JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN

Bachelor Thesis

in Physik

Monte-Carlo-Simulationen des Potts-Modells mit Multispin-Coding auf GPUs

Monte Carlo simulations of the Potts model
with multispin coding on GPUs

von

Philipp Steinbrecher

betreut durch

Prof. Dr. Lorenz von Smekal

Institut für Theoretische Physik
Fachbereich 07
Justus-Liebig-Universität Giessen

September 2017

Gutachter

Erster Gutachter:

Prof. Dr. Lorenz von Smekal
Institut für Theoretische Physik
Justus-Liebig-Universität Giessen

Zweiter Gutachter:

Prof. Dr. Christian Fischer
Institut für Theoretische Physik
Justus-Liebig-Universität Giessen

Zusammenfassung

In der nachfolgenden Arbeit geht es um *Monte-Carlo-Simulationen* des *3-Zustands-Potts-Modell* auf Grafikkarten unter der Verwendung von *Multispin-Coding*. Dazu wird ausgehend von einer Code-Grundlage zum *Ising-Modell* ein Programm geschrieben, mittels welchem die kritische Temperatur in zwei und drei Dimensionen bestimmt werden kann, wobei bei ersterem auch direkt eine Überprüfung mit analytischen Lösungen durchgeführt wird. Außerdem zeigt sich, dass der dimensionsbehaftete Unterschied in der Ordnung des Phasenübergangs gut herauszuarbeiten ist. Zudem wird, nachdem eine kleine Einführung in die Grundlage von *Monte-Carlo-Prozessen* und deren Umsetzung gegeben wurde, die Fehleranalyse von solch korrelierten Prozessen und deren Besonderheiten erörtert. Des Weiteren ist das, bedingt durch Charakteristika in der Verteilung des Ordnungsparamters bei T_c, nicht triviale Verhalten der Binderkumulante bei Übergängen erster Ordnung zu beobachten. Abschließend wird das universale Verhalten des Phasenübergangs zweiter Ordnung des zweidimensionalen Modells und daraus resultierende, vorher hergeleitete, *Finite-Size-Scaling*-Gestze untersucht und verifiziert.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Das Potts-Modell **4**
2.1 Ising-Modell 4
2.2 q-Zustands-Potts-Modell 5
2.3 Beschreibung des Modells im Kanonischen Ensemble 7
2.3.1 Die Zustandssumme 7
2.3.2 Observablen 8
2.4 Phasenübergänge 9
2.4.1 Verhalten des Modells bei $T = T_c$ 10
2.4.2 Finite-Size-Scaling und kritische Exponenten 12
2.5 Rolle des Potts-Modell in der QCD 14

3 Grafikkarten-Programmierung **15**
3.1 Schematischer Aufbau und prinzipielle Funktionsweise von GPUs . . . 15
3.2 Speichermodelle 16

4 Implentierung des Algorithmus **17**
4.1 Monte-Carlo-Simulationen des Potts-Modells 17
4.1.1 Grundlagen 17
4.1.2 Metropolis-Algorithmus 20
4.2 Multispin-Coding 21
4.3 Implementierung 22
4.3.1 Gitteraufbau 22
4.3.2 Update der Spin-Konfiguration 24
4.3.3 Berechnung der (Gesamt-) Magnetisierung 25

5 Resultate **26**
5.1 Qualitative Analyse und Gegenüberstellung des 3-Zustands-Potts-Modells in zwei und drei Dimensionen 26
5.1.1 Das 2D-Modell 26
5.1.2 Das 3D-Modell 30
5.1.3 Vergleich 31
5.2 Quantitative Analyse des 3-Zustands-Potts-Modells in zwei und drei Dimensionen 35

5.2.1 Fehleranalyse 35
5.2.2 Das 2D-Modell 38
5.2.3 Das 3D-Modell 43

6 Fazit und Ausblick **48**

A **49**
A.1 Transformation der Energiefunktion des (q=3)-Vektor-Potts-Modells 49
A.2 Binderkumulante bei komplexen Ordnungsparametern 50
A.3 Plots mit allen Gittergrößen (2D) 51

Literaturverzeichnis **52**

Kapitel 1

Einleitung

Viele, wenn nicht sogar die meisten, Probleme der modernen Physik lassen sich nicht mehr analytisch berechnen, sondern werden heutzutage mit Hilfe von (Groß-) Rechnern gelöst. Denkt man beispielsweise an die Atomphysik, so ist die *Schrödinger-Gleichung* für ein Wasserstoff-Atom mit nur einem Elektron mehr nicht analytisch exakt zu bestimmen und es muss auf effektive Theorien oder numerische, Computer gestützte Verfahren zurückgegriffen werden. Gleiches gilt für die exakte Berechnung eines Himmelskörpers, welcher sich im gemeinsamen Gravitationsfeld von Erde und Sonne befindet. So findet sich noch eine Vielzahl weiterer Probleme aus allen möglichen Bereichen der Physik, auf die das Gleiche zutrifft. Es ist also heutzutage nicht mehr möglich, ausschließlich Physik mit *Papier und Bleistift* zu betreiben, weshalb der Einsatz von modernen Hochleistungscomputern, auf denen effizient programmierte Algorithmen abgearbeitet werden, unabdingbar ist.
Aufgrund dieser Notwendigkeit geht es auch in der hier vorliegenden Thesis um die Erzeugung eines hoch parallelisierten Codes, der mit Hilfe des *Metropolis-Algorithmus* und mittels *Multispin-Coding* das *3-Zustands-Potts-Modell* in zwei und drei Dimensionen simuliert. Das zentrale Phänomen, was dabei untersucht werden soll, ist die Art des Phasenübergangs, welche von der Dimensionalität des betrachteten Systems abhängt. Dabei handelt es sich um die markante Änderung von einigen zentralen Kenngrößen des Modells, sobald eine kritische Größe, z.B. eine bestimmte Temperatur, erreicht wird. Man denke z.B. an das Schmelzen von Eis bei 0°C (bei entsprechendem Druck), dabei ändert sich beispielsweise die Beweglichkeit der einzelnen Wassermoleküle und die damit zusammenhängende Viskosität erheblich. Abhängig von der Anzahl an stetigen Ableitungen einer solchen Kenngröße, kann man den Phasenübergang in Ordnungen einteilen. Diese Phasenübergänge und auch die davor angesprochenen Dinge werden im weiteren Verlauf der Thesis noch ausführlich besprochen.
Ausgangspunkt für die Entwicklung des zu untersuchenden Modells bildet dabei das Phänomen des Ferromagnetismus, welcher sich dadurch auszeichnet, dass sich unterhalb einer kritischen Temperatur die lokalisierten Spins in abgegrenzten Bereichen parallel ausrichten. Spontan oder durch Anlegen eines äußeren Feldes können diese Bereiche allesamt gleich ausgerichtet werden, sodass ein makroskopisches Magnetfeld entsteht, was aufgrund der speziellen Wechselwirkung auch noch nach dem Entfernen

der externen Größe vorhanden ist. Erst oberhalb einer kritischen Temperatur wird die zur Verfügung stehende Energie so hoch, dass primär entropische Prozesse zum Tragen kommen und die Ordnung der Spins vollkommen verloren geht. Die Hysteresekurve eines solchen Ferromagneten, welcher jeder Physikstudent seit dem zweiten Semester seines Studiums kennt, bzw. deren praktische Auswirkung war auch den Physikern des 19. Jahrhunderts bekannt, allerdings hatte man keine richtigen Modelle, um dieses Phänomen beschreiben zu können. Zu Beginn des 20. Jahrhunderts wurde sich vermehrt mit der Beschreibung dieser Phänomene beschäftigt, wie es beispielsweise auch Wilhelm Lenz tat (z.B.[**1**]). Ausgehend von ihm, sollte dessen Doktorand Ernst Ising ein Gittermodell entwickeln, mittels welchem man einen Ferromagneten beschreiben kann. 1925 veröffentlichte dieser seine Ergebnisse [**2**], wo er das nach ihm benannte *Ising*-Modell in einer Dimension vollständig analytisch lösen konnte. Dabei kam er zu dem Ergebnis, dass es zu keinem Phasenübergang kommt und vermutete fälschlicherweise, es gäbe auch in höheren Dimensionen einen solchen Übergang nicht. Erst einige Jahre später konnten Wannier und Kramer die exakte kritische Temperatur des Modells in zwei Dimensionen bestimmen [**3**], bevor 1943 der Chemiker Lars Onsager eine vollständig exakte Lösung für das zweidimensionale Modell ohne ein äußeres Feld lieferte und so zeigen konnte, dass ein Phasenübergang zweiter Ordnung vorliegt [**4**].
Ausgehend von dem eben besprochenen Ising-Modell entwickelten die beiden Mathematiker Edward Teller und Julius Ashkin ein Modell, welches auch eine Gitterstruktur als Grundlage hat, jedoch anstatt der zwei Spinzustände vier besitzt. Dieses wurde von ihnen 1943 publiziert [**5**], woraufhin Cyril Domb, der Doktorvater von Renfrey Potts, diesem vorschlug, auf dessen Basis eine allgemeine Erweiterung eines solchen Modells zu entwickeln, in welchem die Spins alle in einer Ebene auf dem Einheitskreis angeordnet sein sollen. Dieses eigentlich von Domb vorgeschlagene Modell bekam später den Namen *Planares*- oder *Uhren*-Potts-Modell (1974). Angelehnt an den Vorschlag von Domb entwickelte Potts in seiner Dissertation, deren Resultate 1952 veröffentlicht wurden [**6**], selbst ein Gitter-Modell, das beliebig viele Spinzustände zulässt und eine echte Verallgemeinerung der bisherigen Modelle, wie des *Ising*-, *Heisenberg*-, *Ashin-Teller*- oder *XY-Modells* darstellt. Dieses ist allgemein als *Standard*-Potts-Modell bekannt, wobei zu beachten ist, dass die genaue Unterscheidung zwischen diesem und dem Planaren-Potts-Modell erst 1974 von Domb getroffen wurde. Im Rahmen seiner Untersuchungen zum zweidimensionalen Modell konnte Potts auch den kritischen Punkt für $q = 2, 3, 4$ bestimmen. Seitdem ist dieses Modell immer wieder Gegenstand aktueller Untersuchungen, da man daran die verschiedensten Methoden im Umgang mit Spin-Systemen testen , sowie diverse rein mathematische Aspekte analysieren kann, wie z.B. *Tutte-Polynome* aus der Graphentheorie [**7**]. Des Weiteren gibt es auch Anwendungsbereiche in anderen Gebieten der Physik, welche im ersten Moment keine Verbindung zur Festkörperphysik haben. Ein wichtiges Themenfeld dabei ist unter Anderem die Untersuchung des *Deconfinement-Phasenübergangs*, also der Übergang von einer Phase, in der die freie Energie einer statischen Farbladung unendlich ist, hin zu einer, in der diese endliche Werte annimmt, sodass beispielsweise freie Farbladungen existieren können. Diese Änderung wird durch eine spontane Brechung der Zentrumssymmetrie hervorgeru-

fen, welche auch in Potts-Modellen zu beobachten ist und daher auch im Rahmen solcher vergleichsweise einfacheren Modelle studiert werden kann. Diese Anwendung wird auch später nochmal aufgegriffen. Zudem hat das Modell auch außerhalb der Physik und Mathematik Anwendung gefunden. So hat sich z.B. das *Cellular Potts Model* im Rahmen Computer gestützter Simulationen in der Biologie etabliert mit dessen Hilfe das Verhalten von Zell-Strukturen untersucht werden kann [**8**].
Ausgehend von diesem historischen Hintergrund eignet sich das Modell gut, um erste eigene Gitter-Simulationen zu programmieren, die noch nicht so aufwendig sind, wie die der Gitter-QCD, und deren Resultate mit den analytisch bekannten Werten zu vergleichen bzw. wie im dreidimensionalen Fall den Wert der kritischen Temperatur allein mittels Simulation zu bestimmen, da es sich, wie bei den Beispielen vom Anfang dieses Kapitels, um ein nicht analytisch lösbares Problem handelt.
Nach dieser kurzen Einleitung und Motivation des Themas kann sich im nachstehenden Abschnitt der zugrunde liegenden Theorie des Modells gewidmet werden.

Kapitel 2

Das Potts-Modell

Nachdem ein kleiner historischer Überblick gegeben wurde, wie es überhaupt zu der Entwicklung des Modells gekommen ist, sollen in diesem Kapitel die Grundlagen von diesem betrachtet werden. Anschließend werden einige wichtige Größen im Rahmen der Betrachtung im *kanonischen Ensemble* eingeführt und erläutert, die für weitere Betrachtung von Relevanz sind. Abschließend wird noch ein kleiner Überblick gegeben, warum die Betrachtung des *Potts*-Modells oder generell von Spin-Systemen wieder eine so große Bedeutung erlangt hat. Bevor wir damit beginnen, soll jedoch zunächst ein kurzer Überblick gegeben werden, was die Grundidee des *Ising*-Modells ist, da es den Ausgangspunkt für das *Potts*-Modell darstellt.

2.1 Ising-Modell

Grundlage für dieses Modell ist ein d-dimensionales, endliches Gitter, welches in die verschiedenen μ Raumrichtungen jeweils die Ausdehnung L_μ besitzt und an dessen Gitterplätzen Spins lokalisiert sind, welchen zwei Zustände zur Verfügung stehen. Allerdings ist dabei zu beachten, dass die eben erwähnten Spins nicht zwingend mit dem Spin eines sich auf der Gitterposition befindlichen Teilchens zu assoziieren sind, da diese Definition ganz allgemein dazu dient, „ein Gesamtsystem zu beschreiben, dass aus identischen, an den Gitterpunkten platzierten Systemen besteht, die sich jeweils nur in einem von zwei möglichen Zuständen befinden können“[**9**]. Will man hingegen Untersuchungen von Ferromagneten durchführen, wozu das Modell ursprünglich gedacht war, dann ist im einfachsten Fall den einzelnen Gitterpunkten der quantenmechanische Spin eines sich an dieser Gitterposition befindlichen Elektrons im Festkörper zuzuordnen.
Mathematisch lässt sich die Energiefunktion einer Spin-Konfiguration, welche im weiteren Verlauf der Arbeit die Bezeichnung σ bekommt und dadurch ausgezeichnet ist, den aktuellen Spinzustand jedes Gitterpunktes zu enthalten, eines solchen Systems, wobei nur eine Wechselwirkung des Gitterpunktes i mit seinen nächsten Nachbarn j eingeht (symbolisiert durch $\langle i, j\rangle$), folgendermaßen definieren

$$H(\sigma) = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i. \tag{2.1.1}$$

Dabei handelt es sich bei J_{ij} um die Kopplungskonstante, welche je nach Vorzeichen eine ferro- oder antiferromagnetische Kopplung erzeugt und im Fall des Ising-Modells als konstant angesehen wird ($J_{ij} = J$). s_i steht für den Spin eines Gitterpunktes i und kann aus der Menge $Z_2 = \{-1, 1\}$ stammen, wobei die Summe über alle Paare nächster Nachbarn läuft. Der zweite Term des Operators, bei welchem die Summe über alle N Gitterpunkte läuft, stellt die Wechselwirkung mit einem äußeren Feld h_i dar, welches abhängig von der Gitterposition sein kann. Zudem wird von periodischen Randbedingungen ausgegangen, was bedeutet, dass der letzte Gitterpunkt in einer Reihe als nächsten Nachbarn wieder den ersten Punkt der Reihe sieht und mit diesem auch genauso wechselwirkt, wie mit allen anderen. Im Unterschied zum anschließend betrachteten *Potts*-Modell, liegt hierbei sowohl in zwei als auch drei Dimensionen ein Phasenübergang zweiter Ordnung vor. Für eine ausführlichere Betrachtung sei hier auf die schon oben aufgeführten Quellen oder entsprechende Fachliteratur verwiesen.

2.2 q-Zustands-Potts-Modell

Nachdem in der Einleitung bereits ein kleiner historischer Rückblick gegeben und die grobe Einordnung des Modells in verschiedenen Anwendungsgebieten vorgenommen wurde, gilt es nun, sich die physikalischen Grundlagen des Modells anzuschauen, welche größtenteils auf [**10**] oder der obig schon angegeben Literatur beruhen. Diese werden auch im weiteren Verlauf der Thesis von Bedeutung sein, sodass immer wieder auf die folgenden Prinzipien zurückgegriffen wird.
Ausgangspunkt dabei bildet die Definition des Gitters, welche die Grundstruktur des Modells bei der Simulation vorgibt. Da sich diese jedoch vom Aufbau nicht unterscheidet zu der des Ising-Modells, sei hier auf die Beschreibung im vorherigen Teil verwiesen, sodass sich nun den grundlegenden Größen wie der Energiefunktion des Systems oder der Zustandssumme gewidmet werden kann, da alle weiteren Observablen daraus ableitbar sind.
Ansatzpunkt für das *Planare*-Potts-Modell bildet dabei die Definition der einzelnen Spinzustände über eine Position auf dem Einheitskreis. Der Grundgedanke dabei ist, dass der Spin die q-ten Wurzeln von 1 annehmen kann, woraufhin man jedem der möglichen Zustände einen Winkel zuordnen kann, über welchen diese eindeutig bestimmt sind. Dieser Winkel lässt sich folgendermaßen definieren

$$\Theta_n = \frac{2\pi n}{q} \in Z_q \quad \text{mit} \qquad n = 0, 1, ..., q-1, \tag{2.2.1}$$

sodass sich für den Spin-Wert

$$s_i = \exp\left(\frac{\mathbf{i}2\pi n_i}{q}\right) \tag{2.2.2}$$

ergibt. Auch hierbei wird nur eine Wechselwirkung mit den nächsten Nachbarn j betrachtet, was für eine Spin-Konfiguration zu der Energiefunktion der folgenden

Gestalt führt

$$H(\sigma) = -\sum_{\langle i,j \rangle} J(\Theta_{ij}) - \sum_i h_i s_i, \tag{2.2.3}$$

die eine $Z(q)$ Symmetrie aufweist, welche bei der Einordnung im Rahmen der Quantenchromodynamik noch einmal wichtig wird (siehe [**11**]). In Gleichung 2.2.3 läuft die erste Summe wieder über alle Paare nächster Nachbarn $\langle i, j \rangle$ und die zweite über alle N $(= \prod_{\mu=1}^{d} L_\mu)$ Gitterpunkte. s_i steht dabei wieder für den Spin des i-ten Gitterpunktes und ist entsprechend der jeweiligen Unterart des Potts-Modells, welche im Folgenden besprochen wird, zu wählen.
Für die weitere Betrachtung ist nur der erste Summand wichtig, weil im Rahmen dieser Thesis das äußere Feld h_i null gesetzt wird. Für die Kopplung ergibt sich im Rahmen des planaren Modells der folgende Term

$$J(\Theta_{ij}) = \epsilon_1 \cdot \cos(\Theta_{ij}), \tag{2.2.4}$$

wobei Θ_{ij} der Differenz der Winkel der entsprechenden Zustände entspricht.
Will man hingegen das *Standard*-Potts-Modell beschreiben, bei welchem die Zustände der Spins einfach durch die q n-Werte aus Gleichung (2.2.1) gebildet werden, so wird die Kopplung folgendermaßen definiert

$$J(\Theta_{ij}) = \epsilon_2 \cdot \delta_{Kr}(n_i, n_j). \tag{2.2.5}$$

Hier entspricht δ_{Kr} (Kramer-Wannier-Analysis) dem Kronecker-Delta, welches etwas umgeschrieben werden kann, um die volle Symmetrie des Systems in $(q-1)$ Dimensionen zu erkennen

$$\delta_{Kr}(n_i, n_j) = \frac{1}{q}\left[1 + (q-1)\mathbf{e}^{n_i}\mathbf{e}^{n_j}\right]. \tag{2.2.6}$$

Dabei handelt es sich bei $\mathbf{e}^{n_i}$ und $\mathbf{e}^{n_j}$ um die Einheitsvektoren, die in die q symmetrischen Richtungen eines Hypertetraeders in $(q-1)$ Dimensionen zeigen [**10**].
Analog zum Ising-Modell ist auch hier eine ferromagnetische Kopplung für ϵ_1 bzw. ϵ_2 größer null und anti-ferromagnetisch für ϵ_1 bzw. ϵ_2 kleiner null vorhanden.
Bei dem in dieser Thesis betrachteten Potts-Modell, wo $q = 3$ gewählt wird, macht es keinen Unterschied, welches der beiden Modelle man benutzt, da sie sich durch eine einfache Transformation, die die Physik unverändert lässt, in einander überführen lassen. Diese Transformation ist auch im Anhang noch einmal ausgeführt (siehe A.1). Diese Möglichkeit wird sich auch später im Rahmen der Simulation zunutze gemacht, da so der Kosinus, welcher Rechenzeit intensiver ist, umgangen werden kann. Auch für $q = 2$ (Ising-Modell) sind die beiden Modelle für geeignete ϵ identisch. Erst ab einem q von 4 gibt es einen „echten“ Unterschied der Modelle, obwohl auch dabei zu beachten ist, dass sich das dortige Vektor-Potts-Modell auf ein $q = 2$ Modell reduzieren lässt, was 1964 von Betts gezeigt werden konnte [**12**].
Abschließend sei hier noch erwähnt, dass für alle weiteren Betrachtungen sowie für die eigentliche Simulation, folgende Konvention verwendet wird

$$k_B = \epsilon_2 = 1,$$

da die Zustandssumme nur vom Produkt von den obigen Größen und T abhängt. Des Weiteren wird, solange nicht anders gesagt, wieder von periodischen Randbedingungen ausgegangen. Dies heißt, dass der letzte Gitterpunkt als nächsten Nachbarn wieder den ersten der Kette sieht und mit diesem gleich wechselwirkt wie mit allen anderen auch. Dasselbe gilt auch für alle anderen Spins am Rand des Gitters.

2.3 Beschreibung des Modells im Kanonischen Ensemble

Im Rahmen der Simulation wird das System an ein Wärmebad gekoppelt, sodass es sich anbietet, das Modell im *kanonischen Ensemble* zu formulieren. Die dadurch vorgegebene Temperatur spiegelt sich dann in β wieder.

2.3.1 Die Zustandssumme

Ausgangspunkt jeder thermodynamischen Beschreibung bildet immer die Zustandssumme Z_K (kanonische Zustandssumme), welche folgendermaßen definiert ist

$$Z_K = \mathrm{Tr}\left[\exp\left(-\beta\mathcal{H}\right)\right] = \sum_{\sigma} \exp(-\beta H(\sigma)), \tag{2.3.1}$$

wobei $\mathcal{H}$ der Hamilton-Operator einer gesamten Spin-Konfiguration und β die reziproke dimensionslose Temperatur ist. $H(\sigma)$ entspricht der Energiefunktion aus dem vorherigen Abschnitt und die Summe läuft über alle möglichen Konfigurationen des Systems. Ausgehend von dieser Größe können alle weiteren Größen, welche für die nachfolgende Untersuchung des Systems von Relevanz sind, abgeleitet werden.
Als erstes kann man sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung anschauen, mit der eine bestimmte Spinkonfiguration, nennen wir sie wieder σ, auftritt, welche mit Hilfe der obigen Zustandssumme so bestimmt wird:

$$P_K(\sigma) = \frac{\exp(-\beta H(\sigma))}{Z_K} \tag{2.3.2}$$

Ausgehend davon kann man den Erwartungswert der gesuchten Größe O, die selbst Funktion der einzelnen σ_k ist, über folgenden Zusammenhang

$$\langle O \rangle = \sum_k P(\sigma_k) O(\sigma_k) \tag{2.3.3}$$

einfach bestimmen, wobei die Summe wieder über alle möglichen Spin-Konfigurationen läuft.
Ausgehend davon können nun im nachstehenden Abschnitt die Observablen besprochen werden, welche auch im weiteren Verlauf der Thesis bei der Durchführung von Simulationen betrachtet werden.

2.3.2 Observablen

Die erste wichtige Größe, welche später auch in der Berechnung von anderen Observablen auftaucht, ist die *mittlere Magnetisierung* m einer Spin-Konfiguration σ, welche in etwa die Bedeutung davon hat, wie die Spins momentan im Mittel ausgerichtet sind. Diese ist wie folgt definiert [**13**]

$$m(\sigma) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma(i) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}s_i = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\exp\left(\frac{\mathbf{i}2\pi n_i}{q}\right), \tag{2.3.4}$$

wobei N der Anzahl der Gitterpunkte und s_i dem Spin des i-ten Gitterplatzes (n_i aus Gleichung 2.2.1) entspricht. Allerdings wird in der späteren Simulation nicht die Größe aus Gleichung 2.3.4 direkt bestimmt, sondern ausgehend davon der Erwartungswert des Betrags der mittleren Magnetisierung. Diese Größe $\langle\mid m \mid\rangle$ wird im Verlauf dann auch als mittlere Magnetisierung bezeichnet, wobei immer angegeben oder aus dem Kontext ersichtlich ist, welche der beiden man meint.
Weiterhin kann noch die *Suszeptibilität* χ und die *vierte Binderkumulante* B_4 eingeführt werden. Erstere wird dabei folgendermaßen bestimmt

$$\chi = \frac{\partial\langle m\rangle}{\partial h} = N(\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2). \tag{2.3.5}$$

Für die Herleitung sei auf [**14**] verwiesen. Bei der obigen Definition ist zu beachten, dass für $h = 0$ keine spontane Magnetisierung auftritt, sodass man die Beträge der Magnetisierung benutzt und χ so definiert [**15**]

$$\chi\mid_{h=0,T<T_c} := \lim_{L\to\infty} N(\langle m^2\rangle - \langle\mid m \mid\rangle^2). \tag{2.3.6}$$

Dabei werden die Erwartungswerte, wie auch bei der nachstehenden Größe, über die Mittlung von verschiedenen Spin-Konfigurationen gebildet.
Die Binder-Kumulante, erstmals 1981 in [**16**] erwähnt, ist folgendermaßen zu bestimmen:

$$B_4 = 1 - \frac{\langle m^4\rangle}{3\langle m^2\rangle^2}. \tag{2.3.7}$$

Auf den speziellen Verlauf oder markante Charakteristika der Größen wird im Abschnitt 2.4.1 genauer eingegangen.
Als letztes soll noch eine Größe betrachtet werden, welche später bei den *Finite-Size-Scaling*-Untersuchungen eine zentrale Rolle spielt. Ausgangspunkt dafür ist die Einführung einer Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion G (siehe [**17**])

$$G(i) := \langle\sigma(i)\sigma(0)\rangle - \langle m\rangle^2. \tag{2.3.8}$$

Diese ist ein Maß dafür, wie korreliert der i-te Gitterpunkt mit dem nullten ist. Im Fall, dass diese statistisch unabhängig sind, hat $G(i)$ den Wert null. Andernfalls ist der Wert der Korrelationsfunktion ungleich null und man kann mit Hilfe von

dieser die Korrelationslänge ξ definieren. Dabei ist zu unterscheiden zwischen der *exponentiellen* oder *wahren Korrelationslänge*

$$\xi_{exp} = -\limsup_{|i|\to\infty} \frac{|\, i \,|}{\log G(i)} \tag{2.3.9}$$

und der *second-moment Korrelationslänge*

$$\xi_{2^{nd}} = \left[\frac{1}{2d} \frac{\sum_i |\, i \,|^2 \, G(i)}{\sum_i G(i)} \right]^{1/2} . \tag{2.3.10}$$

Diese zunächst abstrakte Definition wird in Abschnitt 2.4.2 noch einmal aufgegriffen. Vorher muss allerdings erst noch eine kleine Einführung in das Phänomen des Phasenübergangs und dabei ablaufende Prozesse gegeben werden.

2.4 Phasenübergänge

Bei Phasenübergängen handelt es sich um ein sehr spannendes Phänomen, welches zwar schon seit langer Zeit bekannt, aber bei manchen Prozessen immer noch nicht richtig verstanden ist. Zudem ist dies ein Vorgang, der in fast allen Bereichen der Physik und auch im täglichen Leben von Relevanz ist. Es reicht, wie bereits in der Einleitung gesehen, vom Verdampfen oder Gefrieren von Wasser, was uns fast täglich begegnet, über die Veränderung der magnetischen Eigenschaften verschiedener Substanzen, welche man schon aus dem Physikunterricht der sechsten Klasse kennt, bis hin zur Beschreibung des Übergangs einer hadronischen Phase hin zum Quark-Gluon-Plasma (siehe Kapitel 2.5), deren Mechanismus selbst die klügsten Köpfe der Physik noch nicht komplett verstanden haben.
Ausgangspunkt der Betrachtung von solchen Übergängen bildet dabei erstmal die Definition einer Phase an sich und, bei dem Vorhandensein von mehreren Phasen, die einer Phasengrenze.
Im Rahmen der Thermodynamik kann man ein System vollständig durch einen Satz von thermodynamischen Grundgrößen beschreiben. Denkt man beispielsweise nochmal an das allen bekannte Phasendiagramm von H_2O, sind dies Druck, Volumen und Temperatur. Ausgehend davon lassen sich bestimmte Observablen, die selbst wieder Funktion von den eben eingeführten Größen sind, bzw. deren Mittelwerte bestimmen, wie beispielsweise Viskosität, Brechnungsindex oder elektrischer Widerstand. Innerhalb einer Phase ist eine solche Größe, ausgenommen von immer vorhandenen Schwankungen, konstant oder homogen. Eine Phasengrenze zeichnet sich dann dadurch aus, dass es zu einer signifikanten Änderung von diesen kommt, die sich auch in der Betrachtung der Physik an sich widerspiegeln. Quantitativ lässt sich ein solcher Übergang am besten formulieren, wenn man einen Ordnungsparameter Φ einführt, welcher unter bzw. über einer kritischen Größen, wie z.B. der Temperatur T_c, folgendes Verhalten zeigt:

$$\Phi \begin{cases} \neq 0 & T \leqslant T_c \\ = 0 & T > T_c \end{cases} \tag{2.4.1}$$

Bei dem in dieser Thesis betrachteten Ordnungsparameter handelt es sich um die mittlere Magnetisierung. Die zuvor angesprochene Änderung im physikalischen Verhalten spiegelt sich z.B. dabei wieder, dass unterhalb von T_c die Wechselwirkung der nächsten Nachbarn energetisch ausreichend ist, damit diese sich parallel anordnen, sodass eine bevorzugte Ausrichtung entsteht, welche makroskopisch als vorhandene Magnetisierung wahrgenommen wird. Überhalb von der kritischen Temperatur, wo thermisch genug Energie vorhanden ist, gewinnt hingegen die Entropie, sodass es zu einer wild verteilten Konfiguration kommt, wo sich die einzelnen Beiträge der Spins untereinander auslöschen, sodass makroskopisch keine Magnetisierung zu beobachten ist.
Findet der Übergang des Ordnungsparameters sprunghaft, also unstetig statt, so nennt man diesen, zurück gehend auf die Klassifikation von Ehrenfest, einen Übergang erster Ordnung. Ist die Veränderung hingegen stetig, aber eine partielle Ableitung unstetig (oder wie z.B. im Fall der Suszeptibilität divergent), spricht man von einem Phasenübergang zweiter Ordnung. Beispielhaft für einen Übergang erster Ordnung ist das Schmelzen von Wasser. Dabei wird Energie zugeführt um die Temperatur zu erhöhen bis diese den kritischen Wert erreicht hat, bevor es jedoch zur Überschreitung von dieser kommt, muss weiterhin Energie hinzugefügt werden, um die Kristallisationsenergie zu überwinden. Diese sogenannte *latente Wärme* sorgt beispielsweise für eine Unstetigkeit in der Entropie.
Eine modernere Klassifizierung von Phasenübergängen wird im Rahmen der Landau-Theorie vorgenommen, welche solche Übergänge durch eine auftretende Symmetriebrechung identifiziert. Damit einhergehend ist (für Übergänge zweiter Ordnung) das Konzept der Universalitätsklasse, welche Systeme, die an kritischen Stellen über bestimmte Bereiche das gleiche Verhalten zeigen, in eine gemeinsame Klasse einordnet. Die einzelnen Klassen für sich sind charakterisiert durch Parameter wie Anzahl der Freiheitsgrade, also in unserem Beispiel die möglichen Spineinstellungen, Dimensionalität des Raums und wieweit die zugrunde liegende Wechselwirkung langreichweitige Anteile besitzt (also anders als nur die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn wie im Potts-Modell), welche beispielsweise eine Clusterbildung erschweren. Eine Anwendung von solch universalem Verhalten ist beispielsweise in Kapitel 2.4.2 zu finden.

2.4.1 Verhalten des Modells bei $T = T_c$

Nachstehend wird sich das Verhalten der oben schon eingeführten Größen um den kritischen Punkt herum angeschaut, um teilweise quantitative, zumindest aber qualitative Rückschlüsse ziehen zu können, anhand welcher wir die Simulationsergebnisse überprüfen können. Da es teilweise Unterschiede im Verlauf zwischen erster und zweiter Ordnung gibt, werden die Modelle getrennt nach Dimension untersucht.

2.4.1.1 Zweiter-Ordnungs-Übergang (2D)

Wie in der allgemeinen Einleitung zu den Phasenübergängen schon beschrieben, wird man für die Magnetisierung oberhalb von der kritischen Temperatur keine Magneti-

sierung feststellen, da die Spins alle ungerichtet sind, wohingegen bei Temperaturen unterhalb von T_c die mittlere Magnetisierung gegen eins konvergiert.

$$\langle | m | \rangle = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad T < T_c, T \to 0 \\ 0 & \text{für} \quad T > T_c \end{cases} \tag{2.4.2}$$

Der zu beobachtende Übergang wird dabei jedoch stetig verlaufen.
Die Suszeptibilität, eine der partiellen Ableitungen der mittleren Magnetisierung (Gl. 2.3.5), wird am kritischen Punkt divergentes Verhalten zeigen, da sie direkt mit der Korrelationslänge verknüpft ist ($\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}$, siehe 2.4.2) und diese selbst bei einem Übergang zweiter Ordnung divergiert (bei endlichem Gitter natürlich durch die Gitterausdehnung begrenzt). Im restlichen Bereich wird χ fast bei null liegen. Zudem wird sich die Peakposition mit größer werdenden Gittern leicht verschieben und immer näher an den *Infinite-Volume-Limes* heran rücken.
Für die vierte Binderkumulante ergeben sich die folgenden zwei Grenzwerte:

$$B_4 = \begin{cases} \frac{2}{3} & \text{für} \quad T \to 0 \\ \frac{1}{3} & \text{für} \quad T \to \infty \end{cases} \tag{2.4.3}$$

Diese lassen sich damit erklären, dass bei kleinen Temperaturen die Mittelwerte in Gleichung (2.3.7) faktorisiern und für große Werte eine gaußverteilte Magnetisierung angenommen werden kann, wodurch die Mittelwerte einfach berechnet werden können. Da die Magnetisierung allerdings in der Simulation als Betrag einer Summe von komplexen Größen gebildet wird, muss das auch in der Rechnung berücksichtigt werden, welche im Anhang auch nochmal zu sehen ist. Da es sich beim zweiten Ordnungs-Übergang um eine kontinuierliche Veränderung der Magnetisierung handelt, also auch am Phasenübergang selbst eine Verteilung mit nur einem Peak angenommen werden kann (siehe Abb. 5.8), verläuft auch die Binderkumulante stetig zwischen den beiden obigen Grenzwerten. Zudem ist eine wichtige Eigenschaft, die sich aus dem stetigen Verlauf ergibt, dass diese Größe an der kritischen Temperatur universelles Verhalten zeigt, sodass sich in diesem Punkt $(T_c \mid B^*)$ die Kumulanten aller Gittergrößen schneiden (weiteres skalenunabhängiges Verhalten wird in 2.4.2 besprochen).
Im Gegensatz zum dreidimensionalen Modell, kann man im zweidimensionalen Fall die Übergangstemperatur für alle q-Zustands-Potts-Modelle auch analytisch über die nachstehende Gleichung [**10**] bestimmen

$$T_c = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{q})}, \tag{2.4.4}$$

wobei sich für das in der Thesis behandelte Modell ($q = 3$) eine kritische Temperatur von ca. $0,99497$ ergibt.

2.4.1.2 Erster-Ordnungs-Übergang (3D)

Bei einem Phasenübergang erster Ordnung liegen die gleichen Grenzwerte der mittleren Magnetisierung vor, wie die des Übergangs zweiter Ordnung (selbe Argumentation wie in 2D), nur der Übergang an sich ist nicht mehr kontinuierlich, sondern

unstetig.
Bei der Suszeptibilität würde man nicht erwarten, dass diese am kritischen Punkt einen solchen Peak vorweist, wie im zweidimensionalen Fall, da hier die Korrelationslänge nicht divergiert. Dies lässt sich damit erklären, dass sich auf dem Gitter Cluster mit Spins gleicher Einstellung ausbilden, die im Infinite-Volume-Limes teilweise so weit von einander entfernt sind, dass sie nicht mehr miteinander wechselwirken. Da die Simulation hingegen auf einem endlichen Gitter stattfindet, was noch nicht groß genug ist, um die Cluster soweit von einander zu entfernen, dass sie energetisch nicht mehr sichtbar für einander sind, erstreckt sich die Korrelationslänge doch über das gesamte Gitter, was zu einem Peak in der Suszeptibilität führt.
Die vierte Binderkumulante erfüllt auch die schon aus dem zweidimensionalen Modell bekannten Limites, da man auch dabei (also weit genug entfernt und oberhalb von T_c) die Magnetisierung als gaußverteilt annehmen kann. Nähert man sich hingegen dem Übergang, wo beide Phasen in Koexistenz vorliegen, ist diese Betrachtungsweise nicht mehr korrekt, da man, wie später in Abbildung 5.9 zu sehen, keine einzelne Gauß-Verteilung mehr vorliegen hat, sondern zwei Peaks. Dies führt dazu, dass die Binderkumulante ein nicht triviales Verhalten (zumindest in einem sehr kleinen Bereich) zeigt und negative Ausschläge, die mit dem Volumen skalieren, vorweist ([**18**], [**19**], [**20**] und [**21**]). Zudem werden aufgrund von diesen zwei Verteilungen und dem daraus resultierenden Tunneln zwischen den beiden Bereichen die Fehler sowohl bei B_4, als auch bei χ sehr groß.

2.4.2 Finite-Size-Scaling und kritische Exponenten

Ausgehend von der Theorie der Renormierungsgruppe (RG), auf welche in dieser Thesis nicht genauer eingegangen werden soll (für genauere Informationen sei auf [**17**] verwiesen), kann man einige universelle Zusammenhänge für das Modell herleiten, welche in der Umgebung des Phasenübergangs nicht mehr von den mikroskopischen Details des Systems abhängen [**14**]. In diesem Bereich sind nur noch die Gittergröße L und die aus Abschnitt 2.3.2 bekannte Korrelationslänge ξ von Relevanz, wobei es bei letzterer keine Rolle spielt, ob man die Definition aus Gleichung (2.3.9) oder (2.3.10) verwendet. Zudem haben diese den Vorteil auch in Bereichen wo $\xi \sim L$ anwendbar zu sein, dass man Untersuchungen direkt am kritischen Punkt durchführen kann [**13**]. In diesem Rahmen wird dann auch das im Abschnitt zu den Phasenübergängen besprochene Konzept der Universalitätsklasse verwendet. So lässt sich das Verhalten der oben schon eingeführten Observablen $\mid m \mid$, χ und ξ am kritischen Punkt und bei unendlichem Volumen durch folgende Potenzgesetze darstellen [**17**]

$$\mid m \mid_\infty \sim |t|^\beta \quad \text{für} \quad t < 0, \tag{2.4.5}$$

$$\chi_\infty \sim |t|^{-\gamma}, \tag{2.4.6}$$

$$\xi_\infty \sim |t|^{-\nu}. \tag{2.4.7}$$

Im weiteren Verlauf wichtig sind nur die kritischen Exponenten β, ν und γ, deren genaue Werte im Kapitel der Auswertung besprochen und verglichen werden. Bei

$t = T/T_c - 1$ handelt es sich um die reduzierte Temperatur, die auch später nochmal von Nutzen sein wird. Es sei nochmal darauf hingewiesen, wie wichtig die Einführung solcher Universalitätsklasse im gesamten Gebiet der Physik ist, da man ein sehr mächtiges Konstrukt geschaffen hat, womit sich spezielle Eigenschaften mancher nur sehr schwer oder überhaupt nicht lösbaren bzw. durch Rechner zu simulierenden Probleme innerhalb von anderen Modellsystemen der gleichen Universalitätsklasse untersuchen lassen.
Ausgehend von den eben eingeführten kritischen Exponenten, sollen nun Funktionen von diesen Größen gefunden werden, welche auch dieses skalenunabhängige Verhalten zeigen und einen Bezug zwischen den auf endlichen Gittern durchgeführten Simulationen und dem thermodynamischen Limes einer beliebigen Observable O

$$\langle O \rangle_\infty = \lim_{L \to \infty} \langle O \rangle \tag{2.4.8}$$

(also unendlich ausgedehntes Volumen) herstellen.
Ausgangspunkt dafür bildet das in **[17]** gefundene Verhalten einer zunächst allgemeinen Observable $S(\beta, L)$, welches durch folgende Gleichung beschrieben werden kann

$$S(\beta, L) = L^{\frac{\sigma}{\nu}} \left[f_S \left(\frac{\xi_\infty}{L} \right) + O\left(L^{-\omega}, \xi_\infty^{-\omega}\right) \right]. \tag{2.4.9}$$

Da man zudem weiß, dass $S(\beta, L = \infty)$ für $t \to 0$ folgendermaßen skaliert

$$S(\beta, L = \infty) \propto t^{-\sigma}, \tag{2.4.10}$$

kann man über einen Vergleich mit Gleichung (2.4.5) und (2.4.6) den Exponenten mit $-\beta$ bzw. γ identifizieren, wenn man für die bis dahin noch allgemeine Variable $S(\beta, L)$ nun $\mid m \mid$ bzw. χ einsetzt.
Verwendet man jetzt noch den Zusammenhang aus Gleichung (2.4.7), also das ξ_∞ mit $t^{-\nu}$ skaliert, und führt eine einfache Variablentransformation durch, erhält man nach kurzer Umformung für die beiden Oberservablen $\mid m \mid$ und χ die folgenden Zusammenhänge

$$\mid m \mid = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \tilde{f}_1 \left(t L^{\frac{1}{\nu}} \right) \tag{2.4.11}$$

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{f}_2 \left(t L^{\frac{1}{\nu}} \right), \tag{2.4.12}$$

welche beide skalenunabhängiges Verhalten zeigen und für die man die Korrelationslänge ξ nicht kennen muss. Dabei wird außerdem benutzt, dass für hinreichend große Gitter der zweite Term in Gleichung (2.4.9) verschwindet.
Ausgehend davon kann man die Richtigkeit seiner Fit-Parameter überprüfen, indem man die Daten in geeigneter Weise gegeneinander aufträgt und schaut, ob das universale Verhalten rund um $t = 0$ ersichtlich ist.
Bevor sich im nächsten Kapitel mit einer Einführung in die Grafikkarten-Programmierung und der Umsetzung des eben besprochenen theoretischen Wissens in einen entsprechenden Code beschäftigt wird, soll im folgenden Abschnitt ein kurzer Exkurs in die Quantenchromodynamik unternommen werden, um zu erkennen, warum die Untersuchung eines solchen Modells auch heute noch von Relevanz ist.

2.5 Rolle des Potts-Modell in der QCD

Die Quantenchromodynamik (QCD) ist die Quantenfeldtheorie der starken Wechselwirkung und beschreibt die Interaktion der Quarks und Gluonen, den Austauschbosonen der Theorie, bzw. deren Selbstwechselwirkung. Da, aufgrund des nicht abelschen Charakters der Theorie, die Kopplungskonstante in dieser keine Konstante im eigentlichen Sinn darstellt, sondern abhängig ist von der Energie/Längenskala, weshalb man auch von *laufender Kopplung* spricht, wobei die Kopplung bei kleinen Energien am größten ist (im Bereich von 1) und bei großen Energien verschwindend klein wird (*Asymptotische Freiheit* [**22**][**23**]). Daher können in den Energiebereichen, in denen unser tägliches Leben stattfindet, keine perturbativen Methoden zurate gezogen werden. Stattdessen muss man beispielsweise auf *Dyson-Schwinger-Gleichungen*, die *Funktionale Renormierungsgruppe* oder *Gitter-Simulationen* zurückgreifen. Zu den zwei großen Fragestellungen innerhalb dieser Theorie zählen zum Einen die *dynamische Massenerzeugung*, also die Frage, durch was die hadronische Materie ihre Masse bekommt, wenn man überlegt, dass die up- und down-Quarks innerhalb der Nukleonen nur eine Ruheenergie von einigen MeV besitzen, bedingt durch die *Elektroschwache Symmetrie-Brechung*, also der Wechselwirkung mit dem Higgs-Feld, das Nukleon an sich aber fast ein GeV. Die zweite große Fragestellung ist das Phasendiagramm der QCD und der damit verbundene Übergang (erste Ordnung in $SU(3)$) von der hadronischen Phase, in dem alle Quarks nur in gebundenen, farbneutralen Zuständen, den Baryonen und Mesonen (oder in Beschleunigern erzeugte exotische Zustände wie Multiquarks, Hybrids oder Gluebälle), vorkommen und dem Quark-Gluon-Plasma (QGP), in welchem diese ungebunden sind [**24**]. Bei der Untersuchung dieses Phasenübergangs von einer Phase in der das *Confinement* noch gilt, hin zum QGP kommt das Potts-Modell zum Tragen. Eine wichtige Größe, die man dabei untersuchen will, ist die freie Energie pro Fläche des sich in der Grenzfläche ausbildenden Interfaces, in welchem die hadronische Phase mit dem Quark-Gluon-Plasma in Koexistenz vorliegt. Um dies abschätzen zu können, vernachlässigt man die Quarks und betrachtet eine reine SU(3) Eichtheorie.
Allerdings sind SU(3) Gittertheorien sehr aufwendig zu simulieren, weshalb man ausnutzt, dass die Ordnungsparameter einer effektiven Theorie einer (n+1) dimensionalen SU(N) Eichtheorie genau die gleiche globale Symmetrie besitzen, wie die eines Z(N) Spin-Modells in n Dimensionen. Deshalb sind auch die Untersuchungen vom 3D-3-Zustands-Potts-Modell ins Interesse gerückt [**25**]. Des Weiteren werden auch Untersuchungen beim 2D-3-Zustands-Potts-Modell durchgeführt, um diesen Übergang in 2+1 Dimensionen (zweiter Ordnung) und das universale Verhalten genauer zu untersuchen, wobei hier für detaillierte Betrachtungen auf [**26**] verwiesen sei.
In diesem Abschnitt sollte man einen Eindruck gewonnen haben, warum die Untersuchung solcher Spin-Modelle auch für die moderne Physik von elementarem Interesse ist und was sich aus ähnlichen Analysen, wie sie in dieser Thesis durchgeführt werden, für Rückschlüsse auf deutlich schwieriger Theorien ziehen lassen.

Kapitel 3

Grafikkarten-Programmierung

In diesem Kapitel geht es um den prinzipiellen Aufbau von Grafikkarten und deren Funktionsweise. Zudem sollen die grundlegenden Speichermodelle näher beleuchtet werden, da diese bei der Implementierung des Algorithmus noch einmal von Belangen sind. Für die eigentliche Programmierung wird auf das Framework von *CUDA C*, der eigens von *NVIDIA* entwickelten Sprache zur Programmierung von Grafikkarten, zurückgegriffen, wobei hier auf die genauere Syntax nicht eingegangen werden soll. Für detailliertere und umfangreichere Informationen dazu und zur Grafikkarten-Programmierung generell sei auf [**9**] und [**27**] verwiesen, welche auch als Grundlage für die folgende Übersicht dienen.

3.1 Schematischer Aufbau und prinzipielle Funktionsweise von GPUs

Wie man es aus dem Namen bereits ableiten kann, sind GPUs primär für die Berechnung von grafischen Inhalten wie z.B. Computerspielen gedacht. Dabei kommt es auf eine hohe Parallelisierung an, da die grafischen Eigenschaften von vielen einzelnen Bildpunkten simultan berechnet werden sollen. Allerdings hat sich auch die Anwendung im Bereich der Wissenschaft und Entwicklung immer mehr bewährt, da sich z.B. bei Strömungssimulationen in der Autoindustrie, der Wettervorhersage oder Simulationen von Spin-Systemen, wie in dieser Thesis, diese hohe Parallelisierung als effizient erwiesen hat.
Um diese gewährleisten zu können, basiert die Grundidee auf der *SIMT-Architektur*, welche die Möglichkeit der gleichzeitigen Ausführung von identischen oder ähnlichen Prozessen auf vielen Rechenkernen bietet. Aufgebaut ist eine GPU aus einzelnen *Streaming Multiprocessor*s (SM), welche selbst wiederum eigene Rechenkerne, Register und Steuereinheiten besitzen. Ein solcher SM bearbeitet mehrere *threads* (vorgegebene Programmabläufe), die zu einem *thread-block* zusammengefasst werden. Innerhalb solcher Blöcke bilden immer 32 *threads* einen *warp*, der im gesamten Ablauf als eine zusammengehörige Einheit betrachtet und bearbeitet wird. Hierbei sei allerdings angemerkt, dass diese vielen kleinen Prozessoren einer GPU weniger Rechenschritte pro Zeiteinheit schaffen, als die einer CPU, da diese nicht alle ein-

zeln über entsprechende Kontrolleinheiten verfügen oder gewissen Restriktionen bei Speicherzugriffen unterworfen sind. Eine in solch einem hohen Grad nicht mögliche Parallelisierung von CPUs wäre also deutlich effizienter. Der Vorteil der Benutzung von Grafikkarten ergibt sich bei Prozessen, die enorm parallelisiert werden können und dessen einzelnen Rechnungen nicht so aufwendig sind bzw. bei denen weitere Schritte nicht von vorherigen Zwischenergebnissen abhängen. Deshalb werden z.B. iterative Lösungsverfahren von Differentialgleichungen eher auf CPUs durchgeführt, wohingegen die Simulation von Spin-System, wie in dieser Thesis, sehr gut auf GPUs durchgeführt werden kann, da dabei immer wieder die gleichen Rechnungen unabhängig voneinander durchgeführt werden müssen.
Die während des Programmablaufs zur Verfügung stehende Anzahl an *blocks* und *threads* wird beim jeweiligen *kernel*-Aufruf mittels entsprechender Syntax übergeben.

3.2 Speichermodelle

Auf Grafikkarten gibt es drei verschiedene Typen von Speichern, auf die nicht alle gleich oder nicht von überall zugegriffen werden kann. Diese sind der *Global Memory*, der *Shared Memory* und die *lokalen Register* der einzelnen SMs, wobei im Folgenden auf die ersten beiden etwas genauer eingegangen werden soll, da sich speziell aus zweiterem Restriktionen für eine effiziente Implementierung ergeben. Für eine wesentlich tiefer gehende Beschreibung, die über Erläuterungen der prinzipiellen Funktionsweise hinaus geht, sei allerdings nochmal auf die bereits erwähnte Literatur verwiesen, da dies dort ziemlich ausführlich und gut verständlich geschieht.

Global Memory:
Der *Global Memory* bildet das Analogon zum Arbeitsspeicher der CPU und dient dem allgemeinen Abspeichern von Daten. Auf diesen haben auch alle *threads* eines *grids* Zugriff und es kann auch von verschiedenen *kernels* aus zugegriffen werden. Allerdings besteht die Restriktion, dass immer nur 32, 64 oder 128 Bytes lange, benachbarte Speicherstellen gleichzeitig von diesem in den *Streaming Multiprocessor* transferiert werden können, wobei die Größe abhängig von der spezifischen Grafikkarte ist. Daher sollte entsprechend der vorliegenden Hardware aus Gründen der Zeitoptimierung so programmiert werden, dass immer nur gleichzeitig ein genau so großes Segment geladen wird.

Shared Memory:
Jeder *Streaming Multiprocessor* besitzt eine *Shared Memory* auf die alle *threads* eines *thread-blocks* zugreifen können. Diese ist nochmals in *banks* unterteilt, sodass ein zeitgleicher Zugriff auf verschiedene Segmente ermöglicht wird, solange diese auf unterschiedlichen *banks* abgelegt sind. Ein weitere Vorteil dieses Speichertyps im Vergleich zum *Global Memory* besteht darin, dass er wesentlich schneller ist, sodass man falls möglich immer diesen verwenden sollte.

Kapitel 4

Implentierung des Algorithmus

Inhaltlich geht es in diesem Kapitel um die Implementierung des verwendeten Algorithmus, mittels welchem die Simulationen auf den Clustern durchgeführt werden sollen. Als Grundlage dazu dient ein schon bestehender Code zur Simulation des Ising-Modell, welcher aus [**9**] stammt, sodass die vorhandene Gitterstruktur der dortigen Implementierung übernommen werden konnte, da im Theorie-Teil bereits festgestellt wurde, dass diese bei beiden Modell gleich ist. Bevor wir uns diesem widmen können, müssen jedoch noch die grundlegenden Aspekte von Monte-Carlo-Simulationen und deren Anwendung beim Potts-Modell, sowie das Verfahren des Multispin-Codings besprochen werden.

4.1 Monte-Carlo-Simulationen des Potts-Modells

Die in dieser Thesis durchgeführten Monte-Carlo-Simulationen basieren auf dem *Metropolis-Algorithmus*, dessen Funktionsweise im Folgenden besprochen werden soll. Zuvor werden jedoch noch kurz die generellen Grundlagen einer Monte-Carlo-Simulation erörtert.

4.1.1 Grundlagen

Das Fundament der Monte-Carlo-Simulationen bildet das *Gesetz der großen Zahlen* und der damit verbundene Konvergenzbegriff, da dieses die Möglichkeit bildet, gesuchte Größen über stochastische Prozesse zu bestimmen, wenn man hinreichend viel Statistik zugrunde legt. So lässt sich die eigentlich folgendermaßen definierte Größe O

$$O = \sum_{x \in M} P(x) \cdot f(x), \tag{4.1.1}$$

wobei f von M auf die reellen Zahlen abbildet, P die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von $x \in M$ ist und M eine frei wählbare Menge sein kann, mittels einer Grenzwertbetrachtung der Gestalt

$$O = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N} P(x_n) f(x_n) \tag{4.1.2}$$

bestimmen [**9**]. Ausgehend von dieser Grundidee kann man nun einige wichtige Grundbegriffe und Charakteristika betrachten.

4.1.1.1 Importance Sampling

Wenn man die Zustandssumme des betrachteten System noch ein weiteres Mal betrachtet

$$Z_K = \sum_{\sigma} \exp(-\beta H(\sigma)), \tag{4.1.3}$$

stellt man fest, dass diese durch eine Summe über alle möglichen Mirkozustände gebildet wird. Dies heißt für unsere Simulation, dass bei der Berechnung von Gleichung (4.1.3) jegliche Kombination aller Gitterpunkte mit deren drei möglichen Spinzustände betrachtet werden müssten, was eine Auswertung, selbst bei dem kleinsten durch die Implementierung realisierbaren Gitter (32x32), unmöglich macht, da es dabei schon $3^{32 \cdot 32} \approx 3,7 \cdot 10^{488}$ mögliche Konfigurationen gibt, was momentan für keinen Rechner auf der Welt in endlicher Zeit zu lösen ist.
Da man aber weiß, dass für Systeme im thermischen Gleichgewicht, nur wenige Konfigurationen ein Beitrag zu den Messgrößen liefern (*Boltzmann-Gewicht*)[**28**], ist es sinnvoll, sich dies in der Erzeugung von neuen Konfigurationen zu Nutze zu machen, was später auch verwendet und besprochen wird. Dabei übernimmt die Boltzmann-Verteilung gerade die Rolle des P in Gleichung (4.1.2). Allerdings soll nun erst auf die prinzipielle Erzeugung von einer Reihe solcher Zustände eingegangen werden und auf welche Sachverhalte dabei besonders zu achten ist. Es geht also um die so genannten *Markov-Ketten*.

4.1.1.2 Markov-Ketten

Bei *Markov-Ketten* handelt es sich um eine Abfolge von Konfigurationen, bei dem der Übergang von einem Zustand k zu l nicht von den vorherigen Zuständen k_{n-1} bis k_0, sondern nur vom momentanen Zustand selbst abhängen darf. Der einzelne Übergang zwischen zwei solchen Zuständen k und l heißt *Markov-Prozess* M und kann mathematisch durch eine Übergangsmatrix W definiert werden, deren Einträge die entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten darstellen.

$$W^{(k)(l)} = W[k \to l] \tag{4.1.4}$$

Allerdings müssen für diese die folgenden drei Bedingungen gelten [**15**] [**29**]:

Normierung: Sei k und $l \in M$.

$$\sum_{l} W^{(k)(l)} = 1$$

Ergodizität: Sei $k \in M$.

$$\forall l \in M \exists n > 0 : W^n(k \to l) > 0$$

wobei

$$W^n(k_0, ..., k_n) := W(k_0 \to k_1)W(k_2 \to k_3)....W(k_{n-1} \to k_n)$$

Stabilität: Sei k und $l \in M$.

$$\sum_k W^{(k)(l)} exp(-\beta E^{(k)}) = exp(-\beta E^{(l)})$$

Dies heißt nichts anderes, als dass die in Kapitel 2.3.1 gegebene Wahrscheinlichkeitsverteilung einen Eigenvektor mit dem Eigenwert 1 zur Matrix W bildet [**29**]. Zur Vollständigkeit sei dabei noch gesagt, dass eine eigentlich „stärkere“ Aussage, welche öfter bei einer solchen Art von Algorithmen getestet wird, die der **Detailed Balance** ist.

$$W^{(k)(l)} exp(-\beta E^{(k)}) = W^{(l)(k)} exp(-\beta E^{(l)})$$

Unter Zuhilfenahme der Normierungsbedingung ist die Eigenschaft der Stabilität direkt darin enthalten, wie man leicht nachprüfen kann, indem man auf beiden Seiten über den Zustand k summiert.

$$\sum_k W^{(k)(l)} exp(-\beta E^{(k)}) = \underbrace{\sum_k W^{(l)(k)}}_{=1} exp(-\beta E^{(l)}) = exp(-\beta E^{(l)})$$

Hat man also einen Prozess gefunden, der diese Eigenschaften erfüllt, und erinnert sich nochmals an die in Kapitel 2.3.1 gegebene Wahrscheinlichkeitsverteilung P_K, so lässt sich diese, ausgehend von einer Anfangsverteilung $P_0 : M \to [0, 1]$, durch eine unendliche Anzahl an Ausführungen von W, beliebig genau darstellen, ohne die explizite Zustandssumme kennen zu müssen. Oder mathematisch präziser:
Sei

$$P^\infty := W^\infty P_0,$$

dann gilt

$$||P^\infty - P_K|| = 0,$$

wobei in unserem Fall P_K der Boltzmann-Verteilung entspricht. Aus diesem Grund wird vor jeder Messung eine Thermalisierung durchgeführt, deren Länge entsprechend gewählt werden muss, damit der obige Limes näherungsweise erfüllt ist.
Nach dieser kurzen Einführung in die Grundidee und den Aufbau von Markov-Ketten, wird im Folgenden noch kurz eine kleine Beschreibung der verwendeten Zufallsgeneratoren gegeben, bevor sich dem eigentlichen Algorithmus gewidmet werden kann.

4.1.1.3 Zufallsgeneratoren

Wie sich bei der genaueren Betrachtung der Implementierung zeigen wird, werden innerhalb des Programms Zufallszahlen beispielsweise dafür gebraucht, um das Update der Spin-Konfiguration durchführen zu können (siehe Kapitel 4.3). Zur Erzeugung von diesen wird ein Zufallszahlengenerator verwendet, wobei zwischen der Erzeugung von „echten“ Zufallszahlen und von Pseudozufallszahlen unterschieden wird.

Diese werden rein deterministisch über eine mathematische Funktion generiert, wohingegen für erstere die Kopplung an ein äußeres System, wie z.B. die Position des Cursors, die Prozessortemperatur oder aktuelle Systemzeit, genutzt wird. Da letzteres zu umständlich ist für die hiesigen Simulationen, werden im Rahmen dieser Thesis (ausgehend von der Code-Grundlage in [**9**]) zwei verschiedene Pseudozufallsgeneratoren verwendet.
Dabei handelt es sich zum Einen um einen *linearen Kongruenzgenerator* [**30**], dessen Abfolge an Zufallszahlen folgendermaßen generiert wird

$$x_{n+1} = (a \cdot x_n + c) \mod m.$$

Dabei werden in dieser Thesis zwei verschiedene Sätze von Parametern verwendet und zwar:

$$\begin{aligned} a &= 16807, \quad c = 0, \quad m = 2^{31} - 1 \\ a &= 48721, \quad c = 0, \quad m = 2^{31} - 1 \end{aligned}$$

Beim zweiten verwendeten Algorithmus handelt es sich um einen *Substract-with-borrow-Generator*, welcher rekursiv eine gleich-verteilte Zahl erzeugt und für dessen genauerer Beschreibung, aufgrund der doch sehr umfangreichen mathematischen Definitionen, auf [**31**] verwiesen sei. Bei der Simulation werden dabei die folgenden Parameter verwendet:

$$b = 2^{32} - 5, \quad r = 43, \quad s = 22$$

In der späteren Simulation werden die Zufallszahlen für das Update der Spin-Konfiguration innerhalb eines *threads* durch den linearen Kongruenzgenerator erzeugt, wobei der erste Satz an Parametern Verwendung findet. Die aktuelle verwendete Zufallszahl wird abgespeichert und beim nächsten Aufruf der Funktion $simpleRandom-Integer0$ als Startwert für die neue Generierung der Zufallszahl genutzt. Zur anfänglichen Initialisierung dient der Marsaglia-Zaman-Generator. Diese Vorgehensweise ist aus [**9**] übernommen und stammt konzeptionell aus [**32**].

4.1.2 Metropolis-Algorithmus

Bei dem hier verwendeten *Metropolis-Algorithmus* handelt es sich um ein Verfahren, bei welchem das Update eines einzelnen Spins einer Konfiguration σ hin zu einer neuen Konfiguration σ' überprüft wird.
Dabei lässt sich Akzeptanz-/Übergangswahrscheinlichkeit der/zur neuen Spin-Konfiguration folgendermaßen definieren [**14**]

$$W[\sigma \to \sigma'] = \min\left[1, \exp\left(-\beta\left(H(\sigma') - H(\sigma)\right)\right]\right. . \tag{4.1.5}$$

Analog folgt aus der Wahrscheinlichkeitserhaltung, dass sich die Wahrscheinlichkeit für den Verbleib im alten Zustand so errechnen lässt

$$W[\sigma \to \sigma] = 1 - \min\left[1, \exp\left(-\beta\left(H(\sigma') - H(\sigma)\right)\right]\right., \tag{4.1.6}$$

wobei es sich in den beiden Gleichungen bei H um die Energiefunktion und bei β um die dimensionslose inverse Temperatur handelt.
Vorteil dieser Art von Algorithmus ist, dass durch die so gewählte Definition der Übergangswahrscheinlichkeit in Gleichung (4.1.5) bereits die Boltzmann-Gewichte einer Konfiguration Verwendung finden. Dass der so gewählte Algorithmus auch die geforderten Bedingungen eines Markov-Prozesses erfüllt, lässt sich leicht zeigen und kann in [**14**] nachgelesen werden.

4.2 Multispin-Coding

Bevor sich der eigentlichen Implementierung des Algorithmus gewidmet werden kann, soll noch kurz die Technik des Multispin-Codings besprochen werden, wobei es sich um eine sehr effiziente und schnelle Methode der Speicherung von Spin-Systemen handelt [**33**].
Wie mittlerweile mehrfach erwähnt, handelt es sich bei dem hier untersuchten Modell um das 3-Zustands-Potts-Modell, welches drei mögliche Realisierungen für die Einstellung des Spins enthält. Um nun die Information des Gitters mit den einzelnen Gitterpunkten, die sich alle in einem der möglichen Zustände befinden, abzuspeichern, könnte man ein entsprechend großes, zwei- oder dreidimensionales (je nachdem ob in 2- oder 3D), Array anlegen und dort hinein beispielsweise den zugehörigen Winkel schreiben. Allerdings bräuchte man dann den ganzen Speicherbereich einer *DOUBLE*-Variable für nur diese eine Information. Ein deutlich bessere Möglichkeit ist es da, nur den n-Wert des Zustands aus Gleichung (2.2.1) abzuspeichern, da dabei schon ein kleinerer Datentyp reicht. Die effizienteste Lösung ist allerdings die Information des Zustands in den einzelnen Bits eines Wortes zu decodieren, da man gleich mehrere Zustände speichern kann anstatt wie sonst nur einen einzigen. Betrachtet man z.B. das Ising-Modell, wo n nur die Werte 0 und 1 annehmen kann, welche für *Spin-up* bzw. *Spin-down* stehen, so lässt sich innerhalb einer *SHORT*-Variable (16 bit) die Information von 16 verschiedenen Spins abspeichern, da man nur schauen muss, ob beispielsweise am fünften Bit eine 0 oder 1 steht (analog für die anderen 15 bit).
Analog kann man nun auch beim Potts-Modell verfahren, wobei allerdings ein einzelner Bit nicht mehr ausreicht, um zwischen den drei Zuständen unterscheiden zu können. Ein weiterer Vorteil des Multispin-Codings besteht darin, dass mittels *Bitwise*-Operatoren sehr effizient Rechnungen zwischen verschiedenen Spins durchgeführt werden können, wie es z.B. bei der Berechnung der Energiedifferenz benötigt wird. Auf die genaue Umsetzung von diesem Prinzip am eigentlichen Modell wird im folgenden Abschnitt eingegangen.

4.3 Implementierung

Nachdem nun alle einzelnen Bausteine besprochen wurden, kann sich in diesem Abschnitt der eigentlichen Implementierung des Algorithmus gewidmet werden, damit dem Leser verdeutlicht wird, wie die Ergebnisse in Kapitel 5 erzeugt werden. Dazu muss ein Objekt *gitter* der Klasse *Lattice* angelegt und die beiden Funktionen $gitter.updateSystem()$ und $gitter.observeTotalMagnetization()$ verwendet werden, welche ein Update der Spin-Konfiguration durchführen bzw. die Gesamtmagnetisierung des Systems berechnen. Für eine deutlich ausführlichere Information dazu sei nochmals auf den Ausgangscode der Thesis in [**9**] verwiesen, welche auch als Grundlage für die hiesigen Erklärungen zum Aufbau der Simulation dient, die mit den sich aus dem Potts-Modell ergebenden Änderungen/Erweiterungen kombiniert werden.

4.3.1 Gitteraufbau

Die Grundidee der aus [**9**] übernommenen Gitterstruktur, welche schematisch in Abbildung 4.1 dargestellt ist, basiert darauf, das Gitter in der x-y-Ebene in Blöcke aufzuteilen, die aus je 32x32 Spins bestehen. Ein solcher Block wird abermals in 64 Teilgitter unterteilt, welche alle aus 4x4 Spins bestehen. Aufgrund dieses Gitteraufbaus ergeben sich für die später durchgeführten Simulationen Restriktionen, da L_1 und L_2 immer Vielfache von 32 sein müssen. Die 64 (4x4)-großen Untergitter pro Block können selbst wiederum in einem Array, bestehend aus 64 Speicherstellen, welche jeweils aus einem eigens definierten *Super-Spin*-Datentyp bestehen, der aus zwei *signed-short*-Variablen zusammengesetzt ist, auf dem *Global Memory* abgespeichert werden. Die doppelte Anzahl an notwendigen Variablen im Vergleich zum Ising-Modell ergibt sich dadurch, dass beim hiesigen Potts-Modell drei Spinzustände möglich sind, zu deren Unterscheidung ein zweiter Bit notwendig ist. So ergibt sich für die Codierung (die n-Werte entsprechen denen aus Gleichung (2.2.1)) [**34**]:

Tabelle 4.1: *Codierung der Spinzustände.*

n	Bit 1	Bit 2
0	0	0
1	1	0
2	0	1

Ausgehend davon kann die Information der beiden Bits eines Spinzustands mittels Multispin-Coding im neuen Datentyp abgelegt werden, dabei wird Bit 1 jeweils in der ersten *short*-Variable und Bit 2 in der zweiten gespeichert (die gesamte Information eines (4x4)-Untergitters passt so in eine *Super-Spin*-Variable).
Der Vorteil einer solchen Konstruktion besteht darin, dass die gesamte Information (jeweils 128 Bytes ($= 64 \cdot 16$ bit)) aller ersten bzw. zweiten *short*-Variablen eines Blocks genau während eines einzelnen Speicherzugriffs auf den Global Memory transferiert werden kann (siehe Kapitel 3), was die Rechenzeit optimiert [**9**]. Die dritte Dimension ergibt sich leicht durch das Übereinanderlegen von L_3 solch zweidimensionalen Gittern, wobei es nur zu einer Wechselwirkung mit dem direkt darüber und darunter liegenden Gitterpunkt kommt.

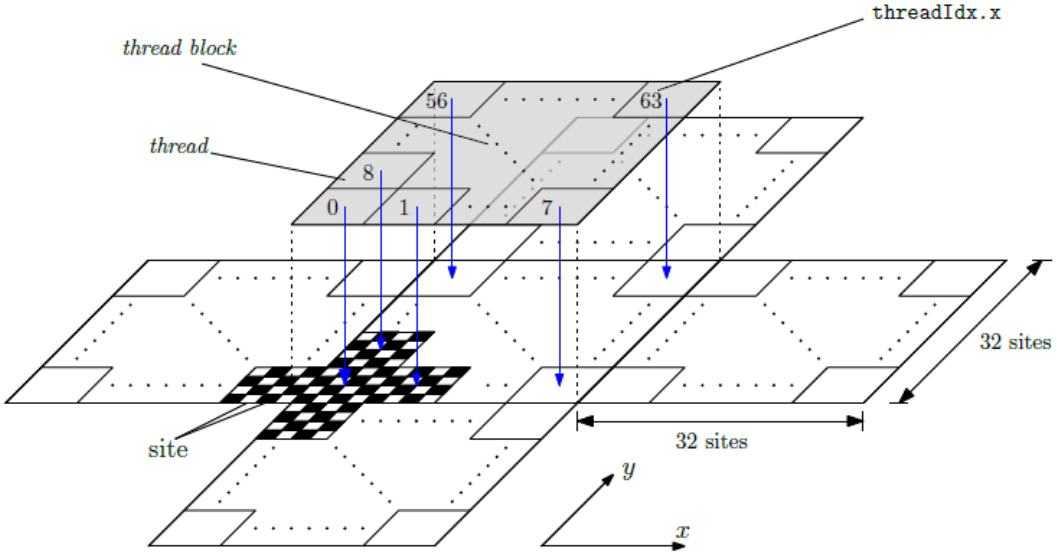

Abbildung 4.1: *Schematischer Aufbau des in der Simulation verwendeten Gitters (Grafik aus* [**9**]*).*

Innerhalb eines einzelnen (4x4)-Untergitters lässt sich mittels Bitwise-Operatoren besonders schnell und effizient über folgenden Ausdruck auf die abgespeicherte Teilinformation eines einzelnen Spins zugreifen

$$(sub_lattice.a \quad \& \quad (1 << (x + y * 4))) >> (x + y * 4)$$

oder

$$(sub_lattice.b \quad \& \quad (1 << (x + y * 4))) >> (x + y * 4),$$

wobei x und y, die Koordinaten des Untergitters, Werte von 0 bis 3 annehmen können [**35**] und $.a$ bzw. $.b$ für die erste bzw. zweite *short*-Variable der jeweiligen Speicherstelle innerhalb des Arrays vom Typ *Super-Spin* steht.
Ein solch ganzer Gitterblock wird von einem *thread block*, bestehend aus 64 *threads*, die jeweils für ein (4x4)-Untergitter verantwortlich sind, repräsentiert.
Wird beispielsweise für die Energieberechnung der n-te ($n \in \{0, ..., 15\}$) Spinzustand im m-ten ($m \in \{0, ..., 63\}$) (4x4)-Untergitter des k-ten Blocks benötigt, dann muss das Array, welches den k-ten Block repräsentiert, geladen und in diesem dann zur *Super-Spin*-Variable der m-ten Speicherstelle gegangen werden. Mittels der Bitwise-Operatoren und dem obigen Zusammenhang wird sowohl in der ersten als auch in der zweiten *short*-Variable des selbst definierten Datentyps das n-te Bit logisch mit einer n-malig bitwise nach links verschobenen 1 verknüpft und das Resultat an die 0-te Stelle der Variable geschoben, sodass diese insgesamt den Wert 1 oder 0 hat, je nachdem was vorher das Bit an der n-ten Stelle für einen Wert hatte. Das Ergebnis wird in einer Variable (ebenfalls vom Typ *Super-Spin*), die für den aktuellen Spin steht, abgespeichert. Final werden dann mittels einer if-Abfrage die Werte der ersten

und zweiten *short*-Variable des aktuellen Spins verglichen und daraus über Tabelle 4.1 der eigentliche Wert des Spins in der neuen Variable *qown* abgespeichert. Analog wird auch für die 4 (6) Nachbarspins vorgegangen, dessen decodierter Spin-Wert dann in einem Array *neighbourspin* vom Typ *short* abgelegt wird. Anschließend kann die momentane Energiefunktion H des eigenen Spins und seiner Nachbarn über eine geschickte Kombination von Bitwise-Operatoren berechnet werden, indem eine Schleife den Wert *qown* mit den 4 (6) Einträgen des *neighbourspin* Arrays so vergleicht, dass im Fall von gleichen Spins eine 1 zur Energiefunktion addiert wird und andernfalls eine 0. Selbiges passiert dann auch mit dem möglichen neuen, per Zufall bestimmten, Kandidaten, sodass, wie im nachstehenden Kapitel beschrieben, die Update-Wahrscheinlichkeit über einen Vergleich der Energien berechnet werden kann. Abschließend sei hierbei angemerkt, dass es sich bei dem eben gegebenen Beispiel nur um eine Verdeutlichung der Vorgehensweise handelt und daher auf konkrete Formeln der Bitwise-Verknüpfungen verzichtet wurde.
Zur Vereinfachung und effizienteren Durchführung späterer Berechnungen ist das Gitter in ein Schachbrettmuster unterteilt (siehe Abb. 4.1), indem die einzelnen Gitterpositionen in *gerade* und *ungerade* eingeteilt sind. Dabei gilt, dass es sich um eine gerade (ungerade) Position handelt, wenn die Summe der einzelnen Koordinaten x_i ($i = 1, 2$ in 2D und $i = 1, 2, 3$ in 3D) gerade (ungerade) ist. Eine solche Unterteilung ermöglicht beim Update der Spin-Konfigurationen das parallele Updaten aller geraden bzw. ungeraden Spins, ohne dass die nächsten Nachbarn sich ändern.

4.3.2 Update der Spin-Konfiguration

Ausgehend von der obigen Gitterdefinition kann nun das Update einer Konfiguration durchgeführt werden. Entsprechend des Schachbrettmusters wird das Update für die geraden und ungeraden Spins sequentiell durchgeführt, weshalb der zu betrachtende Energieunterschied beim lokalen Update eines einzelnen Spins auch nur von dessen nächsten Nachbarn (die sich während des Updates nicht ändern) und diesem selbst abhängt. Für das lokale Update an sich wird, nachdem H des aktuellen Spins und dessen Nachbarn, entsprechend der im vorherigen Abschnitt besprochenen Vorgehensweise, gebildet wurde, zufällig als neuer Kandidat einer der drei möglichen Spinzustände erzeugt und dann H' bestimmt, sodass die Akzeptanzwahrscheinlichkeit über Gleichung (4.1.5) errechnet werden kann. Solange diese größer-gleich als eine mittels Zufallsgenerator erzeugte Zufallszahl im Intervall [0,1] ist, kommt es zum Wechsel des Spinzustands. Zur Energiefunktion sei hierbei nochmal gesagt, dass, obwohl das *Vektor-Potts-Modell* simuliert werden soll, zur Berechnung der Energiedifferenz die des *Standard-Potts-Modells* verwendet wird, da es physikalisch keinen Unterschied macht (siehe Anhang), aber eine Delta-Distribution Rechenzeit effizienter zu berechnen ist als der Kosinus und gut durch Bitshift-Operatoren ausgedrückt werden kann, was nochmal eine Steigerung in der Effizienz hervorruft.
Damit dies reibungslos funktionieren kann, werden für einen einzelnen Spin der gesamte Gitterblock sowie alle 4 bzw. 6 (je nach Dimension) angrenzenden Gitterblöcke, unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen, in den *Shared Memory* geladen, da es, wie in Abbildung 4.1 zu sehen, auch passieren kann, dass

der nächste Nachbar eines Spins im nächsten Gitterblock abgespeichert ist. Nach Beendigung eines solchen Updates wird die resultierende Spin-Einstellung wieder in das *Global Memory* geschrieben.

4.3.3 Berechnung der (Gesamt-) Magnetisierung

Zur Berechnung der Gesamtmagnetisierung, auf welche später die *main* zugreift, um alle weiteren Observablen bestimmen zu können, wird zunächst die Magnetisierung auf den einzelnen (4x4)-großen Untergittern mittels der Funktion $totalMagneti-zationBlockWide2(3)D$ bestimmt. Da es sich dabei, wie in Gleichung (2.3.4) zu erkennen, um eine komplexe Größe handelt, wird dies für Real- und Imaginärteil getrennt durchgeführt. Die so erhalten Zwischenergebnisse werden anschließend in den *Shared Memory* geschrieben, von wo aus der erste *thread* eines halben *warps* (also jeder 16.), die Magnetisierungen der Untergitter von diesem (halben *warp*) aufsummiert. Anschließend summiert der erste *thread* die Magnetisierung von allen halben *warps* eines Blocks auf und schreibt diese in den *Global Memory*. Von dort aus werden die einzelnen realen ($magnetization_block_wide_d_real$) und imaginären ($magnetization_block_wide_d_imaginär$) Block-Magnetisierungen in den *host*-Speicher geschrieben, sodass auf dem *host* aus den einzelnen Größen die totale Magnetisierung berechnet werden kann. Abschließend wird in diesem Schritt auch der Betrag der bis dahin noch komplexwertigen Magnetisierung gebildet.

Kapitel 5

Resultate

Im diesem Kapitel soll zunächst eine qualitative Analyse des Modells in zwei und drei Dimensionen vorgenommen werden. Dies dient dazu, dass sich von der prinzipiellen Funktionalität des Programms überzeugt werden kann und erste wesentliche, durch die Dimension bedingte Unterschiede herausgearbeitet werden können, um einen direkten Vergleich der beiden Simulationen vorzunehmen.
Innerhalb des zweiten Teils geht es um eine quantitative Untersuchung des Modells, durch welche die kritische Temperatur und im zweidimensionalen Fall auch weitere modell-spezifische Größen bestimmt werden können, um auch auf Grundlage von Daten, welche mit Literaturwerten verglichen werden können, eine Bestätigung der Richtigkeit der Simulation zu erhalten.

5.1 Qualitative Analyse und Gegenüberstellung des 3-Zustands-Potts-Modells in zwei und drei Dimensionen

Wie schon in einem früheren Abschnitt erwähnt, soll im zweidimensionalen Fall ein Phasenübergang zweiter Ordnung vorliegen, währenddessen beim dreidimensionalen Modell ein Übergang erster Ordnung vorliegt. Dieser doch sehr markanten Unterschied sollte schon bei einer qualitativen Analyse, auch wenn die Simulation immer ein endliches Gitter zur Grundlage hat, was zu einer gewissen Verschmierung von Unstetigkeiten führt, zu erkennen sein. Dazu sollen im Folgenden verschiedene Gittergrößen Betrachtung finden.

5.1.1 Das 2D-Modell

Zur Aufnahme der Datenpunkte ist die Simulation für den zweidimensionalen Fall auf dem *GIANT*-Cluster der Arbeitsgruppe ausgeführt worden, welcher mit 24 Grafikkarten vom Typ *Nvidia GTX 980 Ti* ausgestattet ist. Da teilweise sehr große Gitter zu simulieren sind, was auf eine Begrenzung im Code zurückzuführen ist (vgl. Kapitel 4), ist mit einer langen Thermalisierung (25000 Monte-Carlo-Steps vor jeder

eigentlichen Messung eines Datenpunkts) gearbeitet worden. Zur Bestimmung der Magnetisierung bzw. Potenzen von dieser, aus denen die anderen zu untersuchenden Größen abgeleitet werden können, werden pro Datenpunkt nach der Thermalisierung 10000000 Konfigurationen erstellt, wovon jede 100. gemessen wird. Aus allen gemessenen Konfigurationen pro β wird dann ein Mittelwert erzeugt. Die Schrittweite bei den durchgeführten Simulationen entspricht dabei $\Delta\beta = 0,005$.
Es sind sieben verschiedene Gittergrößen simuliert worden, von denen allerdings nur eine Auswahl von vier Größen im Folgenden betrachtet wird, da sonst die Abbildungen zu unübersichtlich werden.
Zunächst wird die Magnetisierung als Funktion der Temperatur betrachtet, wobei die Gitter in den Größen 64x64, 96x96, 128x128 und 256x256 betrachtet werden, wie auch bei fast allen anderen Betrachtungen der gesamten Auswertung.

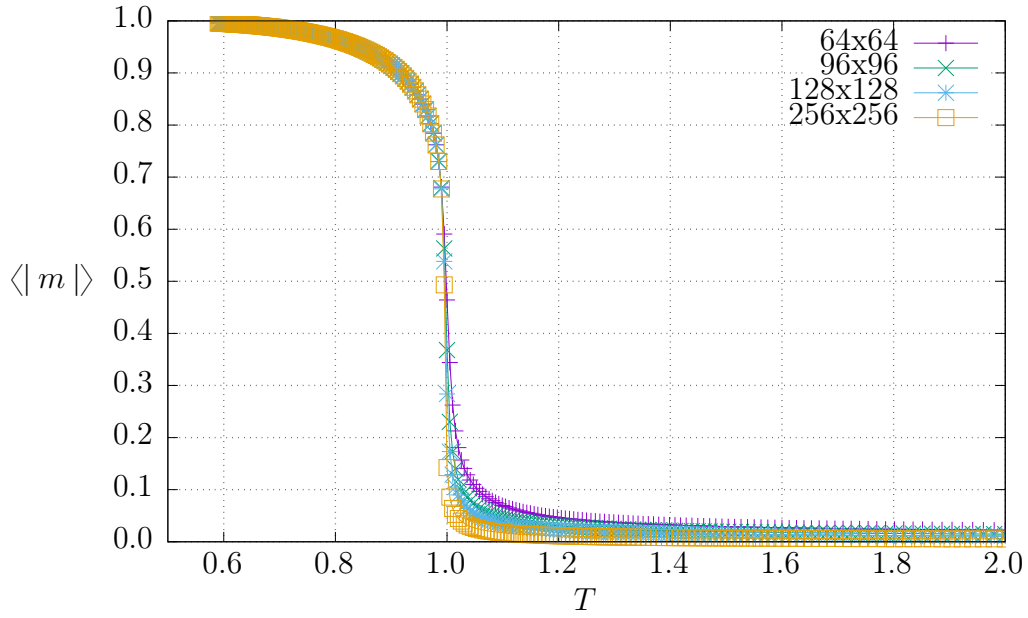

Abbildung 5.1: *Grafische Auftragung der mittleren Magnetisierung* $\langle | m | \rangle$ *als Funktion der dimensionslosen Temperatur* T *für die vier angegebenen Gittergrößen des Modells in 2D.*

Wie sich gut in Abbildung 5.1 erkennen lässt, ist die mittlere Magnetisierung bei großen Temperaturen ungefähr null und ab einer kritischen Temperatur, die in der Nähe von eins liegt, bzw. etwas darüber, kommt es zu einem Phasenübergang und die mittlere Magnetisierung erreicht schnell einen Wert von fast eins. Zudem lässt sich sehr gut erkennen, dass viele Messpunkte auch direkt im Übergang liegen und ein kontinuierlicher Wechsel von der ungeordneten zur geordneten Phase stattfindet, was für einen Phasenübergang zweiter Ordnung spricht. Beim Vergleichen der Ergebnisse von zwei- und dreidimensionaler Simulation im weiteren Verlauf des Kapitels wird dies noch deutlicher zu sehen sein.
Des Weiteren lässt sich feststellen, dass die Kurven von verschiedenen Gittern für

Temperaturen unterhalb von T_c dicht aufeinander liegen, wohingegen in dem Temperaturbereich kurz oberhalb des kritischen Punkts die Kurven doch hinreichend auseinander liegen und mit zunehmender Gittergröße der Anstieg immer steiler und „eckiger“ wird, was auch so zu erwarten ist, da man für $L \to \infty$ einen Ordnungsparameter erwartet, der von oberhalb kommend bis zum kritischen Punkt exakt null ist. Erst durch die endlichen Gittergrößen kommt es zum Aufweichen dieser Kante. Eine weitere Größe die es zu betrachten gilt, ist die Suszeptibilität, welche sich über Gleichung (2.3.5) aus den Messdaten berechnen lässt. Auch anhand dieser Größe lässt sich eine relativ genaue Bestimmung der kritischen Temperatur vornehmen oder wie in diesem Fall zumindest eine gute Abschätzung machen.

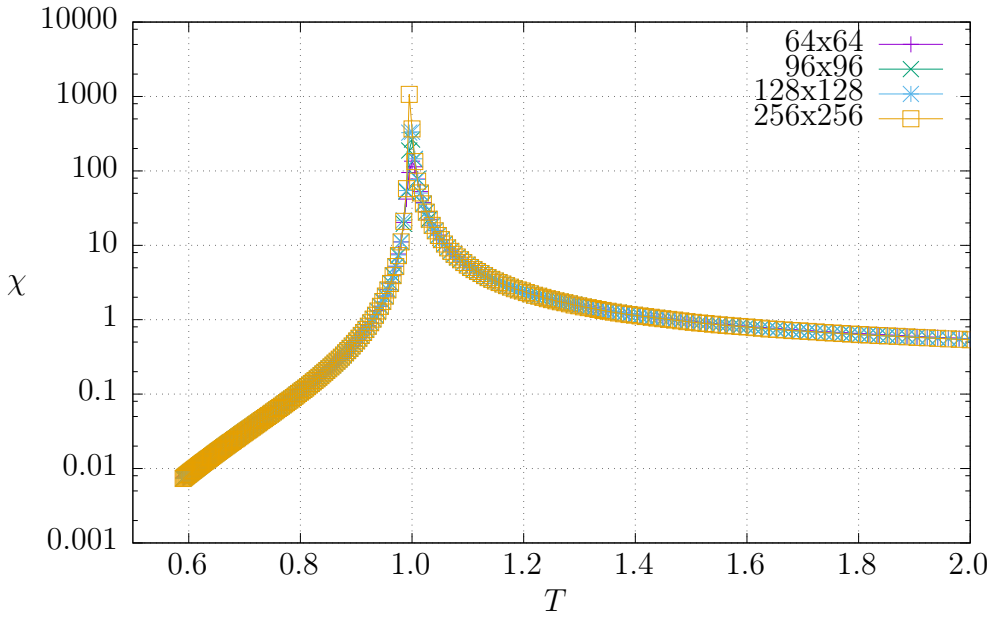

Abbildung 5.2: *Grafische Auftragung der Suszeptibilität χ als Funktion der dimensionslosen Temperatur T für die vier angegebenen Gittergrößen des Modells in 2D mit logarithmischer y-Achse.*

Wie zu erkennen ist, befindet sich die Suszeptibilität fast über den ganzen Bereich bei sehr kleinen Werten (Achtung, logarithmische y-Skala) und steigt sehr schnell an, wenn die Temperatur in die Nähe des kritischen Punkts gelangt (Divergenz bei Übergang zweiter Ordnung) und hat auch dort ihren Peak. Ausgehend von Abbildung 5.2 ist dieser auch wieder im Bereich von eins einzuordnen. Außerdem lässt sich feststellen, dass die Peaks sich alle deutlich in der Höhe unterscheiden, was natürlich eine direkte Konsequenz aus Gleichung (2.3.5) ist. Zudem ist bei einer genaueren Betrachtung, was durch die logarithmische Skalierung nicht ganz einfach ist, ersichtlich, dass die Peaks mit steigender Gittergröße immer näher an den kritischen Punkt des unendlichen Gitters wandern. Da dieser Effekt hier jedoch relativ gering ist, kann man sich ziemlich sicher sein, dass man diesen Punkt beim größten Gitter schon sehr gut getroffen hat. Bei den Finite-Size-Scaling Untersuchungen wird auf

dieses Phänomen nochmal eingegangen und sollte auch in den entsprechenden Plots besser zu erkennen sein.
Bei der als letztes zu betrachtenden Größe handelt es sich um die vierte Binderkumulante, welche über Gleichung (2.3.7) aus den Potenzen der Magnetisierung berechnet werden kann und in der nachstehenden Grafik zu sehen ist.

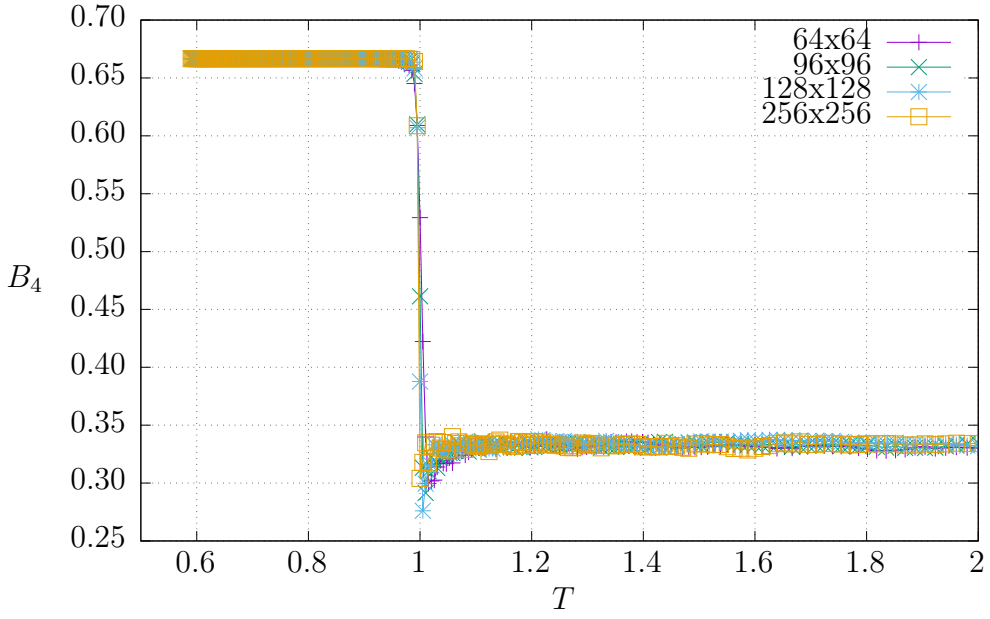

Abbildung 5.3: *Grafische Auftragung der Binderkumulante B_4 als Funktion der dimensionslosen Temperatur T für die vier angegebenen Gittergrößen des Modells in 2D.*

In Abbildung 5.3 lässt sich erkennen, dass die Binderkumulante, von $T = 0$ kommend, unterhalb von T_c konstant den Wert von $\frac{2}{3}$ hat. Am kritischen Punkt kommt es zu einem Sprung auf fluktuierende Werte im Bereich zwischen 0,3 und 0,35, die mit größer werdendem T gegen $\frac{1}{3}$ konvergieren, es werden also die beiden Grenzwerte für $T \to 0$ und $T \to \infty$, die man aus Kapitel 2.4.1.1 erwartet, erfüllt. Außerdem ist zu sehen, dass die Fluktuationen mit größerer Gittergröße weniger werden, was vielleicht auf den ersten Blick nicht zu erwarten ist, da man vermuten könnnte, dass bei größeren Gittern schwerer eine Thermalisierung herzustellen ist. Da aber bei der Simulation schon so eine hohe Thermalisierung eingestellt und auch überprüft wurde, ist dies eher zu vernachlässigen und das Verhalten lässt sich damit erklären, dass der Übergang bei zunehmender Gittergröße immer schärfer wird, wie man auch bei der Magnetisierung in Abbildung 5.1 gesehen hat. Anhand der Position des Sprungs kann man wieder darauf schließen, dass die kritische Temperatur im Bereich von 1 liegen muss. Des Weiteren lässt sich erkennen, dass auch im Bereich des Phasenübergangs Punkte zwischen 0,35 und 0,66 realisiert werden und kein richtiger Sprung stattfindet, was darauf hindeutet, dass es sich um einen Übergang zweiter Ordnung handelt.

5.1.2 Das 3D-Modell

Jetzt soll auch noch eine qualitative Analyse des dreidimensionalen Modells durchgeführt werden, wobei die selben Plots wie beim zweidimensionalen betrachtet werden. Die Simulationsparameter sind auch exakt gleich gewählt, allerdings sind diesmal auch nur die vier hier direkt zu sehenden Gittergrößen (64x64x64, 96x96x96, 128x128x128 und 160x160x160) simuliert worden.
Beginnend mit der mittleren Magnetisierung $<| m |>$, welche in Abbildung 5.4 zu sehen ist, stellt man fest, dass ein ähnlicher Verlauf wie bei den zweidimensionalen Untersuchungen zu erkennen ist.

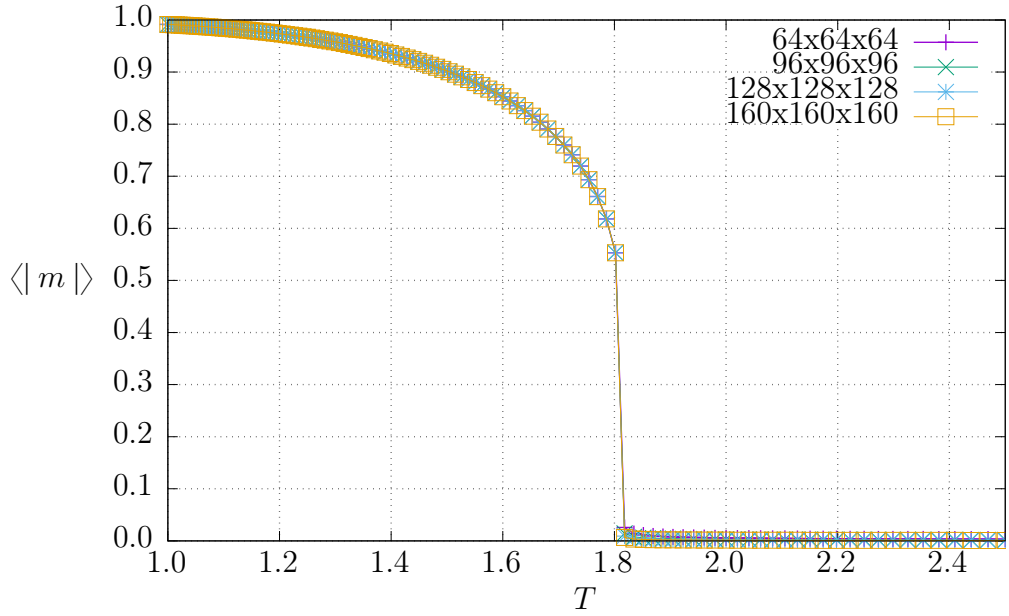

Abbildung 5.4: *Grafische Auftragung der mittleren Magnetisierung $\langle | m | \rangle$ als Funktion der dimensionslosen Temperatur T für die vier angegebenen Gittergrößen des Modells in 3D.*

Allerdings ist diesmal der plötzliche Anstieg der Magnetisierung bei kleiner werdenden Temperaturen deutlich schärfer und es ist bei der kritischen Temperatur, die sich zu ungefähr 1,8 abschätzen lässt, ein echter Sprung zu erkennen, was eindeutig für einen Phasenübergang erster Ordnung spricht. Zudem liegen über den ganzen Kurvenverlauf hinweg die Werte der einzelnen Gittergrößen schon ziemlich dicht aufeinander.
Als nächstes soll die vierte Binderkumulante betrachtet werden, welche in Abbildung 5.5 zu sehen ist. Die Suszeptibilität wird erst in der quantitativen Auswertung betrachtet, da bei dieser kein qualitativer Unterschied im Verlauf zum zweidimensionalen Modell festzustellen ist, außer dass die Peaks verhältnismäßig (zum Volumen) etwas kleiner sind, was einfach dadurch zu erklären ist, dass es sich, wie schon mehrmals gesagt, um einen Übergang erster Ordnung handelt, an dem die Suszeptibilität eigentlich nicht divergiert. Der doch vorhandene Peak wird erst durch die endliche

Gittergröße hervorgerufen (siehe Kapitel 2.4.1.2).
In der Grafik der Binderkumulante sieht man, dass die Kumulante von großen Temperaturen her kommend den Wert $\frac{1}{3}$ hat und am kritischen Punkt einen richtigen Sprung auf $\frac{2}{3}$ macht (es sind also wieder beide Grenzwerte enthalten), wie man es von einem Phasenübergang erster Ordnung erwartet.

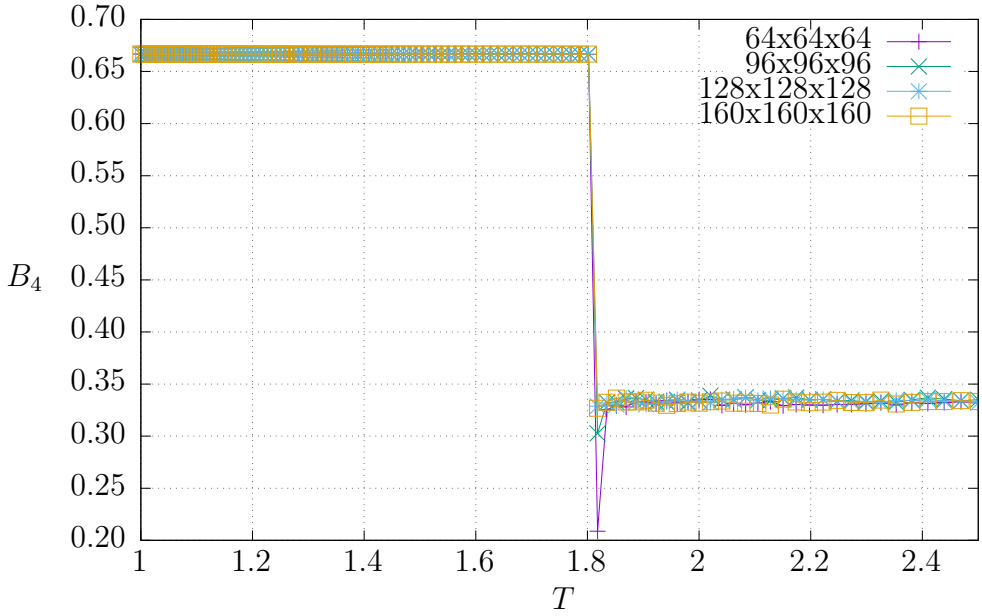

Abbildung 5.5: *Grafische Auftragung der Binderkumulante B_4 als Funktion der dimensionslosen Temperatur T für die vier angegebenen Gittergrößen..*

Die teilweise doch deutlich zu sehenden Durchschwinger, die gerade nicht bei den größten Gittergrößen auftreten, bei welchen man hätte vermuten können, Probleme bei der Thermalisierung zu haben, lassen sich eventuell damit erklären (vgl. Kapitel 2.4.1.2), dass es sich um einen Phasenübergang erster Ordnung handelt und dabei die Verteilung der Magnetisierung am kritischen Punkt nicht mehr durch eine einzige Gauß-Verteilung beschrieben werden kann, wie man auch in Abbildung 5.9 sehen kann, sodass in der Formel für die Bestimmung des Minimums der Kumulante Korrekturterme auftauchen (siehe Argumentation für V_L in **[36]** und die bereits im Theorie-Teil vermerkten Referenzen). Allerdings muss man sagen, dass eigentlich auch so ein Peak für die anderen Gitter zu erwarten wäre. Aufgrund des doch sehr scharfen Peaks kann es jedoch auch sein, dass der Peak bei dieser Größe nur bei einem minimal anderen T zu finden ist und daher hier nicht zu sehen ist, da diese Korrekturterme auch eine leichte Verschiebung des Peaks hervorrufen. Eine genauere Untersuchung findet nochmal in der quantitativen Analyse statt.

5.1.3 Vergleich

Jetzt soll das Modell in zwei und drei Dimensionen nochmal direkt gegenübergestellt werden, damit man sofort die Unterschiede von einem Phasenübergang erster und

zweiter Ordnung sehen kann. Auf die meisten Unterschiede ist im Teil vorher schon eingegangen worden, sodass hier nur noch die Plots verglichen werden sollen, anhand denen man direkt die Unstetigkeit sehen kann, bevor am Ende noch eine andere Art gezeigt wird, mit der man den Unterschied herausarbeiten kann.
Im Folgenden sind jetzt die grafischen Auftragungen der mittleren Magnetisierung $\langle | m | \rangle$ (Abb. 5.6)und der vierten Binderkumulante B_4 (Abb. 5.7) zu sehen, wobei diese jeweils mit Fehler dargestellt sind, um auch zu erkennen, dass z.B. gewisse Werte wirklich im Übergangsbereich liegen und nicht auch hätten außerhalb sein können.

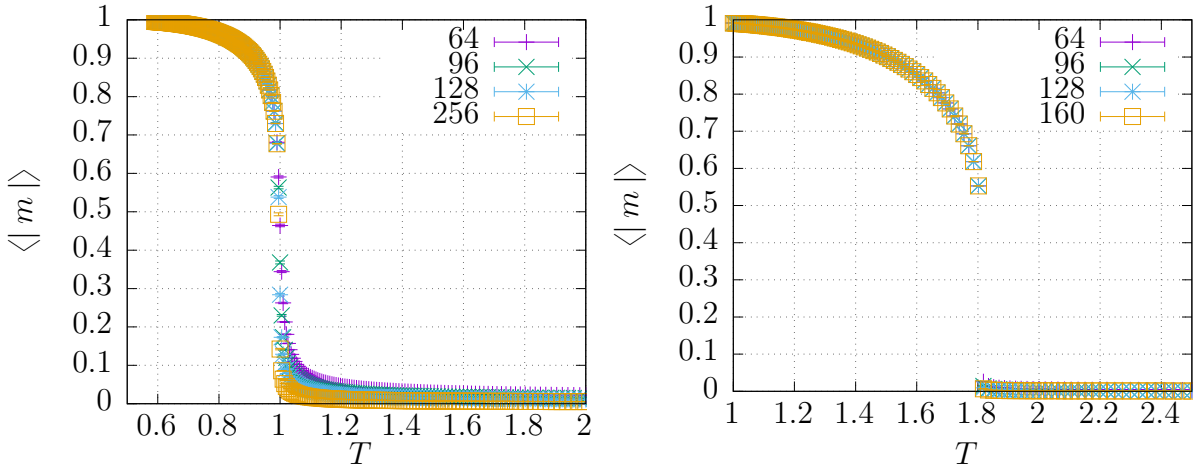

Abbildung 5.6: *Qualitativer Vergleich der mittleren Magnetisierungen des zwei- (links) und dreidimensionalen (rechts) Modells, die jeweils als Funktion der Temperatur aufgetragen sind.*

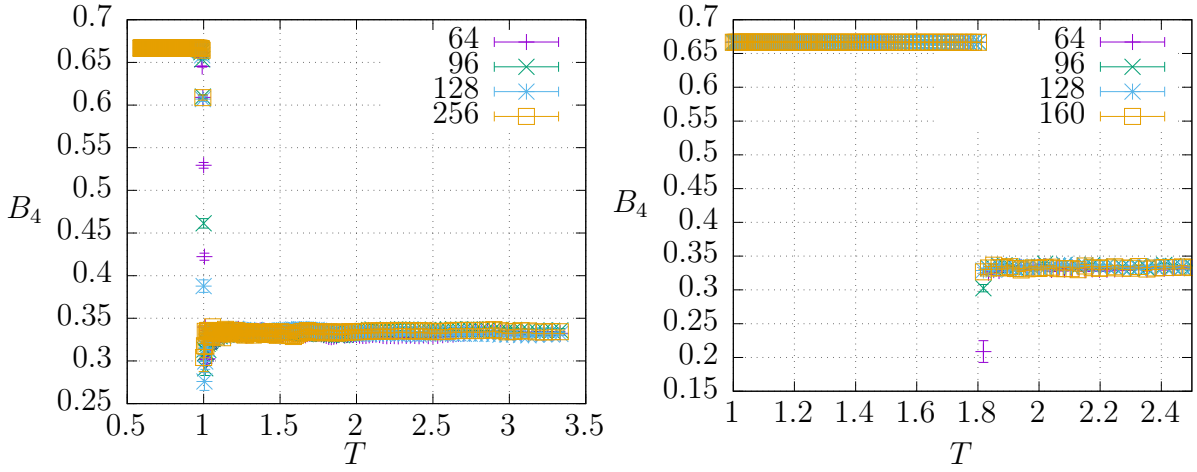

Abbildung 5.7: *Qualitativer Vergleich der vierten Binderkumulante des zwei- (links) und dreidimensionalen (rechts) Modells, die jeweils als Funktion der Temperatur aufgetragen sind.*

Auf die Bestimmung der Fehler wird im Teil der quantitativen Analyse eingegangen. Wie sich sehr schön erkennen lässt, sind in den unten stehenden Abbildungen sehr gut die wichtigen Merkmale des entsprechenden Übergangs zu erkennen. Bei beiden Observablen sieht man, dass der Übergang beim zweidimensionalen Modell (jeweils links) kontinuierlich ist, währenddessen beim dreidimensionalen Modell (jeweils rechts) ein richtiger Sprung zu beobachten ist.
Neben den obigen Vergleichen, anhand welcher man eigentlich ganz gut erkennen kann, dass es sich um unterschiedliche Arten des Phasenübergangs handelt und welcher in der entsprechenden Dimension vorliegt, gibt es noch eine weitere Möglichkeit dies zu untersuchen.
Dazu sind im Folgenden die Abbildungen 5.8 und 5.9 zu sehen, bei denen die Verteilung des Betrags der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen bei einer Gittergröße von 64x64 histogrammiert ist, jeweils für zwei und drei Dimensionen, beginnend mit dem zweidimensionalen Fall.

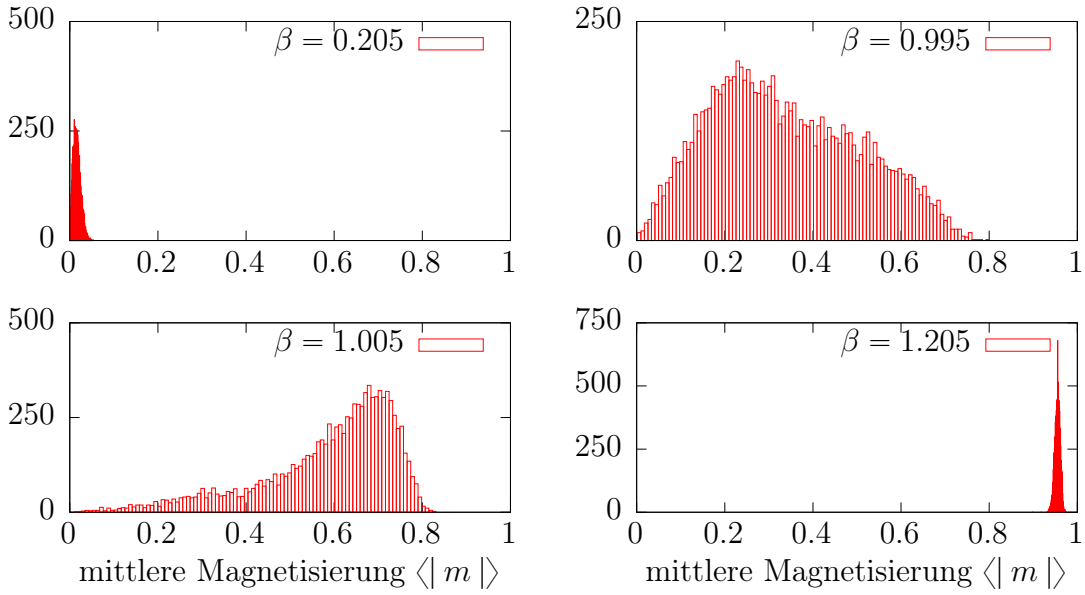

Abbildung 5.8: *Histogramme der mittleren Magnetisierung* $<| m |>$ *für vier verschiedene Temperaturen des 2-dimensionalen Modells, wobei* $\beta = 1,005$ *dem kritischen* β_c *entspricht (Gittergröße* 64x64*).*

Wie sich erkennen lässt, ist für hohe Temperaturen (kleine β) die mittlere Magnetisierung um null verteilt (Abb. 5.8 oben links). Mit sinkender Temperatur verschiebt sich diese Verteilung immer mehr hin zu einer größeren mittleren Magnetisierung (Abb. 5.8 oben rechts und unten links), bis sich näherungsweise eine Gauß-Verteilung um eins herum gebildet hat, für eine Temperatur deutlich unterhalb des kritischen Punktes (Abb. 5.8 unten rechts). Wichtig ist hierbei, dass auch beim Überschreiten der kritischen Temperatur die Magnetisierung kontinuierlich verteilt ist.
Etwas anders gestaltet sich dies im Fall des dreidimensionalen Modells in Abbildung

5.9. Auch dort ist eine Verteilung der mittleren Magnetisierung um null herum für große Temperaturen zu erkennen (oben links), allerdings verhält diese sich anders im weiteren Temperaturverlauf.
Mit sinkender Temperatur verschiebt sich die Verteilung hin zu größeren Magnetisierungen (Abb. 5.9 oben rechts), bis kurz vor den kritischen Punkt. Um diesen gibt es keine kontinuierliche Verschiebung wie bei dem zweidimensionalen Fall, sondern es taucht ein zweiter Peak auf, sodass zwei ineinander verschmierte Verteilungen zu erkennen sind (Abb. 5.9 Mitte links). Dabei ist der eine Peak bei einer Magnetisierung die fast null ist, wohingegen sich der andere Peak bei einem deutlich größeren $\langle | m | \rangle$ befindet. Es kommt also zu einer Verteilung, bei welcher die eine Hälfte der gemessenen Konfigurationen fast gar nicht magnetisiert ist, die andere hingegen schon, anstatt zu einem kontinuierlichen Übergang wie in Abb. 5.8. Dieses koexistente Verhalten ist signifikant für einen Phasenübergang erster Ordnung [**18**].

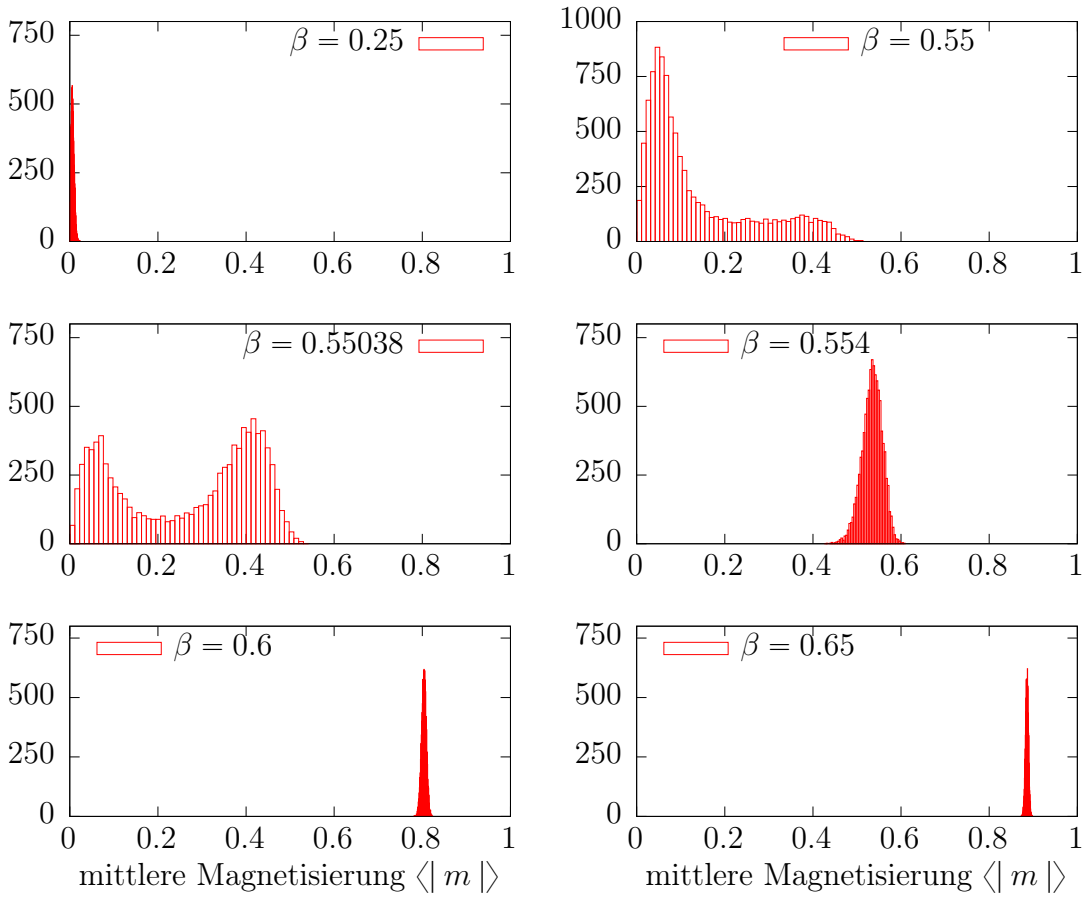

Abbildung 5.9: *Histogramme der mittleren Magnetisierung* $\langle | m | \rangle$ *für sechs verschiedene Temperaturen des 3-dimensionalen Modells, wobei* β_c *im Bereich von* $0,55$ *liegt (Gittergröße* 64x64*).*

Da die beiden Peaks auch ungefähr die gleiche Höhe haben, handelt es sich um eine Verteilung, die ziemlich nah am kritischen Punkt ist, weshalb man auch dies dazu

verwenden kann, um diesen abzuschätzen. Dies lässt sich vermutlich damit erklären, dass dabei jeweils die gleiche Boltzmann-Verteilung als Gewichtungsfaktor vorliegt, einmal nur mit positivem und einmal mit negativem Vorzeichen im Exponenten. Unterhalb des kritischen Punktes bei sinkender Temperatur (größer werdendes β), ist die mittlere Magnetisierung wieder 'normal' verteilt, also nur noch ein Peak zu erkennen (Abb 5.9 mitte rechts). Diese Verteilung wandert im weiteren Verlauf zu größeren Magnetisierungen, bis dahin, dass sie um eins herum verteilt ist(Abb. 5.9 unten).
Zusammengefasst lässt sich also sagen, dass man sehr gut verifizieren kann, dass beim 3-Zustands-Potts-Modell in zwei Dimensionen ein Phasenübergang zweiter Ordnung vorliegt, währenddessen es bei dem Modell in drei Dimensionen ein Übergang erster Ordnung ist, was noch einmal die Funktionalität des Codes bestätigt, sodass im Folgenden quantitative Untersuchungen des Modells durchgeführt werden können.

5.2 Quantitative Analyse des 3-Zustands-Potts-Modells in zwei und drei Dimensionen

In diesem Abschnitt wird eine quantitative Analyse des Modells in zwei und drei Dimensionen durchgeführt, um anschließend die gewonnenen Daten mit den Literaturwerten zu vergleichen. Im dreidimensionalen Fall wird die kritische Temperatur bestimmt und mit anderen Simulationsergebnissen verglichen, da wie bekannt, keine analytische Lösung des Systems vorliegt. Hingegen kann beim zweidimensionalen Modell die bestimmte Temperatur mit der in Gleichung (2.4.4) berechneten verglichen werden. Zudem sollen bei diesem Modell auch noch weitere Untersuchungen durchgeführt werden, um kritische Exponenten zu bestimmen, mit denen man die Anwendbarkeit von Finite-Size-Scaling Gesetzen (siehe Kapitel 2.4.2) auf das Modell verifizieren kann. Zunächst wird allerdings eine kurze Einführung in die Fehleranalyse gegeben, da es sich um korrelierte Prozesse handelt und dabei die Bestimmung des Fehlers etwas anders als gewohnt funktioniert.

5.2.1 Fehleranalyse

Wählt man bei einer Simulation die Anzahl an durchgeführten Messungen $\tilde{N}$, wobei die ersten m Messungen verworfen werden, da das System noch nicht Boltzmann verteilt ist, kann man den zu erwartenden Wert einer Oberservable A durch den folgenden Zusammenhang abschätzen.

$$< A > \approx \bar{A} = \frac{1}{\tilde{N} - m} \sum_{i=m+1}^{\tilde{N}} A_i \tag{5.2.1}$$

Nimmt man für N $(= \tilde{N} - m)$ eine hinreichend große Zahl, so lässt sich $\bar{A}$ als Gauss verteilt um $< A >$ annehmen, wodurch sich die Standardabweichung einfach über

den Zusammenhang

$$\sigma(\bar{A}) = \sqrt{\frac{\sigma^2(A)}{N}} \tag{5.2.2}$$

errechnen lässt, solange die einzelnen Ereignisse voneinander unabhängig erzeugt wurden [**15**]. Dabei gilt:

$$\sigma^2(A) =< A^2 > - < A >^2 \tag{5.2.3}$$

Aufgrund dessen, dass die in der Simulation erzeugten Konfigurationen innerhalb einer Markov-Kette nicht unabhängig sind, kann Gleichung (5.2.2) nicht einfach ohne weiteres benutzt werden, sondern muss durch den folgenden Ausdruck errechnet werden

$$\sigma^2(\bar{A}) = \frac{2\tau_{int}\sigma^2(A)}{N} \quad , \tag{5.2.4}$$

wobei es sich bei τ_{int} um die integrierte Autokorrelationszeit handelt, die einem Maß entspricht, wie stark abhängig die erzeugten Konfigurationen untereinander sind, da von den eigentlichen N Ereignissen, nur

$$N_{unabhängig} = \frac{N}{2\tau_{int}} \tag{5.2.5}$$

wirklich statistisch unabhängig sind [**37**]. Für eine genauere Einführung sei hier auf [**15**], [**37**] oder [**29**] verwiesen.
Da bei Simulationen von Quantenfeldtheorien die Berechnung der Autokorrelationszeit oftmals zu zeitaufwendig ist [**37**] und auch in dieser Arbeit nicht vollführt werden soll, sind im Folgenden kurz zwei Verfahren skizziert, mit denen Autokorrelationseffekte verringert werden können, welche beide aus den auch oben schon angegebenen Quellen stammen.

5.2.1.1 Binning

Bei dieser Methode werden die Messwerte A_i zu Bins oder Blocks der Größe N_b $(= N/k)$ zusammengeführt, sodass eine neue Messreihe A_j^* entsteht, welche aus dem Mittelwert von k nebeneinander liegenden Messwerten A_i der ursprünglichen Messreihe besteht und folgendermaßen berechnet werden kann:

$$A_j^* = \frac{1}{N_b} \sum_{i=m+N_b(j-1)+1}^{jN_b} A_i \tag{5.2.6}$$

Für hinreichend große N_b können die so erzeugten Werte A_j^* als statistisch unabhängig angenommen werden, sodass deren Fehler $\sigma(\bar{A})$ über Gleichung (5.2.2) und der Benutzung von A_j^* berechnet werden kann [**15**]. Allerdings darf dabei N_b nicht zu klein gewählt werden, da sonst die Korrelationen nicht ausreichend berücksichtigt werden.

5.2.1.2 Jackknife

Eine weitere Methode ist das sogenannte Jackknife-Verfahren, wobei, bestehend aus den N Messwerten der Messreihe A_i, neue N Messwerte erzeugt werden, indem man den n-ten Wert der Reihe entfernt und den Mittelwert der verbleibenden $n-1$ Messungen bildet. Die Standardabweichung für den Mittelwert der ursprünglichen Verteilung kann man dann über folgende Gleichung errechnen [**37**].

$$\sigma(\bar{A}) = \sqrt{\frac{N-1}{N}\sum_{n=1}^{N}(A_n - \bar{A})^2} \tag{5.2.7}$$

In der Praxis, und so auch in dieser Thesis, werden die beiden eben beschriebenen Verfahren kombiniert, um eine möglichst gute Abschätzung des Fehlers treffen zu können, wobei dies allerdings stark von den gewählten Parametern, wie z.B. der Größe der Bins, abhängt. Dazu werden nicht, wie oben beschrieben, einzelne Werte A_i aus der Menge der Messwerte genommen, sondern erst Bins gebildet und dann der Jackknife-Fehler unter Herausnahme eines ganzen Bins errechnet.

5.2.1.3 Bestimmung der optimalen Bin-Größe

Da der Fehler auch von der gewählten Größe der Bins abhängt, also effektiv auch von der Anzahl an herausgenommenen Spins beim Jackknife, sollte man sich die Standardabweichung σ der mittleren Magnetisierung $\langle | m | \rangle$ als Funktion der Bin-Größe anschauen, was im Folgenden für das zwei- und dreidimensionale Gitter (jeweils 64 als Kantenlänge) gemacht ist. Dabei ist zu beachten, dass bereits der Algorithmus so verändert wurde, dass nur jede 100. Konfiguration gemessen wird, um Autokorrelationen weiter zu reduzieren.

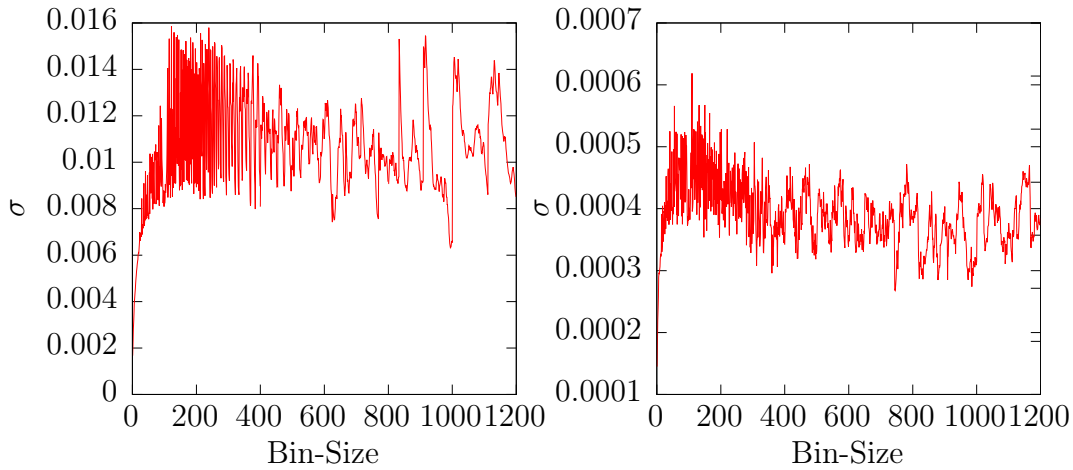

Abbildung 5.10: *Grafische Auftragung der Standardabweichung σ des mittleren Magnetisierung $\langle | m | \rangle$ gegen die Bin-Größe, um diese abschätzen zu können. Links ist 2D ($T = 1,005$) und rechts 3D ($T = 1,818$).*

Wie sich bei beiden gut erkennen lässt, steigt der Fehler erst schnell an, erreicht dann aber eine Art Plateau, auf welchem dieser in einem gewissen Schwankungsbereich konstant bleibt. Die etwas heftigeren Schwankungen im hinteren Bereich lassen sich dadurch erklären, dass bei zu großer Bingröße irgendwann die Statistik nicht mehr groß genug ist. Insgesamt lässt sich aus Abbildung 5.10 allerdings schließen, dass man die Bin-Größe im Bereich von 100 wählen kann, ohne den Fehler zu unterschätzen. Ein weiterer zu beobachtender Aspekt ist, dass die Fehler beim dreidimensionalen deutlich kleiner ausfallen als bei dem Modell in zwei Dimensionen. Dies lässt sich damit begründen, dass die Mittlung über viel mehr Freiheitsgerade stattfindet, sodass der Fehler reduziert wird.

5.2.2 Das 2D-Modell

Im Folgenden können nun einige quantitative Größen untersucht werden, um auch einen Eindruck bekommen zu können, wie gut die Implementierung geklappt hat und wie man die Güte der erhaltenen Größen einzuschätzen hat. Zudem werden einige Untersuchgen gemacht, um zu verstehen, inwiefern es möglich ist, zumindest theoretisch, das Verhalten einiger Größen unabhängig von der verwendeten Skala zu machen und wie weit sich dies praktisch auch wahrnehmen lässt.

5.2.2.1 Bestimmung von T_c

Wie bei der qualitativen Untersuchung des Modells bereits festgestellt, kann man die Temperatur am kritischen Punkt bereits über die Stellen, an denen es zu einem plötzlichen Anstieg der Magnetisierung oder Binderkumulanten kommt, grob abschätzen. Außerdem bietet sich die Möglichkeit, den Peak der Suszeptibilität zu fitten und darüber T_c zu bestimmen. Da aber beim zweidimensionalen Fall ein Phasenübergang zweiter Ordnung vorliegt und die Binderkumulante sich deshalb stetig ändert, kann man auch den Schnittpunkt der Kumulanten von verschiedenen Gittergrößen bestimmen, da dies ein universeller Punkt ist, also nicht von der Gittergröße abhängen darf. Das heißt, dass sich bei T_c alle Binderkumulanten in einem Wert B_4^* schneiden müssen (siehe Kapitel 2.4.2). Der Vorteil gegenüber dem Bestimmen des Peaks bei der Suszeptibilität liegt dabei darin, dass es keine Abhängigkeit von der Gittergröße geben darf und man so den Punkt viel genauer bestimmen kann, als wenn der Peak mit steigender Gittergröße immer näher an den kritischen Punkt heran läuft. Aus diesem Grund sollte man auch immer, falls möglich, die kritische Temperatur über solch ein universelles Verhalten bestimmen.
Dazu ist nachstehend eine Abbildung zu sehen, welche eine Vergrößerung der Grafik 5.3 darstellt, um diesen Schnittpunkt zu bestimmen.
Wie sich sehr gut erkennen lässt, haben die Binderkumulanten der unterschiedlichen Gittergrößen im Bereich des Phasenübergangs eine unterschiedliche Steigung (je größer das Gitter, desto größer die Steigung), schneiden sich aber trotzdem alle in einem Punkt. Dieser Schnittpunkt liegt bei einer Temperatur von $T = T_c \approx 0.995 \pm 0,001$ und einer Binderkumulante B_4^* von ungefähr $0,608 \pm 0,009$ (zum Vgl. $T_{c,Lit} \approx 0,99497$ und $B_{4,Ref}^* \approx 0,613 \pm 0,003$). Zudem ist aufgrund der eingezeichne-

ten Fehlerbalken gut zu erkennen, dass selbst die Werte inklusive der Fehler noch einen gemeinsamen Schnittpunkt besitzen.

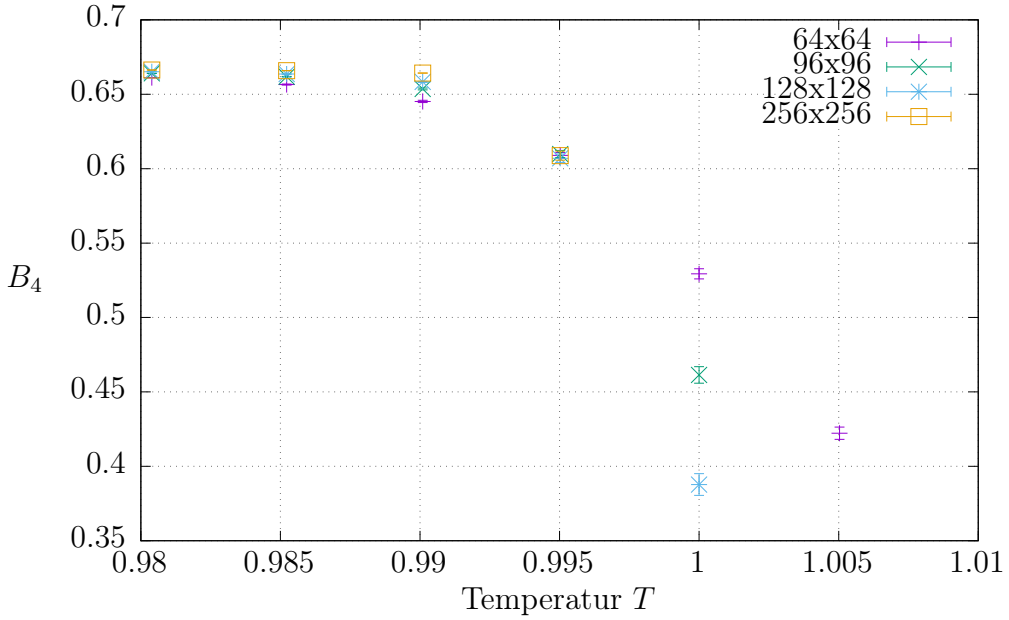

Abbildung 5.11: *Grafische Auftragung der vierten Binderkumulante B_4 als Funktion der dimensionslosen Temperatur T mit Fehlerbalken für vier verschiedene Gittergrößen.*

Auch der Wert B_4^* hat eine besondere Bedeutung, da dieser für bestimmte Klassen von Modellen auch eine universelle Konstante ist. Die so bestimmten Werte stimmen also sehr gut mit dem theoretisch errechneten Wert für T_c aus Kapitel 2.4.1.1 (Gleichung 2.4.4) und der simulierten Größe für U_4^* aus [**38**] überein.
Mit der so bestimmten Temperatur kann im nachfolgenden Kapitel die reduzierte Temperatur t errechnet werden, die unter anderem für die Finite-Size-Scaling Untersuchungen gebraucht wird.

5.2.2.2 Finite-Size-Scaling

Bereits in Kapitel 2.4.2 erläutert, lassen sich aus Aspekten der RG-Theorie diverse Finite-Size-Scaling Relationen herleiten, die in gewissen Bereichen universelles Verhalten voraussetzen, welches nicht von der Gittergröße abhängen darf. Dies soll im Folgenden überprüft werden, wozu als erstes die einzelnen kritischen Exponenten bzw. deren Verhältnis bestimmt wird. Zum Schluss wird noch geprüft, ob die so bestimmten Parameter auch die Hyper-Scaling-Gesetze erfüllen.
Zur Bestimmung von diesen Größen ist für die verwendeten Gittergrößen der Bereich rund um den Phasenübergang nochmals mit höherer Präzision und mehr Mittlungen pro Datenpunkt durchfahren worden, da aufgrund der schon relativ großen Gittergröße, die Unterschiede im Bereich der vierten Nachkommastelle der Observablen

stattfinden. Zudem werden, um eine bessere Statistik zu erhalten, alle sieben simulierten Gitter betrachtet (32x32, 64x64, 96x96, 128x128, 160x160, 192x192 und 256x256).
Als erstes wird z, das Verhältnis von γ und ν, bestimmt. Dazu macht man sich zu Nutze, dass das Maximum der Suszeptibilität von der Gittergröße abhängt (siehe Kapitel 2.3.2) und durch folgende Funktion beschrieben werden kann,

$$\chi_{max}(L) = c \cdot L^z \quad , z = \frac{\gamma}{\nu} \tag{5.2.8}$$

weshalb die Funktion in Abbildung 5.12 mittels eines gewichteten Fits an die Daten angepasst wird, um unter anderem den Exponenten zu bestimmen. Allerdings sei hier schon einmal darauf hingewiesen, dass die angegebenen Fit-Fehler sehr kritisch zu sehen sind und den wahren Fehler unterschätzen, da aufgrund von Korrelationen der Messwerte eigentlich noch Fehler höherer Ordnung betrachtet werden müssten, um eine realistischere Einschätzung zu erhalten. Analog lässt sich auch bei der Bestimmung von y, dem Reziproken von ν, und n, dem Verhältnis von β und ν, verfahren.
Zur Bestimmung von y wird die inverse Temperatur an der Stelle der maximalen Suszeptibilität als Funktion der reziproken Gitterausdehnung aufgetragen und anschließend durch die nachstehende Gleichung gefittet,

$$\beta_{max}(L) = \beta_c - a \cdot L^y \quad , y = \nu^{-1} \tag{5.2.9}$$

wobei für β_c das Inverse der in Kapitel 5.2.2.1 gefundenen kritischen Temperatur eingesetzt wird. Dies ist in Abbildung 5.13 zu sehen.

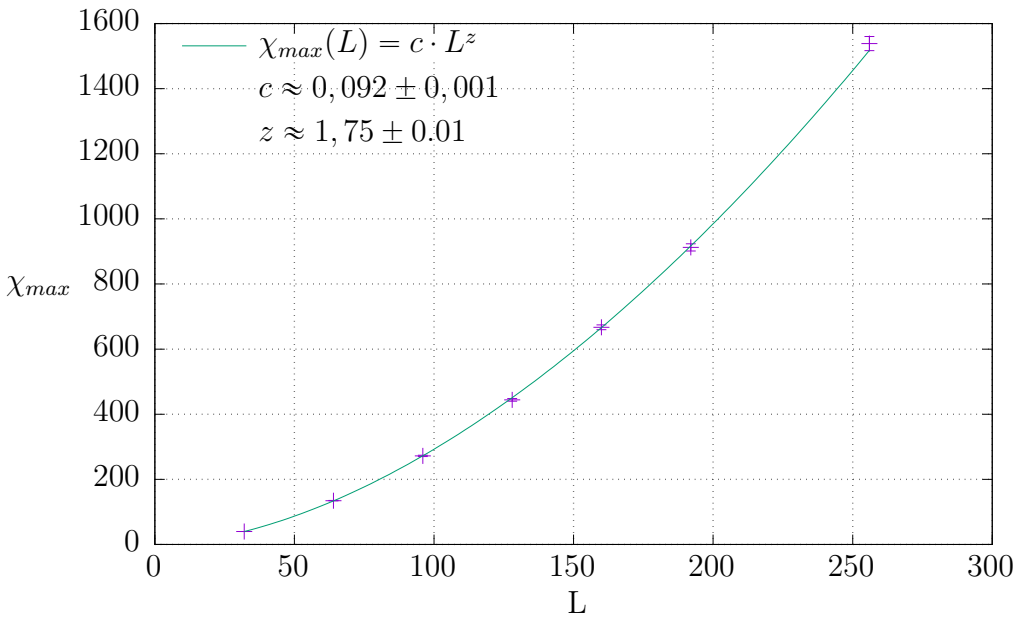

Abbildung 5.12: *Grafische Auftragung des Maximums der Suszeptibilität χ_{max} als Funktion der Gitterausdehnung L (violett) und des Fits mittels der angegebenen Funktion (grün).*

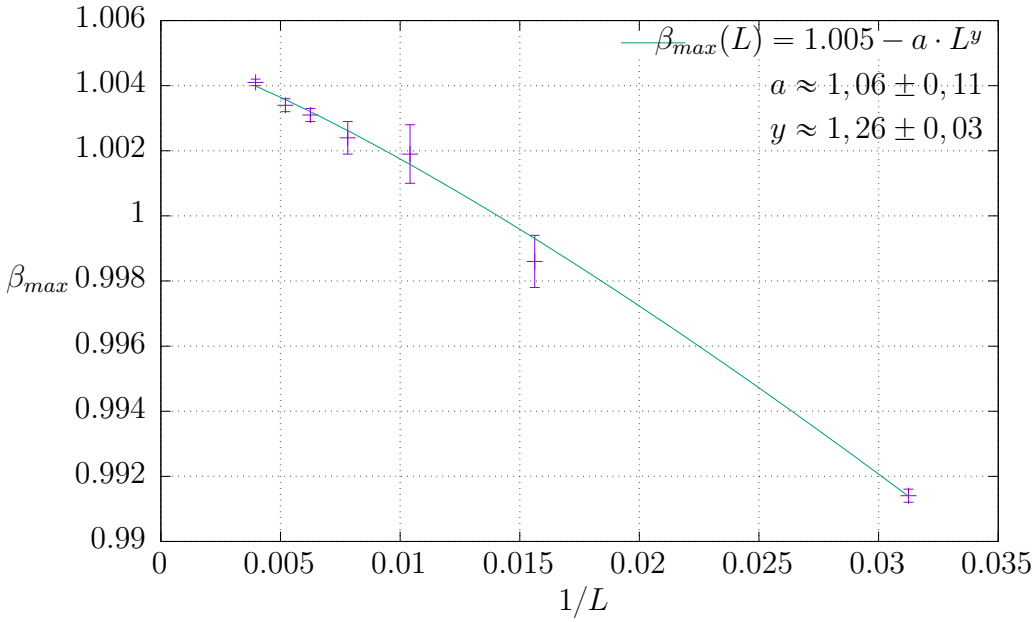

Abbildung 5.13: *Grafische Auftragung des β-Werts, an dem die Suszeptibilität ihr Maximum besitzt, gegen die reziproke Gitterausdehnung $1/L$ (violett) und des Fits mittels der angegebenen Funktion (grün).*

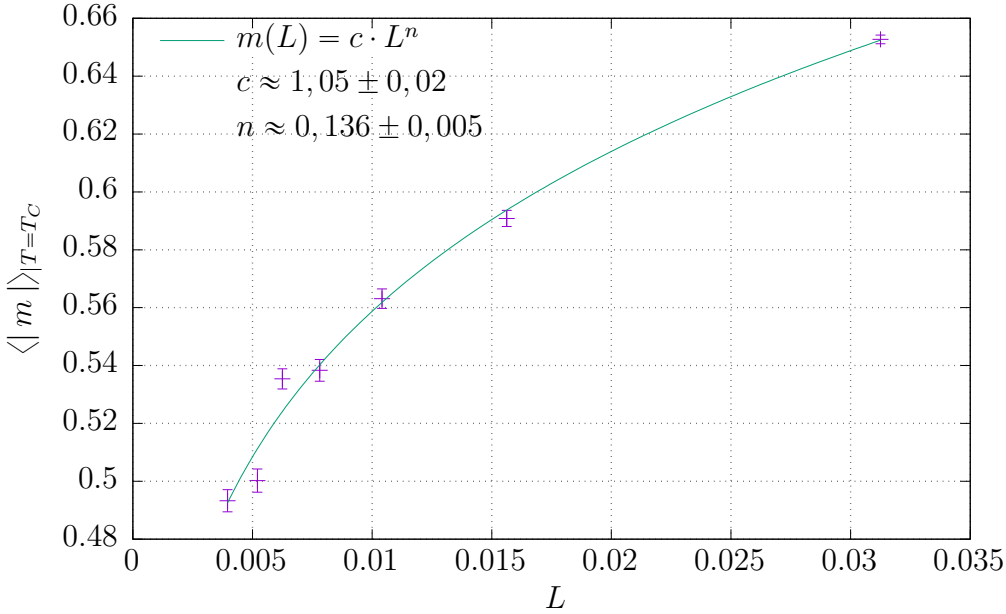

Abbildung 5.14: *Grafische Auftragung der mittleren Magnetisierung $\langle | m | \rangle$ an der kritischen Temperatur gegen die Gitterausdehnung L (violett) und des Fits mittels der angegebenen Funktion (grün).*

Als letztes wird für die Bestimmung von n die mittlere Magnetisierung an der Stelle der kritischen Temperatur gegen die Gitterausdehnung grafisch dargestellt und durch den Zusammenhang

$$m(L) = c \cdot L^n \quad , n = \frac{\beta}{\nu} \tag{5.2.10}$$

gefittet, was in Abbildung 5.14 zu erkennen ist.
Insgesamt erhält man durch die Auswertung der Fit-Parameter die folgende Zusammenstellung, die sich mit den Literaturwerten **[10]** vergleichen lassen, um auch wieder eine Einschätzung der Funktionalität des Codes zu erhalten.

Tabelle 5.1: *Zusammenstellung der kritischen Exponenten.*

	ν	γ/ν	β/ν
Messwert mit Fehler	$0,794 \pm 0,019$	$1,75 \pm 0,01$	$0,136 \pm 0,005$
Literaturwert	$0,833$	$1,73$	$0,133$

Wie deutlich in Tabelle 5.1 zu erkennen ist, passen die ermittelten Parameter relativ gut zu den Literaturwerten. Um sich auch nochmal grafisch von der Richtigkeit der bestimmten Größen überzeugen zu können, werden noch zwei Finite-Size-Scaling Plots erzeugt, die im optimalen Fall universelles, von der Gittergröße nicht abhängiges Verhalten im Bereich um $t = 0$ zeigen sollten (vgl. Gleichung 2.4.11 & 2.4.12).

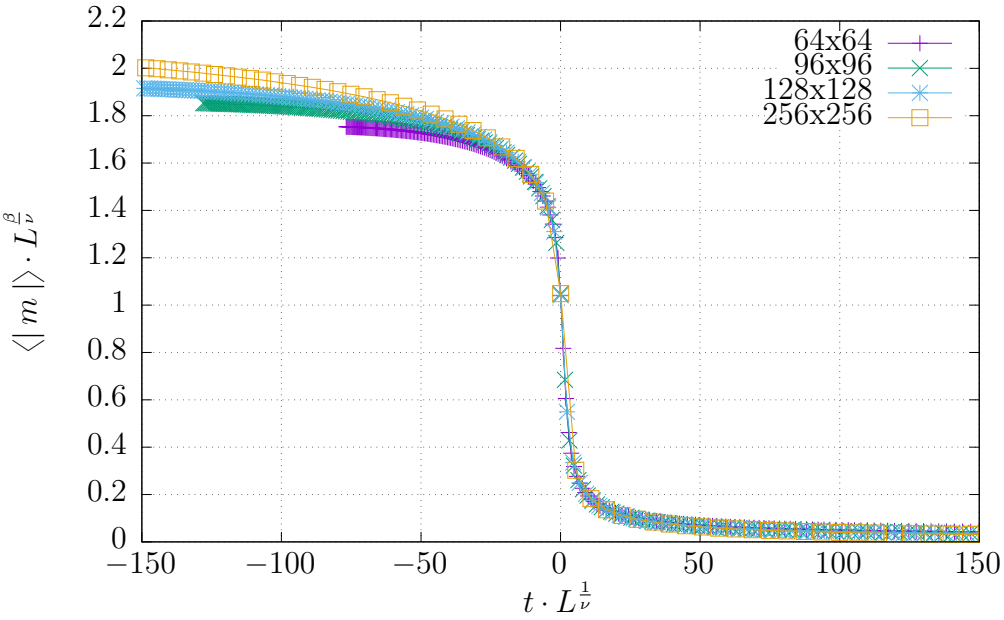

Abbildung 5.15: *Finite-Size-Scaling Plot der, mittels der in Tabelle 5.1 bestimmten Parameter, modifizierten mittleren Magnetisierung.*

Wie sich in den beiden Abbildungen 5.15 und 5.16 gut erkennen lässt, ist das universale Verhalten im Bereich um $t = 0$ zu beobachten, da die Kurven sämtlicher Gittergrößen im Intervall von -25 bis 100 ziemlich deckungsgleich sind. Außerhalb

dieses Abschnitts, kommt es aufgrund der endlichen Gittergröße zu einem langsamen Aufspalten der Kurven, beginnend mit der kleinsten Gittergröße. Insgesamt lässt sich allerdings sagen, dass auch die qualitative Betrachtung der Finite-Size-Scaling Plots eine Richtigkeit der bestimmten Parameter zeigen.

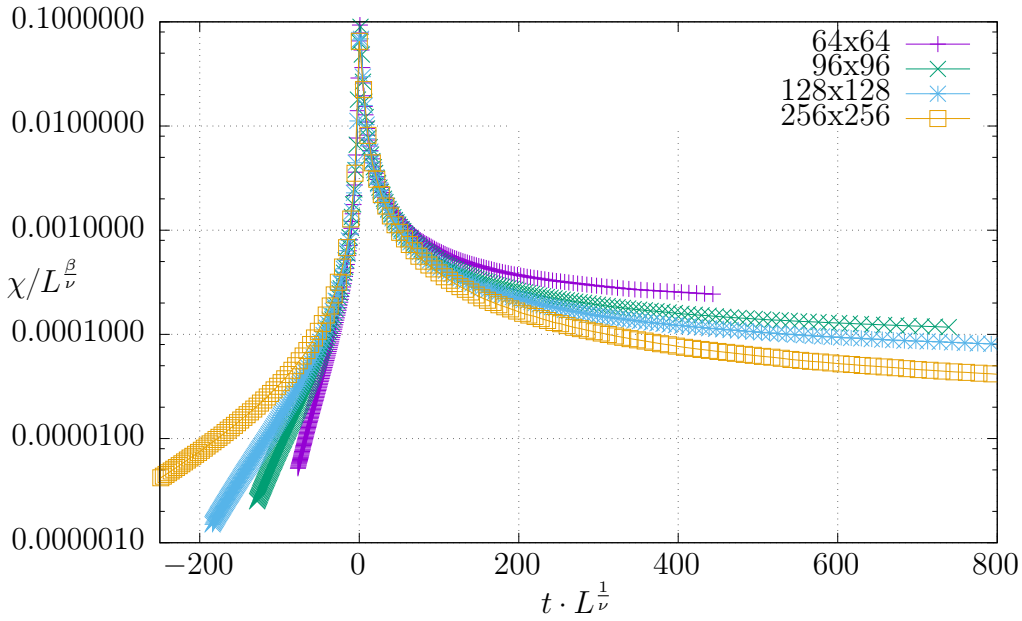

Abbildung 5.16: *Finite-Size-Scaling Plot der, mittels der in Tabelle X betimmten Parameter, modifizierten Suszeptibilität.*

Zum Schluss soll noch beispielhaft überprüft werden, ob die mittels Fit bestimmten Exponenten auch die sogenannten *Hyper-Scaling*-Relationen erfüllen, da dies auch nochmal eine quantitative Bestätigung der Werte bedeutet. Einer dieser Zusammenhänge ist z.B. der folgende [**39**]

$$\gamma = 2\nu - 2\beta. \tag{5.2.11}$$

Setzt man die vorherig bestimmten Werte aus Tabelle 5.1 ein und bestimmt die Fehler von diesen mittels Abschätzung des Maximalfehlers, so ergibt sich:

$$\gamma + 2\beta - 2\nu = 1,39 \pm 0,06 + 2 \cdot 0,108 \pm 0,004 - 2 \cdot 0,794 \pm 0,003 = 0,018 \pm 0,067$$

Es zeigt sich, dass auch diese Relation im Rahmen des Fehlers erfüllt ist. Insgesamt lässt sich aus diesem Abschnitt also schließen, dass die Parameter, auf Basis von qualitativen und quantitativen Untersuchungen, richtig bestimmt wurden.

5.2.3 Das 3D-Modell

Da die oben betrachteten Finite-Size-Scaling-Untersuchungen so nur für zweidimensionale Modelle durchführbar sind, soll hier beim dreidimensionalen Modell fast

ausschließlich die kritische Temperatur T_c des Systems bestimmt und mit Referenzwerten verglichen werden, da es keine analytische Lösung analog zu Gleichung (2.4.4) des zweidimensionalen Modells gibt. Außerdem wird das Scaling des Peaks der Suszeptibilität untersucht und noch eine genauere Betrachtung der Binderkumulante vorgenommen, da sich bei einer deutlich höheren Auflösung Effekte bemerkbar machen, die in der ersten qualitativen Analyse nur zu erahnen waren.

5.2.3.1 Bestimmung von T_c

Da, wie bereits erwähnt, der Peak ziemlich scharf ist, sind zur besseren Bestimmung des Maximums, was für die Ermittlung der kritischen Temperatur und noch mehr für die Untersuchung des Scalings des Peaks von Bedeutung ist, im Bereich um T_c nochmal Daten mit höherer Auflösung aufgenommen worden. Das heißt, dass alle Simulationsparameter gleich gelassen wurden, nur der Bereich des Peaks mit einer Auflösung von $\Delta\beta = 0,00001$ abgerastert wurde.
Aufgrund dessen, dass die Binderkumulante bei einem Phasenübergang erster Ordnung einen richtigen Sprung macht, also eine Unstetigkeitsstelle aufweist, kann die kritische Temperatur nicht über den Schnittpunkt von dieser bestimmt werden, sondern es wird der Peak der Suszeptibilität vermessen, auch wenn das die weniger exakte Methode ist.
Im Folgenden wird die Suszeptibilität des größten vollständig simulierten Gitters (160x160x160) grafisch dargestellt, aus welche die Position des Peaks bestimmt werden kann.

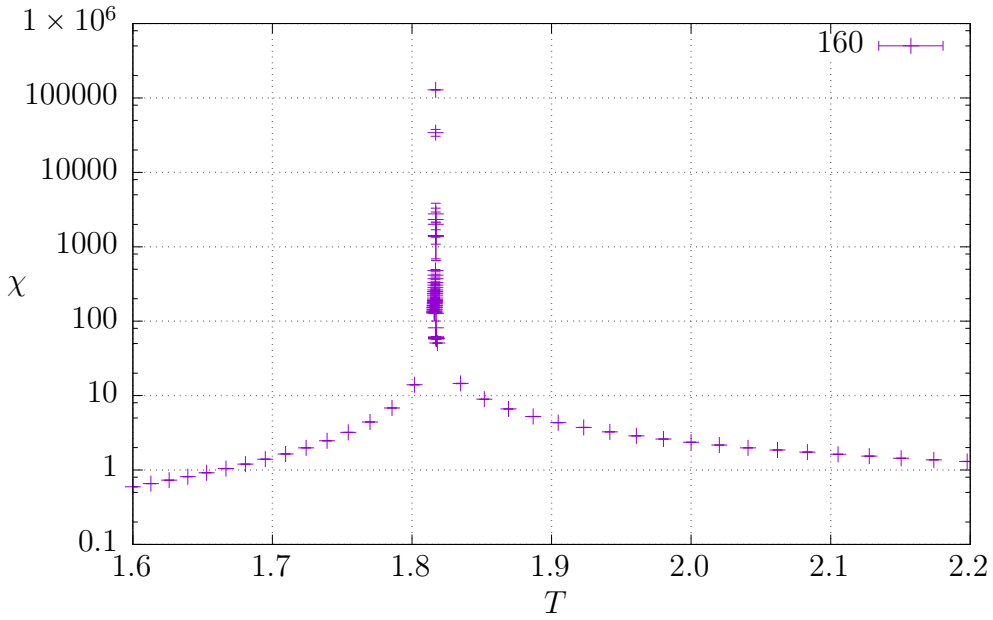

Abbildung 5.17: *Grafische Auftragung der Suszeptibilität χ gegen die Temperatur T des dreidimensionalen 160er-Gitters mit erhöhter Auflösung im Bereich des Peaks.*

Wie sich in der Abbildung 5.17 gut erkennen lässt, ist der Peak so scharf (ein bis

zwei Größenordnungen größer als Rest), dass dieser abgelesen und nicht mittels Fit bestimmt wird. Entsprechend ergibt sich für das Maximum eine Temperatur von $T_c = 1,81693 \pm 0,00004$, wobei der Fehler dem Abstand zum nächsten Simulationswert entspricht. Vergleicht man dies mit den Literaturwerten [**40**], welche größtenteils im Bereich von $1,81613$ bis $1,81818$ liegen, so bestätigt dies auch die Funktionalität des Programms für den dreidimensionalen Fall. Zudem entspricht dies auch exakt dem Wert in Abbildung 5.9, wo zwei gleich hohe Peaks in der Verteilung zu erkennen sind.

5.2.3.2 Scaling des Suszeptibilitätspeaks

Anders als im zweidimensionalen Fall sollten die Peaks der Suszeptibilität linear mit dem Volumen V $(= L^3)$ skalieren und nicht mit einem Finite-Size-Parameter [**41**]. Um dies überprüfen zu können, wird die nachstehende Gleichung an die in Abbildung 5.18 zu sehenden Daten gefittet

$$\chi_{max}(L) = c \cdot L^z. \tag{5.2.12}$$

Zu einer Verbesserung der Statistik ist auch für die Gittergrößen von 32 und 192 noch einmal der Bereich rund um die kritische Temperatur simuliert worden. Da bei manchen Gittergrößen das Scaling noch immer nicht zu erkennen war, sind alle Gitter noch ein weiteres Mal mit doppelter Auflösung aufgenommen worden, woraus sich die Daten in der nachstehenden Abbildung ergeben (dabei kam es u. A. zu keiner Änderung des Maximums des 160er Gitters, sodass an der Bestimmung von T_c nichts zu ändern ist).

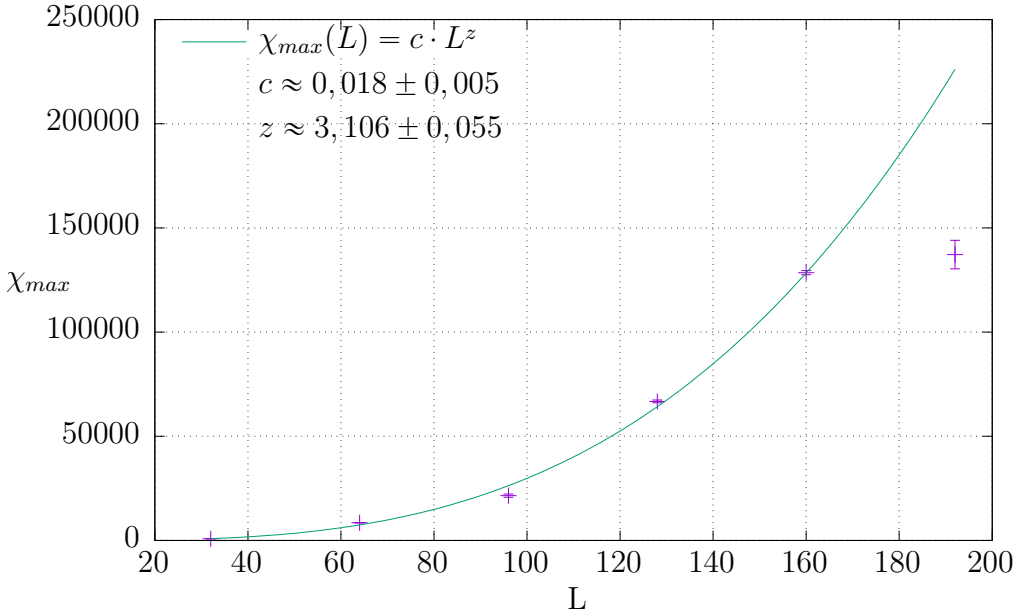

Abbildung 5.18: *Grafische Auftragung des Maximums der Suszeptibilität χ_{max} als Funktion der Gitterausdehnung L (violett) und des Fits mittels der angegebenen Funktion (grün).*

Es ist gut zu erkennen, dass der Fit die kubische Abhängigkeit des Suszeptibilitätsmaximums von der Gitterausdehnung L qualitativ wiedergibt. Einzig der Datenpunkt zur größten Gittergröße (192) fällt aus dem Rahmen, was vermutlich damit zu erklären ist, dass der Peak dort so scharf ist, sodass die verwendete Auflösung nicht ausreicht, um diesen hinreichend gut wiederzugeben. Zur quantitativen Einschätzung des Fits sei wieder darauf verwiesen, dass der Fit-Fehler des Exponenten nicht überschätzt werden darf (ist eher zu klein), da erstens die Korrelation der Daten nicht berücksichtigt wird und zweitens der Fehler des Vorfaktors verhältnismäßig groß ist, was bei einem Zwei-Parameter-Fit auch einen größeren Fehler des anderen Parameters impliziert.

5.2.3.3 Negative Binderkumulante

Als letztes soll sich nun noch dem nicht trivialen Verhalten der vierten Binderkumulante gewidmet werden, welches bereits in der qualitativen Analyse zu erahnen war (Abb. 5.5). Dazu ist nachstehend eine Grafik zu sehen, in welcher wieder die Binderkumulante als Funktion der Temperatur rund um den Phasenübergang aufgetragen ist. Auch hierbei ist mit der deutlich erhöhten Auflösung aus dem vorherigen Abschnitt simuliert worden, da, wie in Abbildung 5.5 zu erkennen, das Verhalten bei zu großen Schritten nur bei manchen Gittern zu beobachten ist, aufgrund der hohen Schärfe des Peaks, welche auf den unstetigen Verlauf zurückzuführen ist.

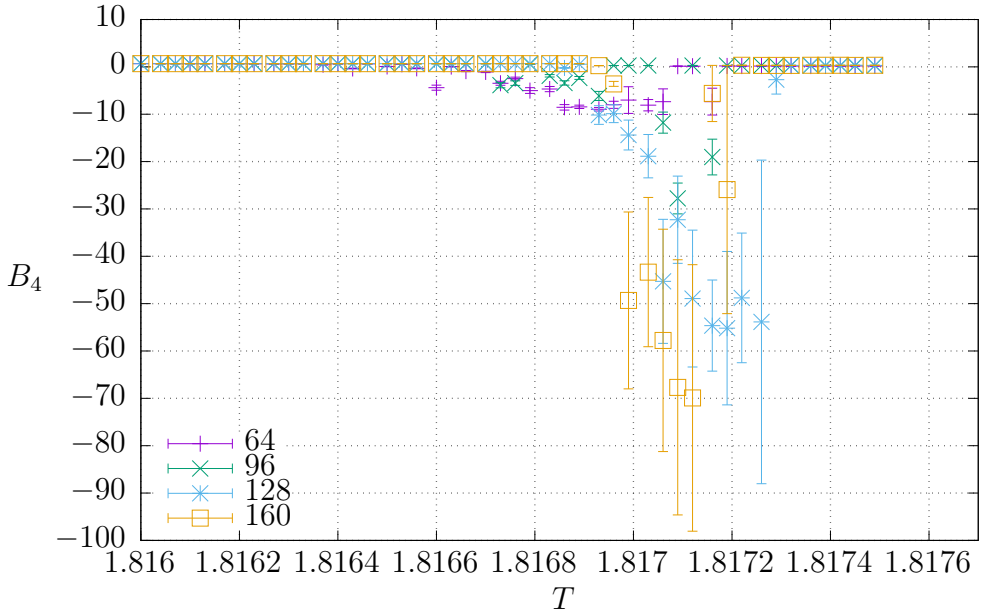

Abbildung 5.19: *Ausschnitt aus der Binderkumulante mit erhöhter Auflösung im Bereich des kritischen Punktes.*

Es ist gut zu erkennen, dass alle vier Gittergrößen gleiches Verhalten zeigen. Die beiden Grenzwerte für kleine und große Temperaturen werden wie auch schon in den

obigen Betrachtungen erfüllt (nur schwer zu erkennen aufgrund der großen Ausschläge). Allerdings erfolgt der Übergang nicht durch einen einzigen Sprung, sondern es kommt vorher (von großen T kommend) zu negativen Ausschlägen (mit sehr großen Fehlern), welche mit zunehmender Gittergröße deutlich wachsen. Es lässt sich also das bereits in Abbildung 5.5 bei zwei Gittergrößen festgestellte Verhalten bestätigen. Wie an der Skala ersichtlich, spielt sich dieses Verhalten allerdings nur in einem sehr kleinen Temperaturbereich ab, da auch nur in einem sehr kleinen Bereich der Doppel-Peak in der Magnetisierung zu beobachten ist (vgl. Abb. 5.9). Der in **[19]** beschriebene Grenzwert des Ausschlags gegen $-\infty$ für $L \to \infty$, lässt sich nur erahnen und es wären vermutlich Untersuchungen mit noch höherer Auflösung vonnöten. Insgesamt lässt sich jedoch sagen, dass das in Kapitel 2.4.1.2 besprochen und erklärte Verhalten auch in der Auswertung der Simulation zu beobachten ist.

Insgesamt lässt sich als Fazit dieses fünften Kapitels sagen, dass die Implementierung des besprochenen Algorithmus gut funktioniert hat. Die Funktionalität konnte sowohl qualitativ als auch quantitativ bestätigt werden. Zudem hat man in der Auswertung wirklich gut die elementaren Unterschiede bezüglich der Dimensionalität herausarbeiten und weitere Scaling-Untersuchungen durchführen können, wobei die bestimmten Parameter sich alle mit den zu erwartenden Literaturwerten decken. Des Weiteren ist es auch möglich gewesen, die kritische Temperatur des dreidimensionalen Modells zu bestimmen, für welches keine analytische Lösung existiert.

Kapitel 6

Fazit und Ausblick

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass in dieser Bachelor-Thesis erfolgreich das zwei- und dreidimensionale *3-Zustands-Potts-Modell* mittels *Monte-Carlo-Simulationen* und unter Verwendung von *Multispin-Coding* auf Grafikkarten simuliert werden konnte. Dabei ist deutlich der dimensionsbehaftete Unterschied in der Art des Phasenübergangs herausgearbeitet worden. Es war in beiden Fällen möglich die kritische Temperatur des Systems zu bestimmen und diese mit dem analytischen Ergebnis bzw. Simulationen aus anderen Arbeiten zu verifizieren. Des Weiteren konnte im zweidimensionalen Modell das universale Verhalten genauer studiert und die Richtigkeit von hergeleiteten *Finite-Size-Scaling*-Funktionen getestet werden. Die dabei, nach Erhöhung der Auflösung, zu bestimmenden *kritischen Exponenten*, sind wieder durch Literaturwerte bestätigt worden. Auch das Scaling des Suszeptibilitätspeaks im dreidimensionalen Modell wurde untersucht, wobei allerdings festgestellt worden ist, dass dieser zu scharf ist, um bei ganz großen Gittern vollständig mit der verwendeten Auflösung dargestellt werden zu können. Generell lässt sich dabei sagen, dass die, aufgrund der optimierten Rechenzeit gewählte, Restriktion in der Wahl der Gittergröße bei den Scaling-Untersuchungen eher von Nachteil war, da man sich teilweise schon so nah am thermodynamischen Limes befunden hat, dass die zu beobachteten Phänomene nur mit einer enorm feinen Abrasterung der Kurve dargestellt werden konnten. Zudem waren bei den großen Gittern Probleme bei der Thermalisierug festzustellen, weswegen vor jeder Messung erst eine sehr große Anzahl an Monte-Carlo-Schritten durchzuführen war.
Ausgehend von den Untersuchungen in dieser Thesis könnten als nächster Schritt *anti-periodische* Randbedingungen und sich dadurch ausprägende *Interfaces* untersucht werden. Eine weitere Möglichkeit, die durch die hier gewählte Implementierung leicht zu realisieren wäre, ist die Simulation von *Ashkin-Teller-Modellen*. Dabei müsste nur die verbleibende Kombination von Bits (1 und 1) zugelassen werden, was mit dem momentan implementierten *Multispin-Coding* direkt durchführbar ist, um ein Modell mit vier Zuständen zu verwirklichen. Dabei kommt auch der Unterschied zwischen dem *planaren* und dem *Standard*-Potts-Modell zum Tragen, da die Zustände bei ersterem nicht mehr energetisch äquidistant sind. Es lässt sich dann eine Energiefunktion definieren, mittels welcher zwischen den beiden Modellen interpoliert werden kann.

Anhang A

A.1 Transformation der Energiefunktion des (q=3)-Vektor-Potts-Modells

Wie oben bereits erwähnt, lassen sich die Energiefunktionen des Vektor- und des Standard-Potts-Modells für $q = 2$ und $q = 3$ in einander überführen, was im Folgenden für den in der Thesis relevanten Fall (q=3) gemacht werden soll, basierend auf [**42**].
Die Energiefunktion des Vektor-Modells hat die folgende Gestalt:

$$H_{vector} = -\epsilon_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\Theta_j - \Theta_i) \tag{A.1.1}$$

Wird jetzt noch bedacht, dass die Differenz zwischen zwei Zuständen nur die folgenden Werte annehmen kann,

Tabelle A.1: *Zusammenstellung aller möglichen Winkeldifferenzen und der sich daraus ergebende* cos-*Werte.*

Θ_i	Θ_j	$\Theta_j - \Theta_i$	$\cos(\Theta_j - \Theta_i)$
0	0	0	1
0	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	$-0,5$
0	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	$-0,5$
$\frac{2\pi}{3}$	0	-$\frac{2\pi}{3}$	$-0,5$
$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	0	1
$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	$-0,5$
$\frac{4\pi}{3}$	0	$-\frac{4\pi}{3}$	$-0,5$
$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	$-\frac{2\pi}{3}$	$-0,5$
$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	0	1

so lässt sich das Argument der Summe aus Gleichung (A.1.1) weiter umschreiben zu

$$-\epsilon_1 \cdot \cos(\Theta_j - \Theta_i) = -\epsilon_1 \begin{cases} 1 & \Theta_i = \Theta_j \\ -0,5 & \Theta_i \neq \Theta_j \end{cases} \tag{A.1.2}$$

Nun kann man auf diese Gleichung noch einen beliebigen Faktor hinzu addieren, ohne die Physik zu ändern. In diesem Fall wird ein $-0,5\epsilon_1$ dazu addiert, was zu

folgender Gleichung führt, für die im zweiten Schritt noch ϵ_1 durch $\frac{2}{3}\epsilon_2$ substituiert wird. Dies führt zu

$$-\epsilon_1 \cdot \cos(\Theta_j - \Theta_i) - \frac{1}{2}\epsilon_1 = -\epsilon_1 \begin{cases} 1,5 & \Theta_i = \Theta_j \\ 0 & \Theta_i \neq \Theta_j \end{cases} = -\epsilon_2 \begin{cases} 1 & \Theta_i = \Theta_j \\ 0 & \Theta_i \neq \Theta_j \end{cases} = \epsilon_2 \delta_{Kr}(n_i, n_j), \tag{A.1.3}$$

was genau der Energiefunktion des Standard-Potts-Modells entspricht. Somit ist also gezeigt, dass sich die Energiefunktionen des Vektor und des Standard-Potts-Modell durch die folgende Transformation ineinander überführen lassen:

$$H_{vector} = H_{Potts} + 0,5\epsilon_1 \tag{A.1.4}$$

wenn $\epsilon_2 = \frac{3}{2}\epsilon_1$.

A.2 Binderkumulante bei komplexen Ordnungsparametern

Ausgehend von den meisten Veröffentlichungen, die sich mit dieser Thematik beschäftigen, ist man es gewohnt, dass die Binderkumulante bei großen Temperaturen gegen 0 konvergiert. Wie man bei den oben betrachteten Simulationen jedoch feststellen kann, konvergiert diese gegen $\frac{1}{3}$, was in der folgenden Rechnung verifiziert werden soll.
Da die Magnetisierung als Betrag der Summe über komplexe Zahlen gebildet wird, muss auch das in der Rechnung berücksichtigt werden [**43**]. Generell kann man für große Temperaturen eine Gauß-Verteilung der Magnetisierung annehmen (was auch oben in Abb. 5.8 oder 5.9 zu erkennen ist) und findet daher die folgenden Gleichungen:

$$\langle M^4 \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |x + \mathbf{i}y|^4 \cdot \exp(-|x + \mathbf{i}y|^2) dxdy = 2 \tag{A.2.1}$$

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |x + \mathbf{i}y|^2 \cdot \exp(-|x + \mathbf{i}y|^2) dxdy = 1 \tag{A.2.2}$$

wobei x und y dem Real- bzw. Imaginärteil der Magnetisierung entspricht und der Vorfaktor aus der Normierung folgt.
Mittels dieser Größen ergibt sich durch einsetzen in Gleichung (2.3.7) für die Binderkumulante

$$B_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} = 1 - \frac{2}{3 \cdot 1} = \frac{1}{3}, \tag{A.2.3}$$

wodurch das zuerst ungewohnte Ergebnis der Simulation auch rechnerisch bestätigt ist.

A.3 Plots mit allen Gittergrößen (2D)

Aus Gründen der Vollständigkeit sind hier noch einmal die Übersichts-Abbildungen der Magnetisierung, der Suszeptibilität und der Binderkumulante von oben, diesmal aber mit allen simulierten Gittergrößen zu sehen.

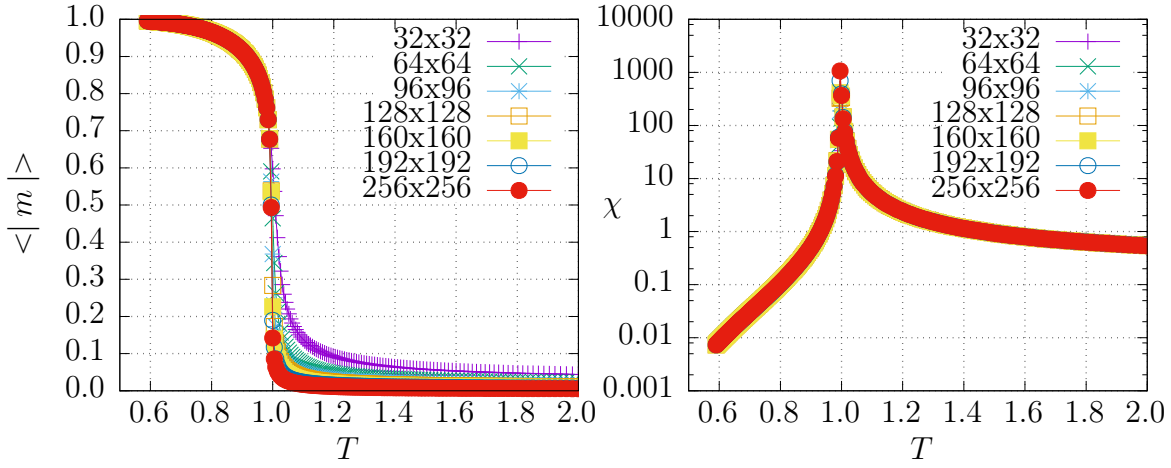

Abbildung A.1: *Grafische Auftragung der mittleren Magnetisierung (links) und der Suszeptibilität (rechts) gegen die mittlere Temperatur T jeweils für alle simulierten Gittergrößen.*

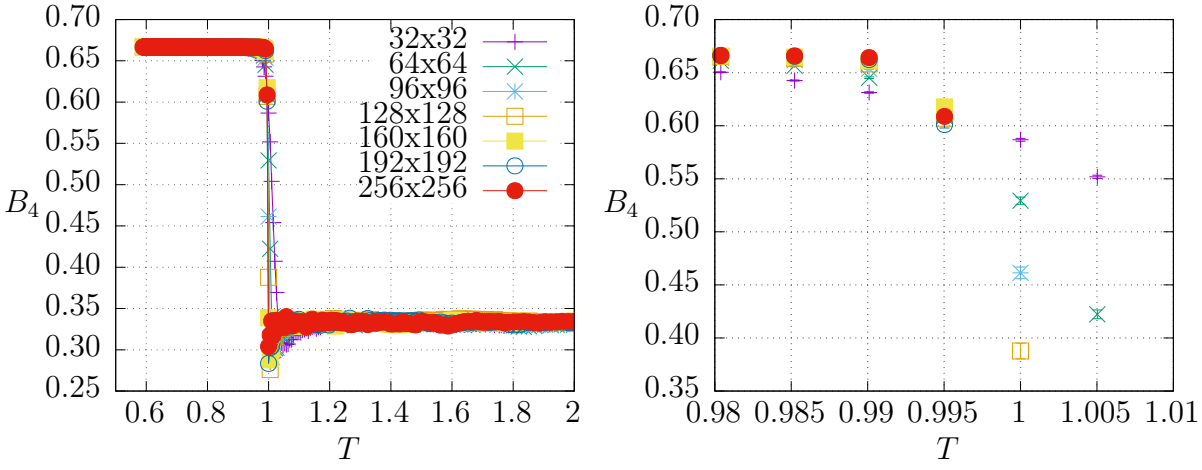

Abbildung A.2: *Grafische Auftragung der vierten Binderkumulante (links) und einer vergrößerten Aufnahme (rechts) gegen die mittlere Temperatur T jeweils für alle simulierten Gittergrößen.*

Wie zu erkennen, ist der Schnittpunkt der Binderkumulante bei allen sieben Gittern nicht ganz so genau wie bei der Grafik in der Auswertung, allerdings, schneiden sie sich im Rahmen ihres Fehlers trotzdem.

Literatur

[1] *Beiträge zum Verständnis der magnetischen Eigenschaften in festen Körpern*, Lenz, W. , Physikalische Zeitschrift, Band 21, 1920, S. 613–615

[2] *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Ising, E. , Zeitschrift für Physik, Vol. 31, 1925, S. 253-258

[3] *Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I*, Kramers, H. A. and Wannier, G. H., Physical Review, Vol. 60, 1941

[4] *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transistion*, Onsager, L. Physical Review, Vol. 65, No. 3 & 4, 1943, S. 117-149

[5] *Statistics of Two-Dimensional Lattices With Four Components*, Ashkin, J. and Teller, E., Physical Review, Vol. 64, No. 5 & 6, 1943, S. 178-184

[6] *Some Generalized Order-Disorder Transformations*, Potts, R., Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, Vol. 48, pp. 106109, 1952

[7] *A Review of the Potts Model: Its Connection to the Tutte Polynomial and its Application to Complex Experiments*, Beaudin, L. , 2007 http://www.rose-hulman.edu/mathjournal/archives/2007/vol8-n1/paper13/v8n1-13pd.pdf, Letzter Aufruf: 29.07.2017

[8] *Simulation of Biological Cell Sorting Using a Two-Dimensional Extended Potts Model*, Glazier, J. and Graner, F., Physical Review Letter, Vol. 69, No. 13, 1992

[9] *Monte-Carlo-Simulationen des Ising-Modells mit Multispin-Coding auf GPUs*, Ghanbarpour, M., Justus-Liebig-Universität Giessen, September 2016

[10] *The Potts model*, Wu, F.Y., Reviews of Modern Physics, Vol. 54, No. 1, Januar 1982

[11] *An introduction to lattice gauge theory and spin systems*, Kogut, J.B. , Reviews of Modern Physics, 51, 1979, S. 659-713

[12] *The exact Solution of some Lattice Statistics Models with four states per site*, Betts, D. , Canadian Journal of Physics, Vol. 42, No. 8, 1964, S. 1564-1572

[13] *Monte carlo simulations of spin systems*, Jahnke, W., In Computational Physics, S.10-43, Springer, 1996

[14] *Monte Carlo Simulationen in der statistischen Physik*, Skript , Hasenbusch, M., Institut für Physik, Humboldt Universität zu Berlin

[15] *Monte Carlo Studies of the three dimensional Ising Model*, Habilitationsschrift, Hasenbusch, M., Institut für Physik , Humboldt Universität zu Berlin

[16] *Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions*, Binder, K., Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, Vol. 43, No. 2, 1981 , S.119-140

[17] *Critical Phenomena and Renormalization-Group Theory*, Pelissetto, A. and Vicari, E., Physics Report 368, No. 6, 2002, S.549-727

[18] *Fourth-Order Cumulants to Characterize the Phase Transitions of a Spin-1 Ising Model* Tsai, S.-H. and Salinas, S. R. , Brazilian Journal of Physics, vol. 28, no.1, March 1998

[19] *Continuos Quantum Phase Transition between an Antiferromagnet and a Valence-Bond Solid in Two Dimensions: Evidence for Logarithmic Corrections to Scaling*, Sandvik, A.W., Physical Review Letter 104, No. 17, 2010, S. 177-201

[20] *Critical Properties from Monte Carlo Coarse Graining and Renormalization*, Binder, K., Physical Review Letters, Vol. 47, No. 9, 1981

[21] *Finite-size scaling at first-order phase transition*, Binder, K. and Landau, D.P., Physical Review B, Vol. 30, No. 3, 1984

[22] *Ultraviolet Behavior of Non-Abelian Gauge Theories*, Gross, D. J. and Wilczek, F., Physical Review Letter 30, 1973, S. 1343-1346

[23] *Reliable Perturbative Results for Strong Interactions*, Politzer, H. D., Physical Review Letter 30, 1973, S.1346-1349

[24] *The quest for the quark-gluon plasma*, Braun-Munzinger, P. and Stachel, J., Nature 448, 2007, S.302-309

[25] *The 3-q Potts Model in 3 dimensions: An Interface Tension Study*, do Amaral, M. G. und Linhares, C. A. , Brazilian Journal of Physics, vol. 26, no. 3, September 1996

[26] *Universal Aspects of Deconfinement in 2+1 Dimensions* v. Smekal, L. and Edwards, S. R. and Strodthoff, N. , AIP Conf. Proc., vol. 1343, 2011

[27] *CUDA C Programmung Guide* Version: PG-02829-001_v7.5 , Nvidia, September 2015

[28] *Gittersimulationen des Ising Modells in zwei Dimensionen*, Diplomarbeit, Smith, D. Johann Wolfgang Goethe-Universität, 2007

[29] *Introduction to Markov Chain Monte Carlo Simulations and their Statistical Analysis* Berg, B. A. , Maser Review Vol 9, February 2008

[30] *Numerical Recipes in C - The Art of Scientific Computing*, W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, 1992, Cambridge University Press, 2. Auflage

[31] *A new class of Random Number Generators*, Margsaglia, G. and Zaman, A., The Annals of Applied Probability, Vol. 1, No. 3, S.462-480

[32] *Multi-GPU accelerated mutli-spin Monte Carlo simulations of the 2D Ising model*, Block, B. , Virnau, P. and Preis, T., Computer Physics Communications 181, 2010, S. 1549-1556

[33] *Multi-spin Coding: A Very Efficient Technique for Monte Carlo Simulations of Spin Systems*, Jacobs, L. and Rebbi, C. , Journal of Computational Physics 41, 203-210 , 1981

[34] *Multi-Spin Coding of the Monte Carlo Simulation of the Three-State Random Potts Model and the Block-Spin Transformation*, Kikuchi, M. and Okabe, Y. , eprint arXiv:cond-mat/9601140, 1996

[35] *Multi-GPU accelerated mutli-spin Monte Carlo simulations of the 2D Ising model*, Block, B. , Virnau, P. and Preis, T., Computer Physics Communications 181, 2010, S. 1549-1556

[36] *Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions*, Binder, K. et al, Physical Review B, Vol. 34, No. 3, 1986

[37] *Quantum Chromodynamics on the Lattice*, Gattringer, C. and Lang, C.B. , Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2010

[38] *Cumulants of the three state Potts model and of nonequilibrium models with C_{3v} symmetry*, Tome, T. and Petri, A. Instituto de Fısica, Universidade de São Paulo

[39] *Finite-size scaling, dynamic fluctuations, and hyperscaling relation in the Kuramoto model*, Hong, H. et al, Phys.Rev. E 92, 2015

[40] *Three-Dimensional 3-State Potts Model Revisited with New Techniques*, Janke, W. et al , Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 1996

[41] *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, Privmann, V. World Scientific, 1990

[42] *Statistical Approach to Quantum Field Theory*, Wipf, A., Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2013

[43] *Mündliche Auskunft von Dr. Björn Wellegehausen* , Justus-Liebig-Universität Giessen, Juni 2017

Danksagung

Zuallererst möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Lorenz von Smekal bedanken, der mir überhaupt erst die Möglichkeit geboten hat, an einem solch interessanten Thema zu arbeiten, und dessen Bürotür zu jeder Zeit offen stand, um Fragen aller Art in Ruhe und ausführlich zu klären. Auch ein großes Dankeschön an Milad Ghanbarpour, der mir seinen Code zur Verfügung gestellt hat, sodass ich das Programmieren von Grafikkarten schneller erlernen konnte und eine Grundlage für mein eigenes Programm hatte, und zudem immer für Fragen an diesem zur Verfügung stand. Ein weiteres Danke geht an Dr. Björn Wellegehausen, Lukas Holicki und Dominik Schweitzer, die mir bei vielen Fragen weiterhelfen konnten und sich auch immer die Zeit genommen habe, meine Anliegen umfassend zu klären. Auch herzlichen Dank an Herrn Prof. Dr. Christian Fischer für die Übernahme der Zweitkorrektur. Als letztes möchte ich noch meiner Freundin Anna danken, die immer für Ablenkung gesorgt und sich auch die Zeit genommen hat, die Arbeit (mehrmals) Korrektur zu lesen.

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, die vorgelegte Thesis selbständig und ohne unerlaubte fremde Hilfe und nur mit den Hilfen angefertigt zu haben, die ich in der Thesis angegeben habe. Alle Textstellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten Schriften entnommen sind, und alle Angaben, die auf mündlichen Auskünften beruhen, sind als solche kenntlich gemacht. Bei den von mir durchgeführten und in der Thesis erwähnten Untersuchungen habe ich die Grundsätze guter wissenschaftlicher Praxis, wie sie in der 'Satzung der Justus-Liebig-Universität Gießen zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis' niedergelegt sind, eingehalten. Ich stimme einer Überprüfung der Thesis mittels Anti-Plagiatssoftware gemäß § 25 Abs. 6 der Allgemeinen Bestimmungen für modularisierte Studiengänge zu.

_____ _____

(Datum) (Unterschrift)