(67)	1.27
18	-0.51(33)	1.2678(41)	0.03911(84)	1.25
20	-0.06(47)	1.2635(52)	0.0382(11)	1.20
22	-0.14(51)	1.2641(55)	0.0384(11)	1.49

Tabelle 7.8: Fits der magnetischen Suszeptibilität bei $U = 1.243$ nach Ansatz (7.8).

L_{min}	η	L'_{min}	η	$\Delta\eta$
6	0.03772(10)	12	0.03804(14)	0.00032(24)
7	0.03800(13)	14	0.03807(16)	0.00007(29)
8	0.03822(17)	16	0.03815(21)	0.00007(38)
9	0.03836(21)	18	0.03833(26)	0.00003(47)
10	0.03809(28)	20	0.03823(32)	0.00014(60)
11	0.03806(32)	22	0.03869(44)	0.00063(76)
12	0.03824(51)	24	0.03893(59)	0.00059(110)

Tabelle 7.9: Abschätzung des systematischen Fehlers aufgrund vernachlässigter Korrekturen. Es ist stets $L_{max} = 24$ und $L'_{max} = 48$. $\Delta\eta$ bezeichnet die Differenz der Fitergebnisse. Details siehe Text.

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung des kritischen Exponenten η bietet das Finite-Size-Skalenverhalten der vierten Potenz der Magnetisierung:

$$\overline{\langle m^4 \rangle} = aL^{-2-2\eta} \,, \tag{7.11}$$

wobei $\overline{\langle m^4 \rangle}$ den Wert von $\langle m^4 \rangle$ bei festem U bzw. ξ_{2nd}/L bezeichnet.
Als Check wurden Fits nach diesem Ansatz durchgeführt. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 7.11 und 7.12 aufgeführt. Die Werte für η stimmen für hinreichend große L_{min} mit (7.10) überein. Auf eine Abschätzung systematischer Fehler wurde hierbei verzichtet.

λ	$L_{min} = 12$		$L_{min} = 14$	
	η	χ^2/d.o.f.	η	χ^2/d.o.f.
1.0	0.0392(8)	2.63	0.0375(13)	2.68
2.0	0.0380(2)	1.21	0.0381(2)	1.40
4.0	0.0365(7)	0.89	0.0373(13)	0.97

Tabelle 7.10: Fitergebnisse für η für verschiedene Werte von λ. Details siehe Text.

L_{min}	a	η	χ^2/d.o.f.
16	1.9676(8)	0.0371(1)	5.22
22	1.9720(12)	0.0374(1)	2.27
24	1.9742(15)	0.0376(1)	1.17
26	1.9763(19)	0.0377(1)	0.27
28	1.9771(23)	0.0378(2)	0.26
32	1.9764(31)	0.0377(2)	0.41

Tabelle 7.11: Fits der vierten Potenz der Magnetisierung bei $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ nach Ansatz (7.11).

L_{min}	a	η	χ^2/d.o.f.
12	1.967(2)	0.0370(1)	4.28
14	1.973(2)	0.0374(2)	2.27
16	1.979(3)	0.0379(2)	1.24
18	1.979(3)	0.0378(2)	1.42
20	1.982(4)	0.0381(3)	1.00
22	1.982(4)	0.0381(3)	1.20
24	1.987(5)	0.0385(4)	0.83
26	1.981(6)	0.0380(5)	0.29

Tabelle 7.12: Fits der vierten Potenz der Magnetisierung bei $U = 1.243$ nach Ansatz (7.11).

L_{min}	c	ν	χ^2/d.o.f.
6	-0.5542(5)	0.6709(1)	3.82
7	-0.5565(6)	0.6715(2)	1.76
8	-0.5578(7)	0.6719(2)	1.02
10	-0.5586(9)	0.6721(2)	0.96
12	-0.5595(11)	0.6723(3)	0.80
14	-0.5608(13)	0.6727(4)	0.65
16	-0.5620(18)	0.6729(5)	0.69
20	-0.5610(24)	0.6727(6)	0.63
24	-0.5632(36)	0.6732(9)	0.50

Tabelle 7.13: Fits von $\frac{\partial U}{\partial \beta}$ bei $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ nach Ansatz (7.12).

7.4 Der Exponent ν

Für die Bestimmung des kritischen Exponenten ν wurde die Ableitung der Binder-Kumulanten nach β bei festem ξ_{2nd}/L und bei festem U betrachtet.
Diese Größen zeigen nach (5.21) bei $\lambda = \lambda_{opt}$ folgendes Finite-Size-Skalenverhalten:

$$\overline{\left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right)} = cL^{1/\nu} \ . \tag{7.12}$$

Die Fits wurden mit Ansatz (7.12) bei $\lambda = 2.0$ durchgeführt. Die Ergebnisse finden sich in Tabelle 7.13 (für festes ξ_{2nd}/L) und in Tabelle 7.14 (für festes U). Die Werte für χ^2/d.o.f. erreichen ≈ 1 für $L_{min} = 8$ (bei festem ξ_{2nd}/L) und für $L_{min} = 7$ (bei festem U).

L_{min}	c	ν	χ^2/d.o.f.
6	-0.5551(4)	0.6712(1)	2.07
7	-0.5564(5)	0.6716(1)	1.19
8	-0.5572(6)	0.6718(2)	0.80
10	-0.5577(7)	0.6719(2)	0.73
12	-0.5583(9)	0.6721(3)	0.62
14	-0.5593(11)	0.6723(3)	0.51
16	-0.5601(15)	0.6725(4)	0.55
20	-0.5592(21)	0.6723(5)	0.48
24	-0.5610(31)	0.6727(7)	0.30

Tabelle 7.14: Fit von $\frac{\partial U}{\partial \beta}$ bei $U = 1.243$ nach Ansatz (7.12).

L_{min}	ν	L'_{min}	ν	$\Delta\nu$
6	0.6708(2)	12	0.6721(3)	0.0013(5)
7	0.6712(2)	14	0.6723(3)	0.0011(5)
8	0.6715(5)	16	0.6725(4)	0.0010(7)
10	0.6715(3)	20	0.6723(4)	0.0008(7)
12	0.6717(5)	24	0.6727(7)	0.0010(15)
14	0.6721(6)	28	0.6723(11)	0.0002(17)

Tabelle 7.15: Abschätzung des systematischen Fehlers aufgrund vernachlässigter Korrekturen. Es ist stets $L_{max} = 24$ und $L'_{max} = 48$. $\Delta\nu$ bezeichnet die Differenz der Fitergebnisse.

λ	ν	χ^2/d.o.f.
1.0	0.6706(11)	2.36
2.0	0.6723(3)	0.51
4.0	0.6758(10)	3.04

Tabelle 7.16: Fits von $\frac{\partial U}{\partial \beta}$ bei festem U bei $L_{min} = 14$ für verschiedene Werte von λ.

Die statistischen Fehler sind bei festem U ein wenig geringer, der endgültige Schätzwert für ν wurde deshalb Tabelle 7.14 entnommen. Wie bei der Bestimmung des kritischen Exponenten η treten zusätzlich zu den statistischen Fehlern systematische Fehler auf, die auf höhere Korrekturen $\sim L^{-2}$ und verbleibende führende Korrekturen $\sim L^{-\omega}$ zurückzuführen sind. Bei der Abschätzung dieser systematischen Fehler wurde genauso vorgegangen wie in Abschnitt 7.3 beschrieben.
Die zur Abschätzung des systematischen Fehlers aufgrund der Korrektur $\sim L^{-2}$ durchgeführten Fits sind in Tabelle 7.15 aufgeführt. Sie wurden bei festem U durchgeführt. Als endgültiger Schätzwert für ν wurde der Fit mit $L_{min} = 14$ und $L_{max} = 48$ gewählt. Der systematische Fehler wird geschätzt auf: $0.0016/3 \approx 0.0005$.
Zur Abschätzung des systematischen Fehlers aufgrund der verbleibenden führenden Korrektur wurden wie in Abschnitt 7.3 zusätzliche Fits bei festem U bei $\lambda = 1.0$ und $\lambda = 4.0$ durchgeführt. Tabelle 7.16 zeigt die Ergebnisse für $L_{min} = 14$. In Analogie zu (7.9) erhält man:

$$\left|\frac{\Delta\nu_{eff}}{\Delta c(\lambda)}\right| < 0.04 \ . \tag{7.13}$$

Die Korrekturamplitude c(2.0) wurde in Abschnitt 7.3 durch ≈ 0.007 abgeschätzt, der systematische Fehler läßt sich demnach durch $0.04 \times 0.007 \approx 0.0003$ abschätzen.

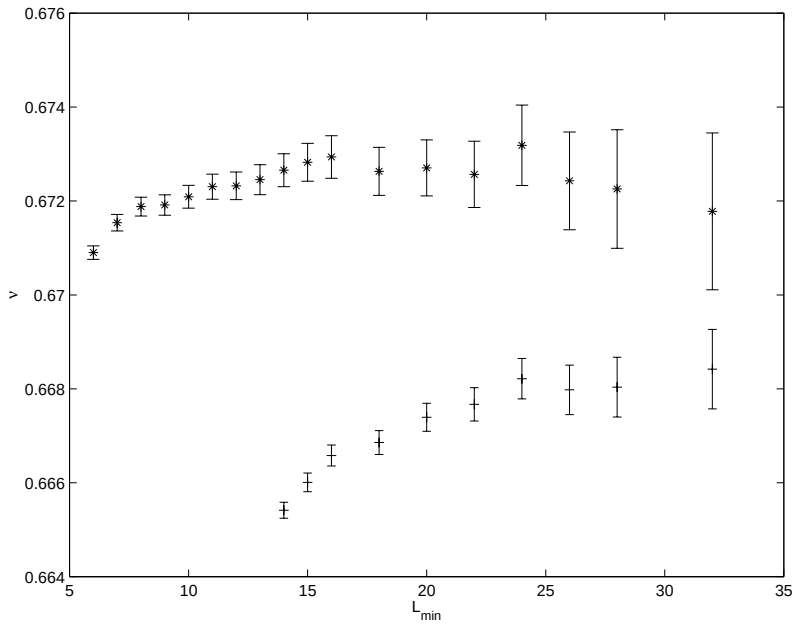

Abbildung 7.2: Vergleich der Fits von $\frac{\partial \ln\langle m^2\rangle}{\partial\beta}$ (Plus) und $\frac{\partial U}{\partial\beta}$ (Sternchen), jeweils bei $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ und $\lambda = 2.0$ als Funktion von L_{min}. Die Fehlerbalken stellen den statistischen Fehler dar.

Der endgültige Schätzwert für ν lautet somit:

$$\nu = 0.6723(3)[8] \ . \tag{7.14}$$

Er stammt aus dem Fit der Ableitung der Binder-Kumulanten U bei festem $U = 1.243$ mit $L_{min} = 14$. In den runden Klammern ist der statistische Fehler angegeben, in den eckigen Klammern der systematische.
Dieses Ergebnis wird durch Fits bestätigt, die aus der Ableitung von ξ_{2nd}/L nach β bei festem ξ_{2nd}/L sowie bei festem U durchgeführt wurden. Diese Fits sind hier aus Platzgründen nicht aufgeführt.
Der Erwartungswert der Ableitung des Logarithmus der n-ten Potenz der Magnetisierung nach β zeigt ebenfalls ein führendes Finite-Size-Skalenverhalten $\sim L^{1/\nu}$ (siehe [51]).
Bei fester phänomenologischer Kopplung gilt dann analog zu (7.12):

$$\overline{\left(\frac{\partial \ln\langle m^n\rangle}{\partial\beta}\right)} = bL^{1/\nu} \tag{7.15}$$

Als Check wurden Fits nach Ansatz (7.15) mit $n = 2$ und $n = 4$ bei festem U und festem ξ_{2nd}/L durchgeführt. Die Größe erwies sich jedoch in allen Fällen

für die Bestimmung von ν als schlecht geeignet. Der Grund ist in Abbildung 7.2 ersichtlich: Die Fitergebnisse für ν beginnen sich erst bei relativ großen L_{min} zu stabilisieren. Das bedeutet, daß systematische Fehler aufgrund von Skalenkorrekturen eine größere Rolle spielen als bei der Ableitung der Binder-Kumulanten und deshalb für diese Größe Simulationen an deutlich größeren Gittern vonnöten wären.

7.5 Die kritische Linie

Das ϕ^4-Modell in drei Dimensionen mit den beiden Kopplungskonstanten λ und β weist einen kontinuierlichen Phasenübergang auf. Die beiden Phasen (ferro-und paramagnetisch) werden durch eine *kritische Linie* $\lambda(\beta_c)$ im zweidimensionalen Raum der Kopplungskonstanten voneinander getrennt.
Der genaue Verlauf der kritischen Linie hängt von der Zahl der Komponenten der Feldvariablen $\vec{\phi}^4$ ab. Vor der Aufnahme dieser Arbeit waren für das zweikomponentige Modell lediglich zwei Punkte der kritischen Linie bekannt. Für $\lambda = 0$ weiß man aus der exakten Lösung des Gaußschen Modells: $\beta_c = 1/3$. Für $\lambda = \infty$ (XY-Modell) existieren Schätzwerte, z.B. aus Monte-Carlo-Simulationen [55]: $\beta_c = 0.454165(4)$.
In Tabelle 7.17 sind diese und weitere, aus dieser Arbeit stammende, Punkte der kritischen Linie aufgeführt. Im folgenden sei kurz auf ihre Bestimmung und die Abschätzung des systematischen Fehlers eingegangen.
Zur Bestimmung der kritischen Exponenten wurden verschiedene Größen $A(\lambda, \beta_s, L)$ (β_s ist derjenige Wert von β, bei dem simuliert wurde) auf einen Wert $A(\lambda, \beta_f, L)$ 'umgewichtet', bei dem eine phänomenologische Kopplung R einen festen Wert R_f annahm. Man kann nun einfach zeigen, daß β_f bei festgehaltenem λ mit wachsendem L der kritischen Kopplung β_c zustrebt.
Für R_f gilt unter Vernachlässigung höherer Korrekturen:

$$R_f = R^* + c_1(\lambda)L^{1/\nu}(\beta_f - \beta_c) + c_2(\lambda)L^{-\omega} \ . \tag{7.16}$$

Aufgelöst nach $\beta_c - \beta_f$ ergibt sich:

$$\beta_c - \beta_f = \frac{R^* - R_f}{c_1(\lambda)} L^{-1/\nu} + \frac{c_2(\lambda)}{c_1(\lambda)} L^{-\omega-1/\nu} \ . \tag{7.17}$$

Nun wurde für alle λ für das jeweils größte simulierte Gitter ($L = L_{max}$) $\beta_f(\lambda, L_{max})$ als Schätzwert für $\beta_c(\lambda)$ angegeben. Dabei wurde $R_f = \xi_{2nd}/L = 0.5927$ gewählt (Tabelle 7.17).
Der systematische Fehler ist dann für alle λ durch $\beta_c(\lambda) - \beta_f(\lambda, L_{max})$ gegeben. Bei festgehaltenem λ sind c_1 und c_2 konstant, $\beta_c - \beta_f$ fällt also führend mit $L^{-1/\nu}$ ab (Tabelle 7.18).
Somit läßt sich der systematische Fehler nach dem in Abschnitt 7.1 beschriebenen Verfahren abschätzen (man wähle für α anstatt 2 nun $1/\nu \approx 1.5$).

λ	L	β_c
0		0.33...
0.5	16	0.4828[6]
1.0	24	0.50754[7]
1.5	16	0.51197[7]
1.7	24	0.51160[2]
1.8	16	0.51115[2]
1.9	24	0.510576(2)[7]
1.98	24	0.510049(1)[7]
2.0	48	0.5099049(6)[9]
2.2	24	0.508344(2)[4]
4.0	24	0.49243[5]
∞		0.454165(4)

Tabelle 7.17: Schätzwerte der kritischen Kopplung β_c für alle λ, bei denen Simulationen durchgeführt wurden. Angegeben sind die jeweilige Gittergröße, von der der Schätzwert stammt, sowie statistische Fehler (runde Klammern) und systematische Fehler (eckige Klammern). Der statistische Fehler ist nur dann angegeben, wenn er von der gleichen Größenordnung wie der systematische ist. Der Wert für $\lambda = \infty$ stammt aus [55].

Als Check wurde $\beta_c(\lambda)$ für $\lambda = 2.0$ noch mit Hilfe der cumulant-crossing-Methode bestimmt. Bei festem λ gilt nach [43]:

$$\beta_c - \beta_{cross}(L) \sim \frac{s^{-\omega} - 1}{1 - s^{1/\nu}} L^{-\omega - 1/\nu} \tag{7.18}$$

$\beta_{cross}(L)$ ist hierbei derjenige Wert von β, bei dem eine beliebige phänomenologische Kopplung sowohl für L, als auch für sL denselben Wert annimmt und wird für das größte L als Schätzwert für β_c genommen. Die Methode wurde bei festem $s = 2$ für U und für ξ_{2nd}/L durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.19 angegeben. Die systematischen Fehler wurden ebenfalls nach der in Abschnitt 7.1 beschriebenen Methode abgeschätzt.

7.6 Bewertung der Ergebnisse

Tabelle 7.6 zeigt einen Vergleich aktueller Resultate für kritische Exponenten der 3d-XY-Universalitätsklasse mit den Ergebnissen aus dieser Arbeit. Die angegeben Resultate wurden mit Hilfe von Hochtemperaturentwicklungen, der ϵ-Entwicklung, störungstheoretischen Rechnungen in drei Dimensionen und Monte-Carlo-Simulationen auf der einen Seite sowie experimentellen Untersuchungen des λ-Übergangs von ^{4}He auf der anderen Seite bestimmt. Auf die jeweiligen Referenzen wird in der Tabelle verwiesen.

L	$\beta_f(\lambda = 1.0)$	$\beta_f(\lambda = 4.0)$
6	0.5068769(58)	0.4930495(60)
8	0.5071860(86)	0.4927117(89)
12	0.5074090(47)	0.4925217(47)
16	0.5074921(31)	0.4924664(31)
20	0.5075265(21)	0.4924465(22)
24	0.5075432(16)	0.4924287(17)

Tabelle 7.18: β_f für $\xi_{2nd}/L = 0.5927$ bei $\lambda = 1.0$ und $\lambda = 4.0$. Die Werte konvergieren mit wachsender Gittergröße gegen $\beta_c(\lambda)$.

L	$\beta_{cross}(U)$	$\beta_{cross}(\xi_{2nd}/L)$
6	0.50992[29]	0.5099[4]
8	0.50993[6]	0.50991[11]
12	0.50991[2]	0.509907(3)[12]
16	0.509900(2)[9]	0.509905(2)[4]
20	0.509904(2)[4]	0.509906(2)[1]
24	0.509902(2)[3]	0.509905(2)[2]

Tabelle 7.19: $\beta_{cross}(L)$ bei festem $s = 2$ für $\lambda = 2.0$, ermittelt mit Hilfe von U (linke Spalte) und ξ_{2nd}/L (rechte Spalte). In runden Klammern ist der statistische, in eckigen Klammern der systematische Fehler angegeben. Der statistische Fehler ist nur dann aufgeführt, wenn er von der gleichen Größenordnung wie der systematische ist.

Die Genauigkeit der Ergebnisse für die kritischen Exponenten ν und η aus dieser Arbeit übertrifft alle bisherigen theoretisch bestimmten Resultate.
Innerhalb der Fehlergrenzen stimmt das Ergebnis für ν mit fast allen theoretisch bestimmten Resultaten überein. Das Resultat der Monte-Carlo-Studie [47] scheint ein wenig zu klein zu sein.
Das Ergebnis für η stimmt mit allen Resultaten bis auf diejenigen aus den Monte-Carlo-Studien [53], [47] und [55] überein. Die Werte aus [53] und [47] sind im Vergleich zu dem Ergebnis dieser Arbeit zu klein. Es ist zu beachten, daß in diesen Arbeiten keine genaue Analyse systematischer Fehler, die aufgrund von Skalenkorrekturen entstehen, durchgeführt wurde. Andererseits ist das Resultat aus der Arbeit [55] um zwei Standardabweichungen größer als das Ergebnis aus dieser Arbeit, obwohl in [55] Korrekturen $\sim L^{-\omega}$ in Betracht gezogen wurden.
Im Gegensatz zum einkomponentigen Modell [40] ist das Ergebnis für den Korrekturexponenten ω in Übereinstimmung mit den theoretisch bestimmten Resultaten.
Wenige Tage vor Beendigung dieser Arbeit wurde ein Vorabdruck einer Arbeit

Referenz	Methode	ν	η	ω
Diese Arbeit	MC	0.6723(3)[8]	0.0381(2)[2]	0.79(2)
[47]	MC	0.662(7)	0.026(6)	
[53]	MC	0.670(2)	0.025(7)*	
[54]	MC	0.6693(58)	0.035(5)	
[55]	MC	0.6721(13)	0.042(2)	
[56]	3d,ST	0.6703(15)	0.0354(25)	0.789(11)
[56]	ϵ,bc	0.6680(35)	0.0380(50)	0.802(18)
[56]	ϵ,free	0.671	0.0370	0.802(18)
[57]	HT	0.674(2)	0.039(7)*	
[11]	^{4}He	0.67095(13)		
[12]	^{4}He	0.6705(6)		
[13]	^{4}He	0.6708(4)		

Tabelle 7.20: Ergebnisse für kritische Exponenten aus Monte-Carlo-Simulationen (MC), ϵ-Entwicklung , 3d-Störungstheorie (3d,ST) und Hochtemperaturentwicklungen (HT). Der Index $_{bc}$ besagt, daß bei der Analyse die exakten Werte der kritischen Exponenten in 2d in Betracht gezogen wurden. Dies ist bei $_{free}$ nicht der Fall. Falls in der Referenz lediglich ν und γ angegeben waren, wurde η mit Hilfe der Skalenrelation $\gamma/\nu = 2 - \eta$ berechnet. Diese Fälle sind durch ein * gekennzeichnet. In Referenz [11] wird ein Ergebnis für α angegeben. In dieser Tabelle wird ν aus diesem mit Hilfe der Skalenrelation $\alpha = 2 - d\nu$ bestimmt. Eine Diskussion der Ergebnisse findet sich im Text.

veröffentlicht [8] [58], deren Genauigkeit bei der Bestimmung kritischer Exponenten die in dieser Arbeit erzielte Genauigkeit übertrifft.
Die hohe Genauigkeit in [58] ist darauf zurückzuführen, daß in dort bereits das Ergebnis $\lambda_{opt} = 2.10(1)[5]$ aus dieser Arbeit verwendet wurde [9], um mit Hilfe einer verbesserten Wirkung Hochtemperaturentwicklungen für das zweikomponentige ϕ^4-Modell durchzuführen.
In [58] werden angegeben:

$$\nu = 0.67166(55) \ , \qquad \eta = 0.0381(3) \ . \tag{7.19}$$

Diese Werte befinden sich in schöner Übereinstimmung mit den Ergebnissen dieser Arbeit.
Die untersten drei Zeilen von Tabelle 7.6 zeigen Resultate für ν, die aus Experimenten an ^{4}He stammen. Die Resultate sind deutlich genauer als die Ergebnisse dieser Arbeit und (bis auf [12]) auch genauer als das Resultat in [58].

[8] Dieser ist seit dem 27.5.1999 auf dem 'cond-mat'-Server zu finden.

[9] Ein Vorabdruck der Ergebnisse dieser Arbeit wurde am 28.4.1999 auf dem 'cond-mat'-Server veröffentlicht.

Die hohe Genauigkeit ist darauf zurückzuführen, daß das singuläre Verhalten der Kompressibilität am λ-Übergang schwach ist und daß sehr reine Proben zur Verfügung stehen. Darüber hinaus besteht die Möglichkeit Experimente im Weltraum auszuführen. Dabei wird der Einfluß der Schwerkraft auf den Phasenübergang beträchtlich reduziert. Die Experimente in [11] wurden im Space Shuttle ausgeführt und liefern die bei weitem genauesten Resultate.
Die experimentell erhaltenen Werte sind etwas geringer als das Ergebnis dieser Arbeit, jedoch die Fehlerbalken berühren sich zumindest. Das Resultat aus [58] liegt näher am experimentellen Resultat.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden die kritischen Exponenten η und ν der dreidimensionalen XY-Universalitätsklasse mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen des zweikomponentigen ϕ^4-Modells bestimmt.
Hierbei wurden Finite-Size-Techniken sowie die Methode der verbesserten Wirkung verwendet. Es gelang dabei durch Eliminierung der führenden Skalenkorrektur die Genauigkeit in der Bestimmung der Exponenten gegenüber bisherigen theoretischen Resultaten deutlich zu verbessern.
Insbesondere wurden zusätzlich zu den statistischen Fehlern sorgfältig bestimmte systematische Fehler, die durch Skalenkorrekturen entstehen, angegeben.
Das Resultat $\nu = 0.6723(3)$[8] ist mit allen theoretischen Resultaten verträglich. Es ist jedoch größer als die experimentellen Resultate, die durch die Untersuchung des λ-Übergangs von ^{4}He [11, 12, 13] erzielt wurden, die Werte von 0.6704 bis 0.6709 mit einer Unsicherheit in der letzten Stelle aufweisen.
Es wäre interessant, die Genauigkeit des theoretischen Schätzwertes bis zur Genauigkeit der experimentellen Ergebnisse zu verbessern. Dies könnte mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen erreicht werden, indem man bei $\lambda = 2.1$ simuliert und dabei Gitter verwendet, die in etwa eine doppelte Gitterlänge als die in dieser Arbeit betrachteten aufweisen. Die dafür notwendige CPU-Zeit auf einem heutzutage erhältlichen PC dürfte etwa 10 Jahre betragen.
Eine andere Möglichkeit zur Verbesserung der theoretischen Schätzwerte für kritische Exponenten wäre es, den in dieser Arbeit ermittelten Wert für λ_{opt} für Hochtemperaturentwicklungen zu verwenden. Bei diesen ist die Anwesenheit nichtanalytischer Korrekturen das hauptsächliche Hindernis beim Studium kritischer Phänomene, da die nichtanalytischen Korrekturen zu großen und nur schwer auffindbaren systematischen Fehlern bei der Analyse der Reihen führen. Die Verwendung einer verbesserten Wirkung kann hier Abhilfe schaffen, jedoch ist sie mit analytischen Methoden nur sehr schwer zu finden. Hier sind Monte-Carlo-Simulationen im Vorteil.
Diese Möglichkeit wurde auch tatsächlich schon genutzt. In [59] wurde der Schätzwert für λ_{opt} [40] (3d-Ising-Universalitätsklasse) und in [58] der Schätzwert für

λ_{opt} aus dieser Arbeit verwendet, um mit Hilfe von Hochtemperaturentwicklungen kritische Exponenten zu berechnen. Dabei gelang es in beiden Fällen, die Genauigkeit deutlich zu verbessern.
Die Resultate in [58] sind näher an den Ergebnissen aus den Experimenten an ^{4}He als die Resultate dieser Arbeit.
Insgesamt unterstützen also die Resultate die Hypothese, daß der λ-Übergang in der 3d-XY-Universalitätsklasse liegt.

Ein zusammen mit Martin Hasenbusch erstellter Vorabdruck der Ergebnisse dieser Arbeit ist auf dem „e-Print-archive“ unter cond-mat/9904408 einzusehen.
Der Vorabdruck ist zur Begutachtung bei der Fachzeitschrift JOURNAL OF PHYSICS A: MATHEMATICAL AND GENERAL eingereicht worden.

Anhang A

Exakte Lösung des einkomponentigen Gaußschen Modells

Der Einfachheit halber sei der einkomponentige Fall $N = 1$ betrachtet, d.h. ϕ_x ist ein reellwertiges Skalarfeld. Im folgenden wird die Kopplungskonstante κ verwendet. Es gilt: $2\kappa = \beta$.
Es sei ein L^d-dimensionales Gitter mit periodischen Randbedingungen zugrunde gelegt. Die Zustandssumme (ohne äußeres Feld) lautet dann:

$$\mathcal{Z} \;=\; \int D\phi \;\exp\left\{\sum_x \left(2\kappa \sum_\mu \phi_x \phi_{x+\hat{\mu}} - \phi_x^2\right)\right\} \;, \tag{A.1}$$

wobei

$$D\phi = \prod_x \frac{d\phi_x}{\sqrt{\pi}} \tag{A.2}$$

die Integration abkürzt, es handelt sich also um ein L^d-dimensionales Gaußintegral. Die Summe $\sum_\mu$ im Exponenten läuft über alle Raumrichtungen $\mu = 1, ..., d$, wobei $\hat{\mu}$ als Einheitsvektor in der jeweiligen Raumrichtung aufzufassen ist.
Zur Lösung solcher Integrale gibt es ein festes Schema, das nun vorgestellt werden soll:
Man betrachtet zunächst folgendes eindimensionale Integral:

$$\begin{aligned} Z(j) &= \int dx\, e^{-(1/2)\,Ax^2 + jx} \qquad \text{, mit} \\ Z(0) &= \int dx\, e^{-(1/2)\,Ax^2} \;=\; \sqrt{2\pi/A}\;. \end{aligned}$$

Zur Berechnung von $Z(j)$ ändert man die Variable: $x = x' + j/A$ und schreibt:

$$-\frac{1}{2}\,xAx + jx = -\frac{1}{2}\,x'Ax' + \frac{1}{2}\,j\frac{1}{A}\,j\;.$$

Damit lautet die Lösung des Integrals:

$$Z(j) = e^{(1/2)j\,(1/A)\,j}\, Z(0)\ .$$

Man betrachtet nun das entsprechende N-dimensionale Integral :

$$Z(j) = \int \prod_{i=1}^{N} dx_i \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^{N} j_i x_i\right)\ , \tag{A.3}$$

wobei die Matrix A symmetrisch und positiv definit sein soll. Zur Vereinfachung der Schreibweise setzt man im folgenden:

$$\sum_{i,j=1}^{N} x_i A_{ij} x_j = x^T A x\ , \qquad \sum_{i=1}^{N} j_i x_i = j^T x\ .$$

Hierbei sind $x = (x_1 ... x_N)$ und $j = (j_1 ... j_N)$ Spaltenvektoren, und x^T bzw. j^T die transponierten Zeilenvektoren.
Zur Lösung des Integrals führt man, analog zum eindimensionalen Fall, eine Transformation der Variablen durch: $x = x' + A^{-1} j$, so daß gilt:

$$-\frac{1}{2} x^T A x + j^T x = -\frac{1}{2} x'^T A x' + \frac{1}{2} j^T A^{-1} j\ .$$

(Die Matrix A^{-1} existiert, da A als positiv definit angenommen wurde).
Man erhält:

$$Z(j) = e^{(1/2) j^T A^{-1} j} Z(0)\ . \tag{A.4}$$

Es bleibt die Berechnung von $Z(0)$:

$$Z(0) = \int \prod_{i=1}^{N} dx_i e^{-(1/2) x^T A x}\ . \tag{A.5}$$

Sei nun R eine orthogonale Transformation ($RR^T = \mathbf{1}$), die A diagonalisiert:

$$A = R^T D R, \quad D = \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & 0 \\ 0 & & \ddots & \\ & & & d_N \end{pmatrix}, \quad d_i > 0 \quad \forall i\ .$$

Man benötigt noch eine Variablentransformation: $x' = Rx$ $(\det R = 1)$, dann gilt:

$$\int \prod_{i=1}^{N} dx_i e^{-(1/2) x^T A x} = \int \prod_{i=1}^{N} dx'_i e^{-(1/2) x'^T D x'}\ .$$

Bei dem Integral auf der rechten Seite handelt es sich um N unabhängige Gauß-Integrale, es wird gelöst durch:

$$(2\pi)^{N/2} \prod_{i=1}^{N} (d_i)^{-1/2} = \frac{(2\pi)^{N/2}}{(detA)^{1/2}} \ . \tag{A.6}$$

Somit gilt schließlich:

$$Z(0) = \frac{(2\pi)^{N/2}}{(detA)^{1/2}} \ . \tag{A.7}$$

Nach diesen Vorbereitungen ist man nun in der Lage die Zustandssumme (A.1) zu berechnen.
Dazu geht man von (A.5) aus. Der Exponent in (A.1):

$$\sum_x \left(2\kappa \sum_\mu \phi_x \phi_{x+\hat{\mu}} - \phi_x^2 \right)$$

läßt sich in der Form wie in (A.5) :

$$-\frac{1}{2} x^T A x = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} x_i A_{ij} x_j$$

schreiben, wenn man $\phi := (\phi_{x_1}, ..., \phi_{x_N})$ mit x identifiziert. Dann ergibt sich als Lösung (A.7) für die Zustandssumme:

$$\mathcal{Z} = (\mathrm{det}A)^{-1/2} \ . \tag{A.8}$$

(Der Faktor $(2\pi)^{N/2}$ taucht nicht mehr auf, da er in die Integration miteinbezogen wurde (A.2)).
Die Bestimmung von A und die Berechnung der Determinante gestalten sich im Ortsraum als mühselig. Ein Blick auf (A.6) weist einen einfacheren Weg: Man benötigt eine orthogonale Transformation des Vektors ϕ, die A diagonalisiert. Das leistet die diskrete Fouriertransformation. Beim Übergang in den Impulsraum wird also A diagonal, die Zustandssumme ergibt sich dann in einfacher Weise aus den Eigenwerten von A [1].
In der Literatur wird die explizite Transformation meist nicht angegeben, deshalb sei sie hier einmal durchgeführt (der Einfachheit halber für den Fall einer Raumdimension) :
Dazu formt man zunächst die Zustandssumme (A.1) ein wenig um:

$$\mathcal{Z} = \int D\phi \exp\left\{ -\kappa \sum_x \left(\sum_\mu (\phi_x - \phi_{x+\hat{\mu}})^2 + \left(\frac{1}{\kappa} - 2d \right) \phi_x^2 \right) \right\} \ . \tag{A.9}$$

[1] Dies ist ein schönes Beispiel dafür, daß es mitunter nützlich ist in den Impulsraum zu wechseln, da sich dort analytische Rechnungen oft vereinfachen. Für die Anschauung und insbesondere für Monte-Carlo-Simulationen hingegen eignet sich der Ortsraum i.a. besser.

Der Exponent lautet dann für $d = 1$:

$$-\kappa \sum_x \left((\phi_x - \phi_{x+1})^2 + \left(\frac{1}{\kappa} - 2 \right) \phi_x^2 \right) \ , \tag{A.10}$$

wobei die Summation über x von 0 bis $L-1$ laufen soll [2].
Der Übergang in den Impulsraum gestaltet sich nun wie folgt [3]:

$$\tilde{\phi}_k = \frac{1}{L} \sum_x \phi_x \exp\left(-i \frac{2\pi}{L} kx \right) \ . \tag{A.11}$$

Entsprechend lautet die Rücktransformation in den Ortsraum :

$$\phi_x = \sum_k \tilde{\phi}_k \exp\left(i \frac{2\pi}{L} kx \right) \ . \tag{A.12}$$

Auch hier laufen die Indices x und k von 0 bis $L-1$.
Man benötigt noch folgende Identität [4]:

$$\frac{1}{L} \sum_{x=0}^{L-1} \exp\left(i \frac{2\pi}{L} (l-m) x \right) = \delta_{l,m} \ . \tag{A.13}$$

Nun kann man (A.10) im Impulsraum darstellen. Man transformiert zunächst:

$$\begin{aligned}
\sum_x (\phi_x - \phi_{x+1})^2 &= \\
&= \sum_x \left\{ \sum_k \left[\tilde{\phi}_k \exp\left(i \frac{2\pi}{L} kx \right) - \tilde{\phi}_k \exp\left(i \frac{2\pi}{L} k(x-1) \right) \right] \right\}^2 \\
&= \sum_x \left\{ \sum_k \left[\tilde{\phi}_k \exp\left(i \frac{2\pi}{L} kx \right) \left(1 - \exp\left(i \frac{2\pi}{L} k \right) \right) \right] \right\}^2 \\
&= \sum_k \sum_{k'} \tilde{\phi}_k \tilde{\phi}_{k'} \sum_x \exp\left(i \frac{2\pi}{L} (k+k') x \right) \times \\
&\quad \times \left[1 - \exp\left(i \frac{2\pi}{L} k \right) - \exp\left(i \frac{2\pi}{L} k' \right) + \exp\left(i \frac{2\pi}{L} (k+k)' \right) \right] \\
&= L \sum_k \tilde{\phi}_k \tilde{\phi}_{-k} \left[2 - \left(\exp\left(i \frac{2\pi}{L} k \right) + \exp\left(-i \frac{2\pi}{L} k \right) \right) \right] \\
&= L \sum_k \tilde{\phi}_k \bar{\tilde{\phi}}_k \left[2 - 2 \cos\left(\frac{2\pi}{L} k \right) \right] \ .
\end{aligned}$$

[2] Nach wie vor seien periodische Randbedingungen vorausgesetzt, deshalb ist ϕ_L wie ϕ_0 zu behandeln.

[3] Zur allgemeinen Definition der diskreten Fouriertransformation siehe z.B. [60].

[4] Die Gültigkeit der Transformationen läßt sich dann durch einfaches Einsetzen schnell verifizieren. Zur Verdeutlichung der Beziehung führe man die Summation einmal auf dem Einheitskreis aus, z.B. für L=4.

Bei der vorletzten Umformung wurde zum einen (A.13) benutzt und zum anderen, daß bei periodischen Randbedingungen gilt: $\tilde{\phi}_k = \tilde{\phi}_{k-L}$.
Analog, aber einfacher ergibt sich:

$$\sum_x \phi_x^2 = L \sum_k \tilde{\phi}_k \bar{\tilde{\phi}}_k \ .$$

Insgesamt lautet somit (A.10) im Impulsraum:

$$L \sum_k \tilde{\phi}_k \bar{\tilde{\phi}}_k \left\{ 2\kappa \cos\left(\frac{2\pi}{L} k\right) - 1 \right\} \ .$$

Man sieht, daß A tatsächlich diagonalisiert wurde, die Eigenwerte lauten:

$$L \left\{ 2 - 4\kappa \cos\left(\frac{2\pi}{L} k\right) \right\} \ .$$

Eine etwas kompliziertere Rechnung [5] ergibt für d Dimensionen die Eigenwerte:

$$L^d \left\{ 2 - 4\kappa \sum_\mu \cos\left(\frac{2\pi}{L} k\hat{\mu}\right) \right\} \ . \tag{A.14}$$

Die Zustandssumme ergibt sich damit problemlos aus (A.8):

$$\mathcal{Z} = \prod_k \left[L^d \left\{ 2 - 4\kappa \sum_\mu \cos\left(\frac{2\pi}{L} k\hat{\mu}\right) \right\} \right]^{-1/2} \ . \tag{A.15}$$

[5] Man beachte, daß in (A.11) und (A.12) nun über d Dimensionen summiert wird, d.h es gibt Ld Summanden und der Vorfaktor in (A.11) lautet deshalb $\frac{1}{L^d}$ statt $\frac{1}{L}$.

Anhang B

Programmtests für das einkomponentige ϕ^4-Modell

B.1 Hochtemperaturentwicklungen

Für den Vergleich mit den Monte-Carlo-Daten interessiert man sich für folgende Größen:

$$\begin{aligned}\chi_2 &= \sum_x \langle \phi_x \phi_0 \rangle \ , \\ \mu_2 &= \sum_x x^2 \langle \phi_x \phi_0 \rangle \ .\end{aligned}$$

In [45] wurden diese Größen bis zur 14.Ordnung in β berechnet. Die Daten wurden mir von Peter Weisz zur Verfügung gestellt.
χ_2 entspricht der magnetischen Suszeptibilität χ (6.6). χ wurde per Simulation bestimmt, es ist also ein direkter Vergleich möglich. μ_2 hingegen wurde nicht per Simulation bestimmt, ist aber dennoch hilfreich, denn es gilt:

$$\begin{aligned}F &= (1/V)\langle |\sum_x \exp\left(i\frac{2\pi}{L}x_1\right)\phi_x|^2\rangle \\ &= (1/V)\sum_x\sum_y \exp\left(i\frac{2\pi}{L}(x_1-y_1)\right)\langle\phi_x\phi_y\rangle \\ &= \sum_x \exp\left(i\frac{2\pi}{L}x_1\right)\langle\phi_x\phi_0\rangle \\ &= \sum_x \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_1\right)\langle\phi_x\phi_0\rangle \\ &= \sum_x \left(1+\frac{2\pi^2}{L^2}x_1^2+\mathcal{O}(x_1^4)\right)\langle\phi_x\phi_0\rangle \\ &= \left(\sum_x\langle\phi_x\phi_0\rangle - \frac{2\pi^2}{L^2}\sum_x x_1^2\langle\phi_x\phi_0\rangle\right)+\mathcal{O}(x_1^4)\end{aligned}$$

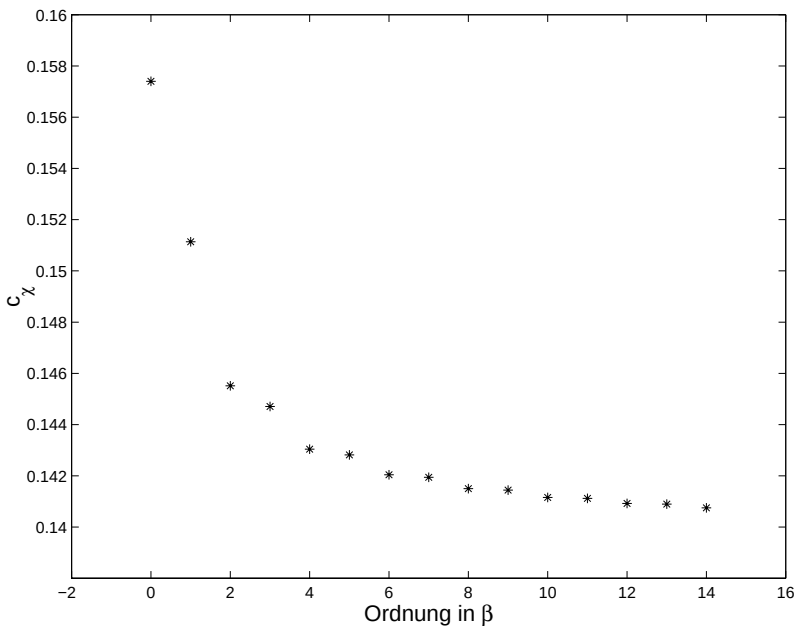

Abbildung B.1: Schätzung der Konstanten c_χ in (B.3). Details siehe Text.

$$= \left(\chi_2 - \frac{2\pi^2}{dL^2}\mu_2\right) + \mathcal{O}(x_1^4) \ , \tag{B.1}$$

mit F gemäß (6.4). Hierbei wurde bei der letzten Umformung benutzt, daß die d Raumrichtungen auf dem kubischen Gitter gleichberechtigt sind, und somit gilt:

$$\mu_2 = d \sum_x x_1^2 \langle \phi_x \phi_0 \rangle \ .$$

Man erhält:

$$F \approx \left(\chi_2 - \frac{2\pi^2}{dL^2}\mu_2\right) \ . \tag{B.2}$$

Dieser Zusammenhang ermöglicht eine Gegenüberstellung von F_{simu} und den Werten für χ_2 und μ_2, die sich aus der HT-Entwicklung ergeben. Letztere seien im folgenden als χ_{HT} bzw. als μ_{HT} bezeichnet.
Man möchte nun den Vergleichstest für einen möglichst großen Wertebereich von β durchführen. Daher ist es wichtig, den Fehler, der durch das Abschneiden der Taylorreihe nach der 14.-ten Ordnung entsteht, abzuschätzen. Das ist in der Tat möglich: Für die magnetische Suszeptibilität gilt in der Umgebung des Phasenübergangs näherungsweise folgendes Skalengesetz:

$$\chi(\beta) = c_\chi(\beta - \beta_c)^{-\gamma} \ . \tag{B.3}$$

In ähnlicher Weise verhält sich die Korrelationslänge:

$$\xi(\beta) = c_\xi(\beta - \beta_c)^{-\nu} \ . \tag{B.4}$$

β	L	χ_{HT}	χ_{verb}	χ
0.10	4	0.767858	0.767858	0.7679(4)
	6			0.7675(5)
	12			0.7677(6)
	16			0.7689(6)
0.15	5	0.974593	0.974595	0.9742(5)
0.20	6	1.314118	1.314294	1.3142(8)
	8			1.3143(3)
0.25	7	1.957180	1.964278	1.9657(17)
	12			1.96337(53)
	16			1.9628(17)
0.30	8	3.442770	3.629179	3.6264(36)

Tabelle B.1: Vergleich von χ_{HT} und χ_{verb} mit χ aus (6.6).

Diese ist mit χ_2 und μ_2 verknüpft [1] [45]:

$$\xi = \sqrt{\frac{\mu_2}{2d\chi_2}} \ . \tag{B.5}$$

Aus (B.3) bis (B.5) folgt somit ein Skalengesetz für μ_2:

$$\mu_2(\beta) = c_\mu(\beta - \beta_c)^{-\gamma-\nu} \ . \tag{B.6}$$

Es kann nun folgendermaßen vorgegangen werden:
Man entwickelt (B.3) und (B.6) jeweils bis zur 14.-ten Ordnung in β (denn bis zu dieser Ordnung sind auch die HT-Entwicklungen bekannt) und subtrahiert die Ergebnisse von den Werten von χ und μ, die sich aus (B.3) und (B.6) ergeben.
Damit hat man nun einen Schätzwert für den Anteil der in den HT-Entwicklungen nicht berücksichtigten Ordnungen, den man als 'Fehler' von χ_{HT} bzw. μ_{HT} auffassen kann. Addiert man diesen zu χ_{HT} bzw. μ_{HT} hinzu, so lassen sich die Werte auch bei größeren β noch mit den Werten aus der Simulation vergleichen. Im folgenden seien die so erhaltenen Werte als χ_{verb} und μ_{verb} bezeichnet.
Die in den Skalengesetzen auftretenden Konstanten c sind a priori nicht bekannt. Für das eben beschriebene Verfahren sind sie jedoch vonnöten. Schätzwerte für diese Konstanten lassen sich wie folgt erhalten:
Man bestimmt für jede verfügbare Ordnung in β die Koeffizienten der HT-Entwicklung und die Koeffizienten der Taylorentwicklung der Skalengesetze, wo-

[1] Die Korrelationslänge ist das Inverse der dort behandelten Größe m_R ('renormierte Masse').

β	L	F_{HT}	F_{verb}	F
0.10	4	0.622280	0.622280	0.6654(1)
	6	0.703157	0.703157	0.7134(2)
	12	0.751683	0.751683	0.7523(2)
	16	0.758759	0.758760	0.7587(2)
0.15	5	0.749248	0.749237	0.8107(2)
0.20	6	0.934827	0.934178	1.0398(3)
	8	1.100766	1.100479	1.13845(10)
0.25	7	1.200800	1.181882	1.4307(5)
	12	1.699800	1.690948	1.73485(19)
	16	1.812404	1.814522	1.8260(6)
0.30	8	1.572565	1.155511	2.2049(8)

Tabelle B.2: Vergleich von F_{HT} (B.2) und F_{verb} mit F aus (6.4).

bei man bei letzteren c außer Acht läßt [2]. Nun dividiert man getrennt für jede Ordnung die HT-Koeffizienten durch die Koeffizienten der Taylorentwicklung und erhält damit jeweils einen Schätzwert für c, der sich mit steigender Ordnung stabilisieren sollte (da mit wachsender Ordnung in β der Einfluß der Korrekturterme zu den Skalengesetzen abnimmt). In Abbildung B.1 ist dies exemplarisch für χ (bei $\lambda = 1.0$) dargestellt.
Die Genauigkeit der vorgestellten Methode zur Bestimmung der verbesserten Größen ist für Testzwecke ausreichend.
Die Testläufe wurden bei $\lambda = 1.1$ für verschiedene Werte von β durchgeführt. Die Ergebnisse sind in den Tabellen B.1 bis B.3 aufgeführt.
Die Monte-Carlo-Ergebnisse zeigen eine schöne Übereinstimmung mit den 'verbesserten' Werten, insbesondere für große β. Die reinen HT-Werte zeigen für große β deutliche Abweichungen. Auffällig ist die starke Diskrepanz zwischen den errechneten und dem simulierten Wert für F bei $\beta = 0.3$. Dies liegt an den vernachlässigten Termen höherer Ordnung in (B.1). Diese werden jedoch mit wachsender Gittergröße immer unbedeutender (der führende nicht berücksichtigte Term ist $\propto L^{-4}$). Dieser Effekt ist bei $\beta = 0.25$ sichtbar: Mit steigendem L nähern sich die Werte aus den Entwicklungen immer mehr den Monte-Carlo-Werten an.
Die Testläufe sind also insgesamt zufriedenstellend verlaufen.

[2] Zur Bestimmung der Koeffizienten der Taylorreihe benötigt man Schätzwerte der jeweiligen kritischen Exponenten. Diese wurden [56] entnommen. Zudem muß man sich einen Schätzwert für β_c verschaffen, dafür ist die cumulant-crossing-Methode am geeignetsten.

β	L	ξ_{HT}	ξ_{verb}	ξ_{2nd}
0.10	4	0.277196	0.277196	0.2775(5)
	6			0.2756(13)
	12			0.2762(58)
	16			0.2969(93)
0.15	5	0.382651	0.382661	0.3821(6)
0.20	6	0.513027	0.513551	0.5137(9)
	8			0.5134(4)
0.25	7	0.692584	0.703121	0.7047(12)
	12			0.7011(9)
	16			0.7014(46)
0.30	8	0.938428	1.051179	1.0491(14)

Tabelle B.3: Vergleich von ξ_{HT} (B.5) und ξ_{verb} mit ξ_{2nd} aus (6.7).

B.2 Gaußsches Modell

Zunächst sollen aus der exakten Lösung des einkomponentigen Modells (Anhang A) einige Größen berechnet werden.
Zur Berechnung der Korrelationsfunktion (4.22) definiert man folgenden Ausdruck:

$$Z_0 := \frac{1}{\mathcal{Z}} \int D\phi \;\; \exp \sum_x \left(2\kappa \sum_\mu \phi_x \phi_{x+\hat{\mu}} - \phi_x^2 + b_x \phi_x \right) \; .$$

Aus (A.4) und (A.8) folgt:

$$Z_0 = \exp\left(\frac{1}{2} b^T A^{-1} b \right) \; .$$

Es gilt nun:

$$\begin{aligned}
\langle \phi_x \phi_y \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int D\phi \;\; \phi_x \phi_y \; \exp \sum_x \left(2\kappa \sum_\mu \phi_x \phi_{x+\hat{\mu}} - \phi_x^2 \right) \\
&= \left[\frac{\partial}{\partial b_x} \frac{\partial}{\partial b_y} Z_0 \right]_{j=0} \\
&= \left[\frac{\partial}{\partial b_x} \frac{\partial}{\partial b_y} \exp\left(\frac{1}{2} b^T A^{-1} b \right) \right]_{j=0} \\
&= A^{-1}_{xy} \; .
\end{aligned}$$

Größe	exakt	MC
$\langle\phi_x\rangle$	0	0.000001(3)
$\langle\phi_x^2\rangle$	0.507797	0.507798(10)
$\langle\phi_x^4\rangle$	0.773573	0.773579(38)
$\langle\phi_x\phi_{x+\hat{\mu}}\rangle$	0.077967	0.077981(10)
χ	0.714286	0.71422(22)
F	0.685599	0.68561(9)
ξ	0.267261	0.2669(11)

Tabelle B.4: Vergleich der exakten Werte verschiedener Größen mit MC-Werten bei $\beta = 2\kappa = 0.1$ und $L = 8$. ξ wurde hierbei mit ξ_{2nd} aus (6.7) verglichen. Angegeben sind die statistischen Fehler.

Man erkennt:

$$\langle\phi_x\rangle = \left[\frac{\partial}{\partial b_x} Z_0\right]_{j=0} = 0 \ .$$

Die Korrelationsfunktion ist also gegeben durch:

$$G(x-y) = A_{xy}^{-1} \ .$$

Man erhält nun $G(x-y)$, indem man $\tilde{G}(k)$ durch Invertierung des entsprechenden Eigenwertes von A im Impulsraum bestimmt und in den Ortsraum zurücktransformiert:

$$\tilde{G}(k) = \left\{ L^d \left(2 - 4\kappa \sum_\mu \cos\left(\frac{2\pi}{L} k\hat{\mu}\right)\right)\right\}^{-1} \longrightarrow G(x-y) = \sum_k \exp\left(i\frac{2\pi}{L}(x-y)\right)\tilde{G}(k) \ .$$

Für kleine d ist dies noch 'von Hand' durchführbar, für größere benötigt man den Rechner.
Für die magnetische Suszeptibilität gilt:

$$\begin{aligned}
\chi &= \sum_x \langle\phi_x\phi_0\rangle \\
&= \sum_x G(x) \\
&= \sum_x \sum_k \exp\left(i\frac{2\pi}{L}kx\right)\tilde{G}(k) \\
&= \sum_k \tilde{G}(k) \sum_x \exp\left(i\frac{2\pi}{L}kx\right) \\
&= L^d \tilde{G}(0) \\
&= \frac{L^d}{L^d\left(2 - 4\kappa\sum_\mu \cos(0)\right)} = \frac{1}{2-4\kappa d} \ .
\end{aligned}$$

Größe	$L=8$		$L=16$	
	exakt	MC	exakt	MC
$\langle\phi_x\rangle$	0	0.000006(8)	0	−0.000001(2)
$\langle\phi_x^2\rangle$	0.535735	0.535770(15)	0.535735	0.535733(4)
$\langle\phi_x^4\rangle$	0.861037	0.861192(56)	0.861037	0.861029(14)
$\langle\phi_x\phi_{x+\hat{\mu}}\rangle$	0.178677	0.178690(15)	0.178676	0.178675(4)
χ	1.25	1.24997(42)	1.25	1.25009(31)
F	1.090326	1.09056(16)	1.204169	1.20422(12)
ξ	0.5	0.4995(7)	0.5	0.50(18)

Tabelle B.5: Vergleich der exakten Werte verschiedener Größen mit MC-Werten bei $\beta = 2\kappa = 0.2$. ξ wurde hierbei mit ξ_{2nd} aus (6.7) verglichen. Angegeben sind die statistischen Fehler.

Hier wurde (A.13) (für beliebige d) benutzt. Weiter gilt:

$$\langle\phi_x^2\rangle = G(0) = \sum_k \tilde{G}(k) = \frac{1}{L^d}\sum_k \frac{1}{2-4\kappa\sum_\mu \cos(\frac{2\pi}{L}k\hat{\mu})} \ .$$

Für das Gaußsche Modell gilt:

$$\langle\phi_x^4\rangle = 3\left(\langle\phi_x^2\rangle\right)^2 \ .$$

Diesen Zusammenhang erhält man durch:

$$\begin{aligned}\langle\phi_1\phi_2\phi_3\phi_4\rangle &= \langle\phi_1\phi_2\rangle\langle\phi_3\phi_4\rangle + \langle\phi_1\phi_3\rangle\langle\phi_2\phi_4\rangle \\ &\quad +\langle\phi_1\phi_4\rangle\langle\phi_2\phi_3\rangle \\ &= 3\left(\langle\phi_x^2\rangle\right)^2 \ .\end{aligned}$$

Zur 'inneren Energie' (6.11) gelangt man über:

$$\begin{aligned}\langle\phi_x\phi_{x+\hat{\mu}}\rangle &= G(-\hat{\mu}) \\ &= \frac{1}{L^d}\sum_k \frac{\exp\left(i\frac{2\pi}{L}k\hat{\mu}\right)}{2-4\kappa\sum_\mu \cos\left(\frac{2\pi}{L}k\hat{\mu}\right)} \\ &= \frac{1}{L^d}\sum_k \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{L}k\hat{\mu}\right)}{2-4\kappa\sum_\mu \cos\left(\frac{2\pi}{L}k\hat{\mu}\right)} \ .\end{aligned}$$

Für F (6.4) gilt:

$$\begin{aligned}F &= \tilde{G}\left((1,0,...,0)\right) \\ &= \frac{1}{L^d}\frac{1}{2-4\kappa\left(\cos(\frac{2\pi}{L})+d-1\right)} \ .\end{aligned}$$

Die Korrelationslänge läßt sich durch Berechnung der Korrelationsfunktion im Kontinuum gewinnen (siehe z.B. [17]). Es gilt:

$$\xi = \left(\frac{1}{\kappa} - 2d\right)^{-1/2}$$

Alle diese Größen wurden für $d = 3$ berechnet und mit den Monte-Carlo-Daten verglichen. Exemplarisch sind drei Testläufe in Tabelle B.4 und Tabelle B.5 angegeben. Der Test ist zufriedenstellend verlaufen.

B.3 Ising-Modell

L	Größe	Ising exakt	Methode 1	Methode 2
3	m^2	0.422992	0.42181(4)	0.423016(24)
	Q	0.668427	0.66759(4)	0.668451(24)
	S	1.434418	1.43106(10)	1.434480(64)
	c	0.785413	0.78411(9)	0.785417(52)
4	m^2	0.331204	0.32977(4)	0.33124(4)
	Q	0.659779	0.65858(5)	0.65982(5)
	S	1.293223	1.28938(10)	1.29328(9)
	c	0.977575	0.97460(16)	0.97747(16)

Tabelle B.6: Vergleich exakt berechneter Größen mit MC-Daten für das 3d-Ising-Modell bei $\beta = 0.221653$. Details zu den Methoden siehe Text.

In [46] wurden verschiedene Größen für das 3d-Ising-Modell exakt berechnet. Die Größen sind dort wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} m^2 &:= \langle m^2 \rangle \\ Q &:= \frac{\langle m^2 \rangle^2}{\langle m^4 \rangle} \\ S &:= \frac{1}{V} \langle \sum_{<xy>} \phi_x \phi_y \rangle \\ c &:= \beta^2 \left(\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2 \right) \quad , \\ \text{mit} \qquad m &= \frac{1}{V} \sum_x \phi_x \ . \end{aligned}$$

Diese Größen wurden nun simuliert und mit den exakten Resultaten verglichen Die Ergebnisse sind in Tabelle B.6 zusammengestellt.

Dabei bedeutet Methode 1: Für die Updates wurden die Algorithmen Metropolis und Single-Cluster verwendet. Es wurde ad hoc $\lambda = 1000$ gewählt. Hier sind ungenaue Ergebnisse zu erwarten, da die Feldvariable nicht genau den Wert 1 annnehmen wird. Bei Methode 2 wurde nur der Single-Cluster-Algorithmus benutzt und $\lambda = 0$ gesetzt. Der Single-Cluster-Algorithmus ist für das Ising-Modell ergodisch.
Der Test ist zufriedenstellend verlaufen.

Anhang C

Testergebnisse für das zweikomponentige ϕ^4-Modell

C.1 Hochtemperaturentwicklungen

Zum Zeitpunkt der Ausführung dieses Tests war die kritische Linie $\beta_c(\lambda)$ des zweikomponentigen Modells für endliche λ vollkommen unbekannt. Die Testläufe wurden deshalb ad hoc bei $\lambda = 1.0$ durchgeführt. Ein Schätzwert für $\beta_c(1.0)$ wurde mit Hilfe der cumulant crossing-Methode erhalten. Die Vorgehensweise des Tests ist die gleiche wie beim einkomponentigen Modell (Anhang B.1). Die zur Bestimmung der 'verbesserten' Größen notwendigen Schätzwerte der kritischen Exponenten der 3d-XY-Universalitätsklasse wurden erneut [56] entnommen.
In den Tabellen C.1 bis C.3 sind die Ergebnisse aufgeführt.

β	L	χ_{HT}	χ_{verb}	χ
0.10	8	1.02656	1.02656	1.02570(54)
0.20	6	1.43948	1.43948	1.44059(57)
0.35	6	3.22092	3.24131	3.2394(13)
	16			3.2380(35)
0.40	32	4.958	5.185	5.205(14)

Tabelle C.1: Vergleich von χ_{HT} und χ_{verb} mit χ aus (6.6) für das zweikomponentige Modell.

β	L	F_{HT}	F_{verb}	F
0.10	8	0.99405	0.99405	0.99650(21)
0.20	6	1.21200	1.21199	1.25825(20)
0.35	6	1.29910	1.21380	2.06366(33)
	16	2.95067	2.95619	2.9827(13)
0.40	32	4.7951	4.9754	4.9827(55)

Tabelle C.2: Vergleich von F_{HT} (B.2) und F_{verb} mit F aus (6.4) für das zweikomponentige Modell.

β	L	ξ_{HT}	ξ_{verb}	ξ
0.10	8	0.2266	0.2266	0.2237(22)
0.20	6	0.37961	0.37962	0.38068(64)
0.35	6	0.73763	0.75525	0.75481(42)
	16			0.7499(56)
0.40	32	0.924	1.024	1.079(37)

Tabelle C.3: Vergleich von ξ_{HT} (B.5) und ξ_{verb} mit ξ_{2nd} aus (6.7) für das zweikomponentige Modell.

C.2 Gaußsches Modell

Beim zweikomponentigen Gaußschen Modell ist die Feldvariable ein zweidimensionaler Vektor (der Index x sei im folgenden der Einfachheit halber unterdrückt):

$$\vec{\phi} = (\phi_1, \phi_2) \ .$$

Läßt sich nun eine Observable $A(\vec{\phi})$ durch die Komponenten von $\vec{\phi}$ ausdrücken, so daß keine Mischterme der Komponenten auftreten, gilt also:

$$A(\vec{\phi}) = f(\phi_1) + g(\phi_2) \ ,$$

so kann man ihren Erwartungswert mit Hilfe des einkomponentigen Modells bestimmen, da bei der Berechnung des Erwartungswertes das Integral zerfällt und die beiden Komponenten von $\vec{\phi}$ als gleichberechtigt anzusehen sind [1]:

$$\langle A(\vec{\phi})\rangle = \langle f(\phi_1)\rangle + \langle g(\phi_2)\rangle = \langle f(\phi)\rangle + \langle g(\phi)\rangle \ ,$$

wobei ϕ die Feldvariable des einkomponentigen Modells ist.

Größe	exakt	MC
$\langle\vec{\phi}^2(x)\rangle$	1.015594	1.015552(24)
$\langle\vec{\phi}^4(x)\rangle$	2.06286	2.06260(12)
$\langle E/V\rangle$	0.155934	0.155895(25)
$\langle E^2/V^2\rangle$	0.027606	0.027593(8)
$\langle\vec{m}^2\rangle$	0.002790	0.002789(1)
$\langle\vec{m}^4\rangle$	0.00001557	0.00001556(2)
χ	1.42857	1.42819(69)
C	1.68462	1.68417(76)
F	1.37120	1.37078(27)
R_{min}	0.959949	0.95980(50)
$\partial R_{min}/\partial\beta$	-0.551	$-0.539(10)$
$\partial^2 R_{min}/\partial\beta^2$	-4.09	$-3.66(38)$
ξ	0.2673	0.2674(17)
U	2	2.00006(69)
$\partial U/\partial\beta$	0	0.007(18)
$\partial^2 U/\partial\beta^2$	0	$-0.36(79)$

Tabelle C.4: Vergleich der exakten Werte verschiedener Größen mit Monte-Carlo-Werten. Simuliert wurde bei $\beta = 2\kappa = 0.1$ und $L = 8$.

Darüber hinaus fehlt beim Gaußschen Modell in der Wirkung S der $\vec{\phi}^4$-Term, d.h. S enthält nur quadratische Terme in $\vec{\phi}$ und somit läßt sich die Wirkung aufspalten:

$$S = S_1 + S_2 \ .$$

Die Zustandssumme faktorisiert:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_1 \mathcal{Z}_2 \ .$$

Das hat nun zur Folge, daß sogar Erwartungswerte von Observablen, die von Mischtermen abhängen, in einfacher Weise auf die entsprechenden Erwartungswerte des einkomponentigen Modells zurückgeführt werden können:
Sei $A(\vec{\phi})$ eine Observable mit $A(\vec{\phi}) = f(\phi_1)g(\phi_2)$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}\langle A(\vec{\phi})\rangle &= \frac{\int \mathcal{D}\vec{\phi} e^{-S} A(\vec{\phi})}{\mathcal{Z}} \\ &= \frac{\int \mathcal{D}\phi_1 \mathcal{D}\phi_2 e^{-S_1} e^{-S_2} f(\phi_1) g(\phi_2)}{\mathcal{Z}_1 \mathcal{Z}_2}\end{aligned}$$

[1] Für viele Observable gilt sogar: $A(\vec{\phi}) = A(\phi_1) + A(\phi_2)$. Dann ist einfach $\langle A(\vec{\phi})\rangle = 2\langle A(\phi)\rangle$.

Größe	exakter Wert	MC-Wert
$\langle\vec{\phi}^2(x)\rangle$	1.071470	1.071485(13)
$\langle\vec{\phi}^4(x)\rangle$	2.296098	2.296200(63)
$\langle E/V\rangle$	0.357352	0.357373(17)
$\langle E^2/V^2\rangle$	0.128317	0.128332(12)
$\langle\vec{m}^2\rangle$	0.00061035	0.00060986(49)
$\langle\vec{m}^4\rangle$	0.000000745	0.000000744(1)
χ	2.5	2.4980(20)
C	2.5257	2.5247(17)
F	2.40834	2.40817(75)
R_{min}	0.96334	0.96404(82)
$\partial R_{min}/\partial\beta$	-0.442	$-0.406(55)$
$\partial^2 R_{min}/\partial\beta^2$	-6.2	$-11.0(6.3)$
ξ	0.5	0.4950(59)
U	2	2.0013(11)
$\partial U/\partial\beta$	0	$-0.107(88)$
$\partial^2 U/\partial\beta^2$	0	$-20(11)$

Tabelle C.5: Vergleich der exakten Werte verschiedener Größen mit Monte-Carlo-Werten. Simuliert wurde bei $\beta = 2\kappa = 0.2$ und $L = 16$.

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\int \mathcal{D}\phi_1 e^{-S_1} f(\phi_1) \int \mathcal{D}\phi_2 e^{-S_2} g(\phi_2)}{\mathcal{Z}_1 \mathcal{Z}_2} \\
&= \langle f(\phi_1)\rangle\langle g(\phi_2)\rangle \ .
\end{aligned}
$$

Man erhält :

$$< A(\vec{\phi}) >= \langle f(\phi_1) g(\phi_2)\rangle = \langle f(\phi)\rangle\langle g(\phi)\rangle \ .$$

Alle für den Test interessanten Größen lassen sich nun aus den Ergebnissen für das einkomponentige Modell berechnen. Als Beispiel sei dies für $\vec{\phi}^4$ vorgeführt :

$$
\begin{aligned}
\langle\vec{\phi}^4\rangle &= \langle(\vec{\phi}^2)^2\rangle \\
&= \langle({\phi_1}^2 + {\phi_2}^2)^2\rangle \\
&= \langle {\phi_1}^4 + 2{\phi_1}^2{\phi_2}^2 + {\phi_1}^4\rangle \\
&= 2\langle\phi^4\rangle + 2\langle\phi^2\rangle^2 \\
&= 8\langle\phi^2\rangle^2 \ .
\end{aligned}
$$

In der letzten Umformung wurde die „Wick-Regel“ (siehe z.B. [61]) benutzt.
Noch einige Bemerkungen: Die Berechnung von $\langle E^2/V^2\rangle$ gestaltet sich als die kompliziertesten. Zwar läßt sich der Wert für das zweikomponentige Modell leicht

aus dem für das einkomponentige bestimmen, dieser jedoch ist schwierig zu berechnen: Die Wick-Regel ist zwar anwendbar, führt aber auf Terme, die sich nur zum Teil durch bereits bekannte Größen darstellen lassen. Um diese Terme nicht alle fourier-transformieren zu müssen, wurde $\langle E^2/V^2 \rangle$ für das einkomponentige Modell wie folgt bestimmt :
$\langle E/V \rangle$ läßt sich mit Hilfe des Rechners leicht berechnen. Man bestimmt nun numerisch die Ableitung von $\langle E/V \rangle$ nach β; das liefert die spezifische Wärme

$$C = \frac{1}{V}\left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2\right) \ , \tag{C.1}$$

aus der sich dann $\langle E^2/V^2 \rangle$ ergibt. Die dabei auftretende Genauigkeit ist für die Testläufe ausreichend.
Für das einkomponentige Modell ist die Binder-Kumulante U unabhängig von L exakt 3, wie sich mit Hilfe der Wick-Regel zeigen läßt. Der Wert für das zweikomponentige Modell läßt sich leicht berechnen:

$$\begin{aligned}
U_{N=2} &= \frac{\langle \vec{m}^4 \rangle}{\langle \vec{m}^2 \rangle^2} \\
&= \frac{\langle (m_1^2 + m_2^2)^2 \rangle}{\langle m_1^2 + m_2^2 \rangle^2} \\
&= \frac{\langle m_1^4 + 2m_1^2 m_2^2 + m_2^4 \rangle}{(\langle m_1^2 \rangle + \langle m_2^2 \rangle)^2} \\
&= \frac{2\langle m^4 \rangle + 2\langle m^2 \rangle^2}{4\langle m^2 \rangle^2} \\
&= \tfrac{1}{2}\, U_{N=1} + \tfrac{1}{2} \\
&= 2 \ .
\end{aligned}$$

Da das Gaußsche Modell nur für $\beta \leq \beta_c$ definiert ist, ist $U(\beta)$ konstant. Somit müssen die Ableitungen nach β verschwinden.
Die Ergebnisse für die erwähnten und einigen weiteren Größen sind in Tabelle C.4 und Tabelle C.5 zusammengestellt. Der Test ist zufriedenstellend verlaufen.

C.3 XY-Modell

Ebenso wie bei den Tests des einkomponentigen Modells wurde auf zwei Arten vorgegangen: Zum einen wurden die Testläufe bei $\lambda = 0$ nur mit Single-Cluster-Updates durchgeführt (dies ist für das XY-Modell ebebfalls ergodisch, man startet z.B für alle x mit $\vec{\phi}_x = (1, 0)$.
Zum anderen mit einem sehr hohen Wert für λ, wobei die Schrittweite des Metropolis-Algorithmus zu tunen war, um eine angemessene Akzeptanzwahrscheinlichkeit zu erhalten. Hierbei wird man unzuverlässigere Werte erhalten, da der Betrag der Feldvariablen bei endlichem λ nicht genau 1 wird.

Größe	L=4	L=8	L=64
$(1/3V)E$	0.40440(44) 0.404586(14) 0.404563(33)	0.35585(20) 0.356017(11) 0.355995(27)	0.33063(2) 0.330650(7)
C	6.561(27) 6.5642(9) 6.5675(19)	8.890(39) 8.7981(24) 8.809(15)	14.35(11) 14.220(21)
χ	19.095(34) 19.1100(11) 19.1089(25)	77.80(15) 77.9405(86) 77.920(18)	4732(12) 4759(5)
ξ	2.3104(37) 2.31216(13) 2.31219(27)	4.6852(65) 4.6886(4) 4.68767(83)	37.793(77) 37.911(23)

Tabelle C.6: Testergebnisse für das XY-Modell. Die Tabelle ist für jede Größe wie folgt zu lesen: Erste Zeile: Ergebnisse aus [47]. Zweite Zeile: Testläufe mit $\lambda = 0$. Dritte Zeile: Testläufe mit $\lambda = 10^6$.

Literaturverzeichnis

[1] K.G. Wilson. *Die Renormierungsgruppe.* (Spektrum der Wissenschaft, Oktober 1979).

[2] J. Cardy. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics.* (Cambrigde University Press 1996).

[3] R.J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics.* (Academic Press, 1982).

[4] W. Nolting. *Grundkurs: Theoretische Physik. Band 6: Statistische Physik.* (Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1994).

[5] C. Domb und M.S. Green (Hrsg.). *Phase Transitions and Critical Phenomena.* Vol. 3. (Academic Press, London, 1974).

[6] H. Römer, T. Falk. *Statistische Mechanik.* (VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 1994).

[7] M. Suzuki, J.Phys.Jpn. 55 (1986) 4205.

[8] C. Domb und M.S. Green (Hrsg.). *Phase Transitions and Critical Phenomena.* Vol. 6. (Academic Press, London, 1976).

[9] J. Zinn-Justin. *Vector Models in the large N limit: A few applications.* (CEA-Saclay, Service de Physique Théorique, F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex, FRANCE, 1998, hep-th/9810198 23 Oct 1998).

[10] M. J. Buckingham in *Near Zero.* J.D. Fairbank, B.S. Deaver Jr., C.W.F. Everitt und P.F. Michelson (Hrsg.). (Freeman and Co., New York, 1988).

[11] J.A. Lipa, D.R. Swanson, J. Nissen, T.C.P. Chui und U.E. Israelson, Phys.Rev.Lett. 76 (1996) 944.

[12] L.S. Goldner, N. Mulders und G. Ahlers, J. Low Temp.Phys. 93 (1993) 131.

[13] D.R. Swanson, T.C.P. Chui, und J.A. Lipa, Phys.Rev. B 46 (1992) 9043.

[14] T. Fliessbach. *Statistische Physik.* (BI Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1993).

[15] E. Ising, Z.Phys. 31 (1925) 253.

[16] L. Onsager, Phys.Rev. 65 (1944) 117.

[17] U. Wolff, B. Bunk. *Computational Physics 2.* (Vorlesungsskript, Humboldt Universität Berlin).

[18] C. Itzykson, J.M. Drouffe. *Statistical field theory.* Vol. 2. (Cambridge University Press, 1989).

[19] K. Binder, D.W. Heermann. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction.* (Springer-Verlag, 1992).

[20] A.D. Sokal. *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms.* (Cours de Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, Lausanne, 1989).

[21] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller und E.Teller, J.Chem.Phys. 21, (1953) 1087.

[22] N. Madras und A.D. Sokal, J.Stat.Phys. 50, (1988) 109.

[23] B. Efron. *The Jackknife, the Bootstrap and other Resampling Plans.* (SIAM, Philadelphia PA, 1982).

[24] S. Gottlieb, Nucl.Phys. B 263, (1986) 704.

[25] R.H. Swendsen und J.S. Wang, Phys.Rev.Lett. 58 (1987) 8.

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

[27] C.M. Fortuin und P.W. Kasteleyn, Physica 57 (1972) 536.

[28] J. Hoshden und R. Kopelman, Phys.Rev. B 14 (1976) 3438.

[29] U. Wolff, Phys.Lett B 228 (1989) 279.

[30] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher und M.E.J. Newman. *The Theory of Critical Phenomena. An Introduction to the Renormalization Group.* (Oxford University Press, 1993).

[31] L.P. Kadanoff, Physics 2 (1966) 263.

[32] K.G. Wilson und J. Kogut, Phys.Rep. C 12 (1974) 75.

[33] K.G. Wilson und M.E. Fisher, Phys.Rev.Lett. 28 (1972) 240.

[34] S.K. Ma, Phys.Rev.Lett. 37 (1976) 471.

[35] V. Privman. (Hrsg.). *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems.* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, Singapur, 1990).

[36] P. Hasenfratz und F. Niedermayer, Nucl.Phys. B 414 (1994) 785.

[37] N. Goldenfeld. *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group.* (Addison-Wesley Publishing Company, 1992).

[38] V. Privman, P.C. Hohenberg und A. Aharony in *Phase Transitions and Critical Phenomena.* Vol. 14. C. Domb und J.L. Lebowitz (Hrsg.). (Academic Press Limited, London, 1991).

[39] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, V.Martín-Mayor und A.Muñoz Sudupe, Phys.Lett. B 441 (1998) 330.

[40] M. Hasenbusch, hep-lat/9902026. Wird in J.Phys. A erscheinen.

[41] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, V.Martín-Mayor und A.Muñoz Sudupe, Phys.Lett. B 378 (1996) 207.

[42] M. Hasenbusch, Physica A 197 (1993) 423.

[43] K. Binder, Z.Phys. B 43 (1981) 119.

[44] F. Cooper, B. Freedman und D. Preston, Nucl.Phys. B 210 (1982) 210.

[45] M. Lüscher und P. Weisz, Nuclear Physics B 300 (1988) 325.

[46] H. W. J. Blöte, E. Luijten und J. R. Heringa, J.Phys. A 28 (1995) 6289.

[47] A.P. Gottlob und M. Hasenbusch, Physica A 201 (1993) 593.

[48] R. C. Brower und P. Tamayo, Phys.Rev.Lett. 62 (1989) 1087.

[49] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling und B.P. Flannery. *Numerical Recipes in C.* (Cambrigde University Press, 1994).

[50] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi und E. Vicari, Phys.Rev. E 57 (1998) 184.

[51] A.M. Ferrenberg und D.P. Landau, Phys.Rev. B 44 (1991) 5081.

[52] M. Hasenbusch, K. Pinn und S. Vinti, Phys.Rev. B 59 (1999) 11471.

[53] W. Janke, Phys.Lett. A 148 (1990) 306.

[54] M. Krech und D.P. Landau, cond-mat/9905295.

[55] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor und A. Muñoz Sudupe, Phys.Lett. B 387 (1996) 125.

[56] R. Guida und J. Zinn-Justin, J.Phys. A 31 (1998) 8103.

[57] P. Butera und M. Comi, Phys.Rev. B 56 (1997) 8212.

[58] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi und E. Vicari, cond-mat/9905395.

[59] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi und E. Vicari, cond-mat/9905078.

[60] Lennart Råde und Bertil Westergren. *Springers mathematische Formeln.* (Springer Verlag, 1997).

[61] M. Le Bellac. *Quantum and Statistical Field Theory.* (Oxford University Press, 1991).

Danksagung

Mein erster Dank gilt Prof. Dr. Ulli Wolff für die Ermöglichung der Ausführung dieser Arbeit und seine Bereitschaft, auftretende Fragen zu beantworten.

Letztere mußte ich jedoch selten in Anspruch nehmen, da ich von Dr. Martin Hasenbusch in hervorragender Weise betreut wurde. Ihm gilt dafür mein ganz besonderer Dank. Zusätzlich sei ihm gedankt für die interessante Themenstellung und für die Überlassung diverser Programme, insbesondere des Simulationsprogramms.

Ich danke Dr. Peter Weisz dafür, daß er mir Daten zur Verfügung gestellt, mit deren Hilfe das Simulationsprogramm getestet werden konnte.

Abschließend möchte ich mich noch bei Dr. Burkhard Bunk, Dipl.Phys. Bernd Gehrmann, Dipl.Phys. Stefan Kurth, Dr. Juri Rolf und Dr. Klaus Scharnhorst für ihre Unterstützung in Fragen der Art: „Wie kann man denn in Latex ... ?“ bedanken.

Erklärung

Hiermit bestätige ich, daß ich die vorliegende Arbeit ohne unerlaubte fremde Hilfe angefertigt habe.

Ich bin mit der Auslage meiner Diplomarbeit in der Bibliothek der Humboldt-Universität zu Berlin einverstanden.

Berlin, den 31.5.1999

. . . . . .
Tibor Török