

Theoretikum zum 1d Heisenberg-Modell

Jakob Schluttig

`jakob.schluttig@itp.uni-leipzig.de`

Betreuung durch

Prof. Dr. Wolfhard Janke & Dr. Michael Bachmann

22. Juni 2004

1 Einführung und Motivation

Die Aufgabe war es, den Einfluss der Änderung von Update-Parametern auf die Messergebnisse während einer Monte-Carlo-Simulation zu beobachten. Solche Änderungen während eines Laufes können sinnvoll sein, wie noch erläutert werden soll. Für die Untersuchungen wurde das eindimensionale Heisenberg-Modell herangezogen. Es hat den großen Vorteil gegenüber anderen Systemen, dass es - zumindest für freie Randbedingungen - exakt lösbar ist. Das bedeutet, dass man die Messergebnisse sehr gut überprüfen kann.

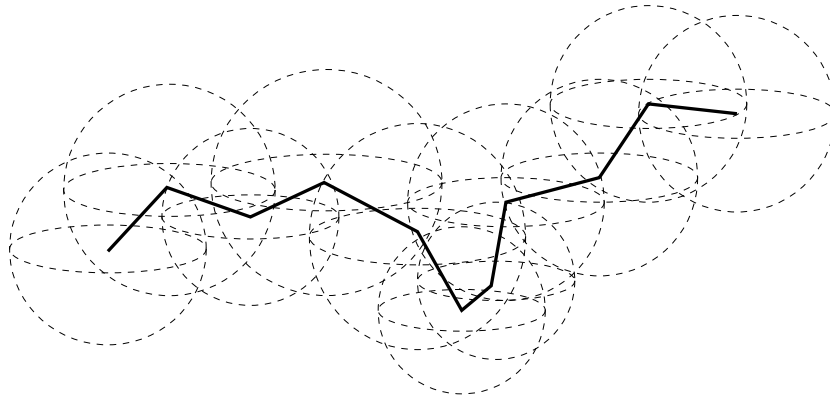


Abbildung 1: Die Vektoren des Heisenberg-Modells können als Bindungsvektoren eines Polymers angesehen werden.

Das Heisenberg-Modell betrachtet dreidimensionale Vektoren, die sich kontinuierlich auf einer Kugelschale bewegen können. Im folgenden soll die Vorstellung dahin gehen, dass die Vektoren Bindungsvektoren zwischen Monomeren darstellen (siehe Abbildung 1). Man erhält also durch die Aneinanderreihung der einzelnen Bindungsvektoren ein Polymer. Die kontinuierlichen Freiheitsgrade führen dazu, dass man für einen Update im Metropolis-Algorithmus entscheiden muss, wie stark sich ein Vektor dabei ändern darf, respektive wie gut sich die Vektoren an ihre alten Richtungen “erinnern”. Die schwächste Forderung wäre hierbei, bei jedem Update einen Bindungsvektor völlig zufällig neu zu setzen (simple sampling).

Erlaubt man starke Änderungen beim Updaten, so bewegt man sich schnell durch den Phasenraum und hat eine niedrige Korrelation aufeinanderfolgender Zustände der Markov-Kette. In diesem Fall kann es passieren, dass man nie in ausreichende Nähe des Grundzustandes kommt, da man sich immer mit großen Schritten um ihn herum bewegt. Oder aber man bleibt zu lange in der Nähe des Grundzustandes hängen, da die vorgeschlagenen Updates eine große Energieänderung

bewirken und damit durch den Boltzmannfaktor zu stark unterdrückt, also abgelehnt werden. Auf diese Weise wird die Statistik schlechter. Wählt man andererseits den Parameter für die Update-Änderungen zu klein, kommt man zwar vermutlich nahe an den Grundzustand, allerdings ist die Korrelation aufeinanderfolgender Ereignisse groß, was sich ebenfalls negativ auf die Statistik auswirkt.

Deshalb ist es günstig einen Mittelweg zwischen beiden Fällen zu wählen. Man kann das beschriebene Verhalten an der Akzeptanzrate r_{acc} festmachen. Diese mißt das Verhältnis zwischen angenommenen und vorgeschlagenen Updates. Man nimmt an, dass es günstig ist, wenn die Akzeptanzrate etwa bei 0.5 liegt. Das bedeutet, dass die vorgeschlagenen Änderungen nicht zu groß sind, man sich aber trotzdem mit einer akzeptablen Geschwindigkeit durch den Phasenraum bewegt. Wie oben erläutert, beeinflusst die Akzeptanzrate die Dynamik des Markovprozesses. Sie soll während des Updates geeignet parametrisiert werden.

Man könnte also diesen Parameter immer so zu wählen, dass für die gewünschte Temperatur die Akzeptanzrate gerade etwa $r_{\text{acc}} = 0.5$ wird. Allerdings wäre es auch möglich, während der laufenden Simulation die Akzeptanzrate zu messen und ihn entsprechend anzupassen. Insbesondere wird dies interessant, wenn man Systeme betrachtet, bei denen verschiedene Phasen auftauchen, für die unterschiedliche große Updates sinnvoll sind - zum Beispiel ein Polymer im gestreckten bzw. kollabierten Zustand. Diese Änderung von Parametern während einer Simulation darf aber bei einer Markov-Kette streng nicht vorgenommen werden. Da zum Teil trotzdem wegen der hohen Praktikabilität auf diese Weise vorgegangen wird, sollte nun an einem einfachen, exakt lösaren Beispiel festgestellt werden, ob bei der Festlegung der Akzeptanzrate auf einen willkürlichen Wert während der Simulation das Ergebnis verfälscht wird.

2 Modell und Messung

Das eindimensionale Heisenberg-Modell betrachtet eine Kette von N dreidimensionalen Vektoren $\mathbf{s}_i$ mit $i = 1, \dots, N$, die als Spins oder als Bindungsvektoren zwischen Monomeren aufgefasst werden können (Polymerbild). Außerdem nehmen wir an, dass die Bindungsvektoren alle die gleiche Länge haben und normieren diese auf 1, das heißt $|\mathbf{s}_i| = 1$ für alle i . Für sämtliche Simulationen wurde $k_B \equiv J \equiv 1$ gesetzt. Die Energie des Systems wird wie folgt berechnet:

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \cos(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_{i+1}) . \quad (2.1)$$

Aus (2.1) ist ersichtlich, dass die Energie nur von den $N-1$ Bindungswinkeln des Systems abhängt. Außerdem wird die Energie offensichtlich minimal, wenn die Bindungsvektoren möglichst parallel sind. Das heißt, dass der Grundzustand durch die gestreckte Kette realisiert ist.

Wie später bei der exakten Rechnung noch ersichtlich wird, tritt bei freien Randbedingungen keinerlei finite size Effekt auf. Die Simulationen wurden mit 20 Bindungsvektoren, das heißt 21 Monomeren und 19 Bindungswinkeln, durchgeführt. Für jede Messung beziehungsweise jede Temperatur wurden 10^5 sweeps zur Equilibrierung abgewartet und dann 10^7 sweeps gemessen. Es wurde der Metropolisalgorithmus verwendet. Für die Updates wurden die Bindungsvektoren auf der Einheitskugelschale immer in einem bestimmten Öffnungskegel um den ursprünglichen Vektor herum geändert. Da das Update also in Kugelkoordinaten stattfindet erfolgt muss bei der Durchwanderung des Phasenraumes die Jacobideterminante berücksichtigt werden. Diese ist für 3 Dimensionen $r^2 \sin \vartheta'$. Um dieses Problem zu umgehen wurde statt eines Öffnungswinkels der Cosinus dieses Winkels, $\cos \vartheta'$, zufällig gewählt, wobei $-1 \leq \cos \vartheta' \leq 1$, denn beim Übergang der Parametrisierung von ϑ' zu $\cos \vartheta'$ hebt sich durch die Substitution das $\sin \vartheta'$ der Jacobideterminante gerade weg. Auf dem Schnittkreis zwischen Updatekegel und Oberfläche der Einheitskugel wurde dann ein zufälliger Winkel $\varphi' \in [0, 2\pi]$ gewürfelt (siehe Abbildung 2). Über die Öffnung des Kegels für ein maximales Update läßt sich demnach die Akzeptanzrate parametrisieren. Wir bezeichnen den Parameter mit a_{min} , und definieren $a_{\text{min}} \leq \cos \vartheta' \leq 1$. Damit liegt a_{min} im Intervall $[-1, 1]$. Zu Beginn jeder Simulation wurde $a_{\text{min}} = 0.9$ festgelegt.

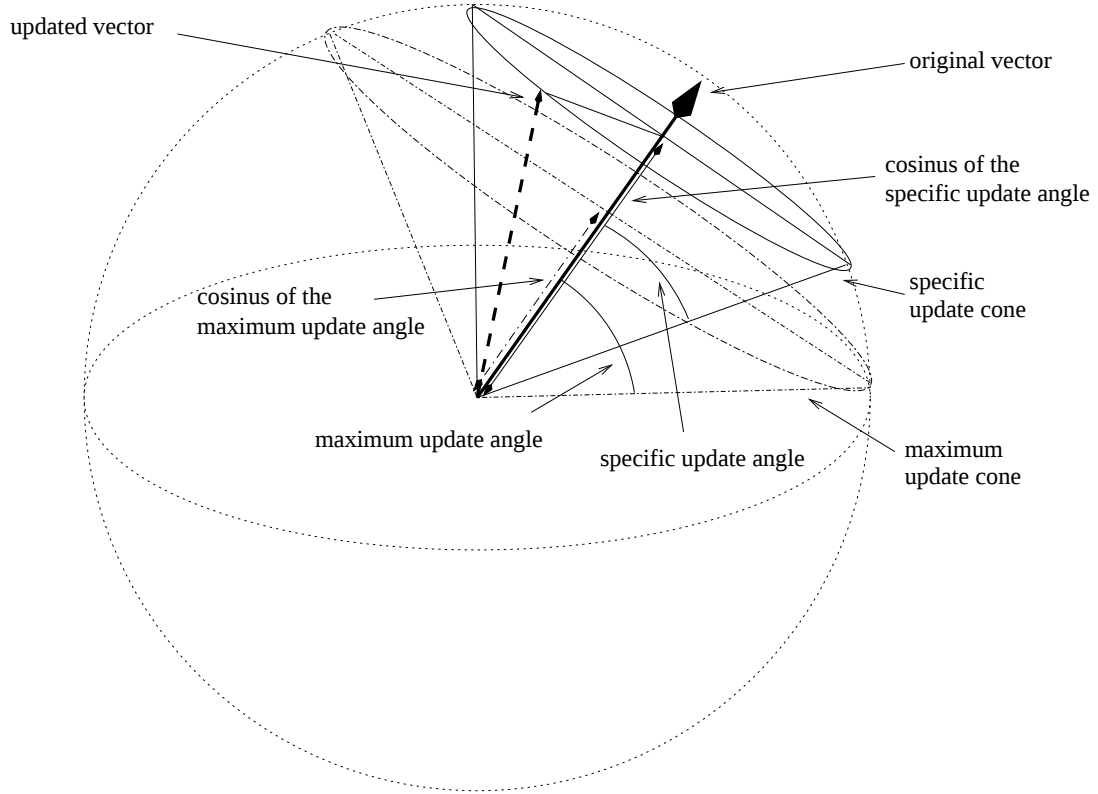


Abbildung 2: Zur Veranschaulichung des Updatealgorithmus.

Die Anpassung der Akzeptanzrate erfolgte gegebenenfalls nach der Equilibrierung, indem nach jedem sweep die Akzeptanzrate mit dem Sollwert verglichen wurde. Lag sie zu hoch, das heißt waren die vorgeschlagenen Änderungen zu klein, als dass genug abgelehnt wurden, wurde der Parameter $a_{\min}$ um den festen Wert $\Delta a_{\min} = 10^{-5}$ verringert und der mögliche Kegel damit weiter geöffnet. Analog wurde der Wert $\Delta a_{\min} = 10^{-5}$ zu $a_{\min}$ addiert, wenn die Akzeptanzrate zu klein war, also die Updates eine zu starke Änderung hervorriefen.

Als willkürlich festzulegender Wert, auf welchen die Akzeptanzrate festgelegt werden sollte, wurde $r_{\text{acc}} = 0.8$ gewählt. Die Ursache hierfür lag darin, dass $r_{\text{acc}} = 0.5$ für die Akzeptanzrate Temperaturen ab etwa $T = 0.8$ nicht mehr erreicht werden konnte (siehe Abbildung 3). Selbst bei vollständiger Öffnung des maximalen Updatekegels, was einer freien, zufälligen Wahl des Bindungsvektors entspricht (random walk, simple sampling), wurden für diese Temperaturen noch mehr als die Hälfte der Updatevorschläge angenommen. Außerdem liegen bei tieferen Temperaturen die Akzeptanzraten ohnehin in der Nähe von $r_{\text{acc}} \approx 0.5$. Um mögliche Fehler durch eine erzwungene Änderung dieser Rate zu messen, wäre es aber sinnvoll, wenn die Änderung möglichst stark ausfiele. Aus diesen Gründen wurde dann der bereits erwähnte Wert $r_{\text{acc}} = 0.8$ gewählt, der zumindest für tiefe Temperaturen eine vernünftige Abweichung von der bei den angegebenen Parametern generisch auftretenden Akzeptanzrate darstellt.

An dieser Stelle sollen noch die Definitionen und Skalierungen angegeben werden, die bei den Messungen verwendet wurden. Die mittlere Energie wie auch die Wärmekapazität wurden jeweils mit der Anzahl an Bindungswinkeln (also $N - 1 = 19$) skaliert. Dieses Vorgehen erklärt sich aus der exakten Lösung. Es tritt dann kein finite-size Effekt auf. Der End-zu-End Abstand wurde auf

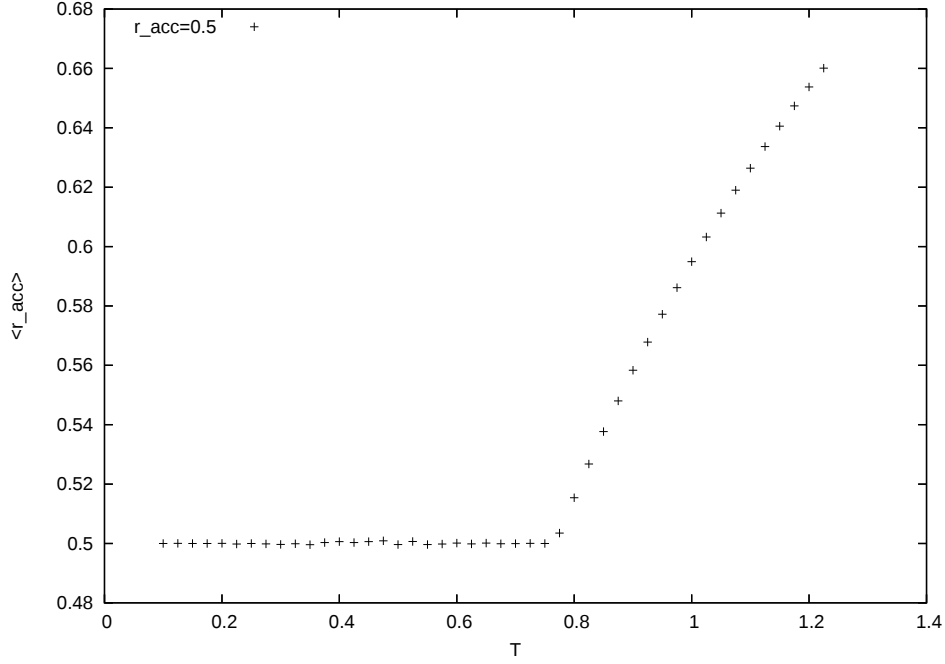


Abbildung 3: Der Versuch, die Akzeptanzrate auf $r_{\text{acc}} = 0.5$ zu halten, schlägt fehl.

folgende Weise berechnet:

$$R_{\text{ee}} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \mathbf{s}_i . \quad (2.2)$$

Diese Normierung ergibt für den Grundzustand, die gestreckte Kette, einen End-zu-End Abstand von $R_{\text{ee}} = 1.0$. Für die Berechnung des Gyrationradius wurde folgende Vorschrift verwendet:

$$R_{\text{gyr}} = \frac{1}{N+1} \sqrt{\sum_{i=0}^{N+1} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^2} \quad \text{mit} \quad \bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^{N+1} \mathbf{x}_i , \quad \mathbf{x}_i = \sum_{j=0}^{i-1} \mathbf{s}_j \quad \text{und} \quad \mathbf{x}_0 = \mathbf{0} . \quad (2.3)$$

Dabei sind $\mathbf{x}_i$ mit $i = 0, \dots, N+1$ die $N+1$ Ortsvektoren der Monomere. Leider führt die Normierung mit $N+1 = 21$ nicht dazu, dass der Gyrationradius in Grenzen von $0 \leq R_{\text{gyr}} \leq 1$ liegt. Für die Fluktuationen von End-zu-End Abstand und Gyrationradius wurde analog zur Wärmekapazität eine statistisch sinnvolle Umschreibung der Ableitung nach der Temperatur T benutzt:

$$\frac{\partial \langle R_{\text{ee/gyr}} \rangle}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} (\langle R_{\text{ee/gyr}} E \rangle - \langle R_{\text{ee/gyr}} \rangle \langle E \rangle) . \quad (2.4)$$

Dabei war wie schon erwähnt für die Simulationen $k_B \equiv 1$. Diese Formulierung ist für die Fluktu-

ation jedes Erwartungswertes einer Observablen $\mathcal{A}$ anwendbar:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial T} \langle \mathcal{A} \rangle &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{\sum_{\{s\}} \mathcal{A} e^{-\beta E_{\{s\}}}}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta E_{\{s\}}}} = \underbrace{\frac{\partial \beta}{\partial T}}_{\left(-\frac{1}{k_B T^2}\right)} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\sum_{\{s\}} \mathcal{A} e^{-\beta E_{\{s\}}}}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta E_{\{s\}}}} \\
&= \left(-\frac{1}{k_B T^2}\right) \frac{\frac{\partial}{\partial \beta} \left[\sum_{\{s\}} \mathcal{A} e^{-\beta E_{\{s\}}} \right] \left(\sum_{\{s\}} e^{-\beta E_{\{s\}}} \right) - \left(\sum_{\{s\}} \mathcal{A} e^{-\beta E_{\{s\}}} \right) \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\sum_{\{s\}} e^{-\beta E_{\{s\}}} \right]}{\left(\sum_{\{s\}} e^{-\beta E_{\{s\}}} \right)^2} \\
&= \left(-\frac{1}{k_B T^2}\right) \left(\frac{\sum_{\{s\}} \mathcal{A} (-E) e^{-\beta E_{\{s\}}}}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta E_{\{s\}}}} - \frac{\left(\sum_{\{s\}} \mathcal{A} e^{-\beta E_{\{s\}}} \right) \left(\sum_{\{s\}} -E e^{-\beta E_{\{s\}}} \right)}{\left(\sum_{\{s\}} e^{-\beta E_{\{s\}}} \right)^2} \right) \\
&= \frac{1}{k_B T^2} (\langle \mathcal{A} E \rangle - \langle \mathcal{A} \rangle \langle E \rangle) . \tag{2.5}
\end{aligned}$$

3 Berechnungen zum 1d Heisenberg Modell

Die Berechnungen finden allesamt für freie Randbedingungen statt. Sie werden vor die Darstellung der Messergebnisse gezogen, um einen direkten Vergleich zu ermöglichen. Zunächst sind wir an der Zustandssumme interessiert. Hierfür müssen wir über alle Konfigurationen eines Polymers summieren, bzw. integrieren, da die Freiheitsgrade kontinuierlich sind. Die einzelnen Konfigurationen seien durch die (Ver)Bindungsvektoren $\mathbf{s}_i$ jedes Monomers zum jeweils nächsten gegeben. Die Energiefunktion hängt nur von den Bindungswinkeln ab, die von jeweils drei Monomeren eingeschlossen werden, d.h. es ist sinnvoll für die Integration den Gesamtzustand mit Hilfe der Bindungswinkel ϑ_i zu parametrisieren. Dies entspricht einem Übergang zu Kugelkoordinaten, es muss also die Jacobideterminante berücksichtigt werden. Wenn N die Anzahl der Bindungen zwischen zwei Monomeren ist, gibt es gerade $N + 1$ Monomere und entsprechend $N - 1$ solche Bindungswinkel. Die Zustandssumme wird damit:

$$\begin{aligned}
Z_{N-1} &= \int_{|\mathbf{s}_1|=1} d\mathbf{s}_1 \int_{|\mathbf{s}_2|=1} d\mathbf{s}_2 \dots \int_{|\mathbf{s}_N|=1} d\mathbf{s}_N \exp \left[-\beta \left(-J \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+1} \right) \right] \\
&= \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \dots \int d\Omega_{N-1} \exp \left[\beta J \sum_{i=1}^{N-1} \cos \vartheta_i \right] \\
&= \left(\int d\Omega_i \exp [\beta J \cos \vartheta_i] \right)^{N-1} = Z_1^{N-1} . \tag{3.1}
\end{aligned}$$

An dieser Umschreibung kann man schon erkennen, dass später durch eine geeignete Normierung Energie, Wärmekapazität und alle anderen thermodynamischen Größen völlig unabhängig von der Anzahl der Monomere werden. Es sind also in diesem Modell keinerlei finite size Effekte zu beobachten. Dies ändert sich nur, wenn man periodische Randbedingungen benutzt. Dann wird allerdings die Berechnung sehr kompliziert, da dann (3.1) nicht mehr faktorisiert werden kann.

Jetzt muss das Integral in (3.1) gelöst werden.

$$\begin{aligned}
Z_1 &= \int d\Omega \exp[\beta J \cos \vartheta] = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \exp[\beta J \cos \vartheta] \\
&= 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) \exp[\beta J \cos \vartheta] = 2\pi \left[\frac{1}{\beta J} \exp[\beta J \cos \vartheta] \right]_{\cos \vartheta=-1}^{\cos \vartheta=1} \\
&= \frac{2\pi}{\beta J} \underbrace{(e^{\beta J} - e^{-\beta J})}_{2 \sinh(\beta J)} = \frac{4\pi}{\beta J} \sinh(\beta J)
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Ausgehend von der bereits angesprochenen Normierung mit der reziproken Anzahl der Bindungswinkel $1/(N-1)$ kann (3.2) direkt zur Berechnung der normierten freien Energie, Entropie, inneren Energie und Wärmekapazität benutzt werden.

$$F_1 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_1 = -k_B T \ln \left(\frac{4\pi k_B T}{J} \sinh \left(\frac{J}{k_B T} \right) \right) \tag{3.3}$$

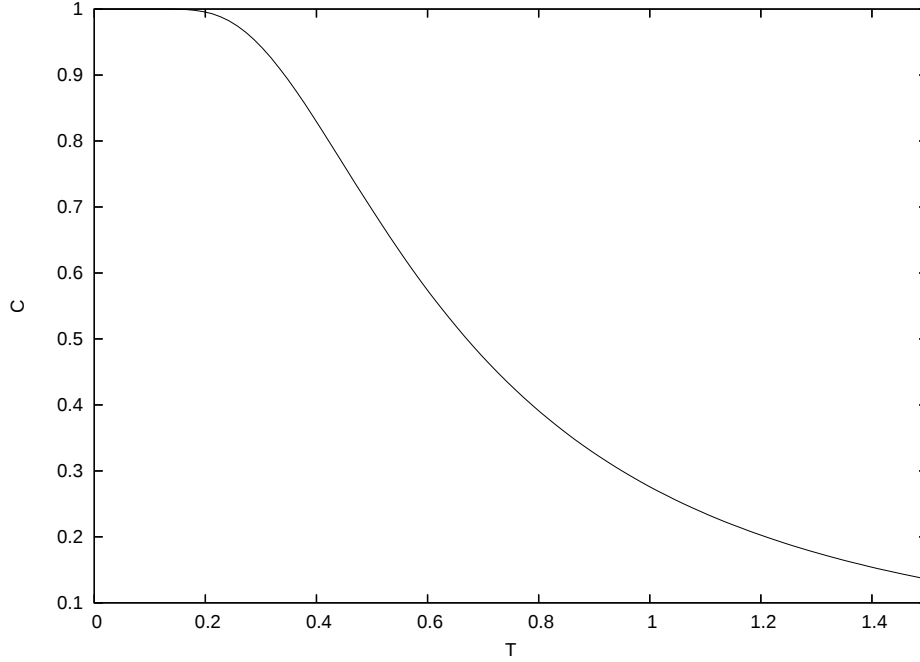
$$\begin{aligned}
S_1 &= -\frac{\partial F_1}{\partial T} = k_B \ln Z_1 + k_B T \frac{1}{Z_1} \left(\frac{4\pi k_B}{J} \right) \\
&\quad \cdot \left(\sinh \left(\frac{J}{k_B T} \right) + T \cosh \left(\frac{J}{k_B T} \right) \left(-\frac{J}{k_B T^2} \right) \right) \\
&= k_B \left(\ln \left(\frac{4\pi k_B T}{J} \sinh \left(\frac{J}{k_B T} \right) \right) + 1 - \frac{J}{k_B T} \cosh \left(\frac{J}{k_B T} \right) \right)
\end{aligned} \tag{3.4}$$

$$U_1 = F_1 + TS_1 = k_B T - J \coth \left(\frac{J}{k_B T} \right) \tag{3.5}$$

$$\begin{aligned}
C_1 &= \frac{\partial U_1}{\partial T} = k_B - J \left(-\frac{1}{\sinh^2 \left(\frac{J}{k_B T} \right)} \right) \left(-\frac{J}{k_B T^2} \right) \\
&= k_B - \frac{J^2}{k_B T^2} \frac{1}{\sinh^2 \left(\frac{J}{k_B T} \right)}
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Im Gegensatz zu dem Fall mit periodischen Randbedingungen zeigt die Wärmekapazität für freie Randbedingungen ein unspektakuläres Verhalten (siehe Abbildung 4). Zunächst sieht man der Gleichung (3.6) an, dass C_1 für niedrige Temperaturen tatsächlich gegen k_B geht, da das Verhalten von $\sinh(1/T)$, welche aus Exponentialfunktionen zusammengesetzt ist, stärker ist als T^2 .

$$\begin{aligned}
\lim_{T \rightarrow 0} C_1 &= \lim_{T \rightarrow 0} \left(k_B - \frac{J^2}{k_B T^2} \frac{1}{\sinh^2 \left(\frac{J}{k_B T} \right)} \right) \\
&= k_B - \frac{J^2}{k_B} \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{\underbrace{T^2}_{\rightarrow 0} \underbrace{\left(\exp \left[\frac{2J}{k_B T} \right] + \exp \left[-\frac{2J}{k_B T} \right] - 2 \right)}_{\rightarrow \infty}} = k_B
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Abbildung 4: Normierte exakte Wärmekapazität mit $k_B \equiv J \equiv 1$.

Es soll nun noch rechnerisch überprüft werden, dass der Anstieg der Wärmekapazität für T gegen 0 tatsächlich verschwindet, wie man nach Abbildung 4 erwarten würde.

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1}{\partial T} &= \frac{J^2}{k_B} \left(\frac{2}{T^3} \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{J}{k_B T}\right)} + \frac{2}{T^2} \frac{1}{\sinh^3\left(\frac{J}{k_B T}\right)} \cosh\left(\frac{J}{k_B T}\right) \left(-\frac{J}{k_B T^2}\right) \right) \\ &= (k_B - C_1) \left(\frac{2}{T} - \frac{2J}{k_B T^2} \coth\left(\frac{J}{k_B T}\right) \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Es ist absehbar, dass ähnlich wie in der Herleitung zu (3.7) auch bei der Ableitung der Wärmekapazität der für T gegen 0 exponentiell abfallende Term den zweiten ($\sim -1/T^2$) kompensiert und die Ableitung damit tatsächlich für tiefe Temperaturen gegen 0 geht.

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial C_1}{\partial T} = \lim_{T \rightarrow 0} \underbrace{(k_B - C_1)}_{\rightarrow 0} \underbrace{\left(\frac{2}{T} - \frac{2J}{k_B T^2} \coth\left(\frac{J}{k_B T}\right) \right)}_{\rightarrow -\infty} = 0 \quad (3.9)$$

Mit dieser Betrachtung sieht man auch ein, dass es bis auf das lokale Maximum bei $T = 0$ und die Asymptotik gegen ein Minimum für große Temperaturen keine lokalen Extrempunkte gibt.

Für periodische Randbedingungen findet man einen finite-size Effekt in Form eines lokalen Maximums in der Wärmekapazität bei tiefen Temperaturen (siehe Abbildung 5). Erwartungsgemäß ist dieses am stärksten ausgeprägt für kleine Anzahlen von Monomeren und verliert sich für größere. Denn dann spielen die Randeffekte eine geringere Rolle und das Verhalten sollte gegen die exakte Lösung für freie Randbedingungen gehen, da diese für beliebige Polymerlängen gültig ist. Für Abbildung 5 wurden die Wärmekapazitäten, im Gegensatz zur Messung mit freien Randbedingungen, mit der Anzahl von Monomeren $N + 1$ normiert, da hier ein zusätzlicher Energie-Term am Rand auftritt.

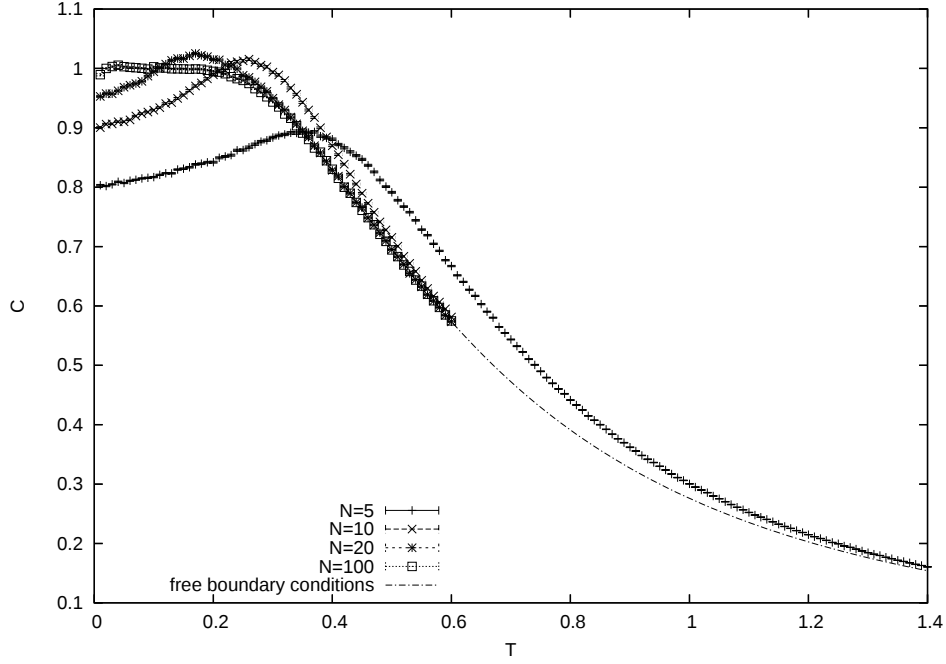


Abbildung 5: Wärmekapazität für periodische Randbedingungen bei verschiedenen Polymerlängen.

4 Fehlerbehandlung

Sämtliche angegebenen Fehler in den folgenden Ergebnissen aus den Monte-Carlo-Simulationen wurden mit der Jackknifing-Methode berechnet. Bei allen Fluktuationsgrößen, das heißt bei der Wärmekapazität und den Fluktuationen des End-zu-End Abstandes und des Gyrationsradius, wurden zum Vergleich auch die Fehler nach der Binningmethode berechnet. Es traten hierbei keine erheblichen Abweichungen auf. Dieser Vergleich macht nur bei Fluktuationsgrößen Sinn, da für Größen, über die einfach gemittelt wird, der Binningfehler exakt mit dem Jackknifefehler übereinstimmt, wie die folgende Herleitung zeigen soll. Bei der Herleitung wurde auf die in Referenz [1] verwendete Notation zurückgegriffen.

Es sei S die Summe über alle Daten, und S_n die Summe über die Daten im n -ten Bin. Die Länge eines Bins sei k , die Anzahl von Bins N_B . Das entspricht einer gesamten Datenmenge von $N = kN_B$. Daraus folgt, dass

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{kN_B} \underbrace{\sum_{i=1}^{kN_B} \mathcal{O}_i}_S = \frac{1}{kN_B} S = \bar{\mathcal{O}}_B = \bar{\mathcal{O}}_J, \quad (4.1)$$

$$\mathcal{O}_{B,n} = \frac{1}{k} \underbrace{\sum_{i=1}^k \mathcal{O}_{(n-1)k+i}}_{S_n} = \frac{1}{k} S_n, \quad (4.2)$$

$$\mathcal{O}_{J,n} = \frac{1}{k(N_B - 1)} \left(\underbrace{\sum_{i=1}^{kN_B} \mathcal{O}_i}_S - \underbrace{\sum_{i=1}^k \mathcal{O}_{(n-1)k+i}}_{S_n} \right) = \frac{1}{k(N_B - 1)} (S - S_n). \quad (4.3)$$

Die Frage lautet nun, ob die Fehler der Jackknife- und Binninganalyse gleich sind:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_B(N_B-1)} \sum_{n=1}^{N_B} (\mathcal{O}_{B,N} - \bar{\mathcal{O}}_B)^2 &= \frac{1}{N_B(N_B-1)} \sum_{n=1}^{N_B} \left(\frac{1}{k} S_n - \frac{1}{kN_B} S \right)^2 \\ &\stackrel{?}{=} \frac{N_B-1}{N_B} \sum_{n=1}^{N_B} (\mathcal{O}_{J,N} - \bar{\mathcal{O}}_B)^2 = \frac{N_B-1}{N_B} \sum_{n=1}^{N_B} \left(\frac{1}{k(N_B-1)} (S - S_n) - \frac{1}{kN_B} S \right)^2 \end{aligned} \quad (4.4)$$

Durch Multiplikation auf beiden Seiten mit $k^2 N_B$ bleibt als zu zeigende Behauptung:

$$\frac{1}{N_B-1} \sum_{n=1}^{N_B} (N_B S_n - S)^2 \stackrel{?}{=} \frac{N_B-1}{1} \sum_{n=1}^{N_B} \left(\frac{N_B}{N_B-1} S - \frac{N_B}{N_B-1} S_n - S \right)^2. \quad (4.5)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung (also die Jackknife-Formulierung) lässt sich wie folgt umformen:

$$\begin{aligned} &\frac{N_B-1}{1} \sum_{n=1}^{N_B} \left(\frac{N_B}{N_B-1} S - \frac{N_B}{N_B-1} S_n - S \right)^2 \\ &= \frac{N_B-1}{1} \sum_{n=1}^{N_B} \left(\frac{N_B - (N_B-1)}{N_B-1} S - \frac{N_B}{N_B-1} S_n \right)^2 \\ &= \frac{N_B-1}{1} \sum_{n=1}^{N_B} \left(\frac{1}{N_B-1} (S - N_B S_n) \right)^2 = \frac{1}{N_B-1} \sum_{n=1}^{N_B} (N_B S_n - S)^2. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Der Vergleich mit (4.5) zeigt die exakte Übereinstimmung von Jackknife- und Binningfehler.

Für die Bestimmung einer sinnvollen Binggröße wurde zunächst in einigen Testläufen die Autokorrelationszeit abgeschätzt. Für niedrigere Temperaturen, d.h. $T = 0.01$ und $T = 0.1$, war es nicht möglich einen sinnvollen exponentiell abfallenden Fit an die Autokorrelationsfunktion zu machen (siehe auch Abbildung 6). Daher wurden für diese beiden Temperaturen nur die integrierte Autokorrelationszeit gemessen. Der Abbruchparameter für die Berechnung der integrierten Autokorrelationszeit $k_{\max}$ wurde bestimmt, indem im Plot der Autokorrelationsfunktion gesucht wurde, ab welchem k das Rauschen den vernünftigen Verlauf überwiegt.

T	0.01	0.1	0.7	1.2
$k_{\max}$	500	200	100	100
τ_{exp}	-	-	≈ 12.6	≈ 11.6
$\tau_{\text{int}}(k_{\max})$	≈ 25.2	≈ 10.9	≈ 12.7	≈ 11.7

Tabelle 1: Autokorrelationszeiten für verschiedene Temperaturen.

Aufgrund dieser Auswertungen wählte ich eine Binggröße von 2500 Datenpunkten. Es ergab sich daraus eine immer noch akzeptable Statistik von 4000 Blöcken für die Fehlerabschätzung.

5 Messergebnisse

Wie auf den Abbildungen 7 bis 12 ersichtlich ist, werden die exakt bekannten Größen Energie und Wärmekapazität durch die Messung sehr gut reproduziert. Auch der End-zu-End Abstand und der Gyrationradius geben glatte Kurven mit kleinen Fehlern. Wie man erwarten würde, nimmt der End-zu-End Abstand genau wie der Gyrationradius mit wachsender Temperatur kontinuierlich ab. Denn dann werden durch die thermischen Fluktuationen öfter Ketten realisiert, die sich stark vom Grundzustand des gestreckten Polymers unterscheiden.

Abbildung 13 soll einen Eindruck von den Unterschieden der Akzeptanzrate r_{acc} und des diesbezüglich eingestellten Parameters $a_{\min}$ vermitteln.

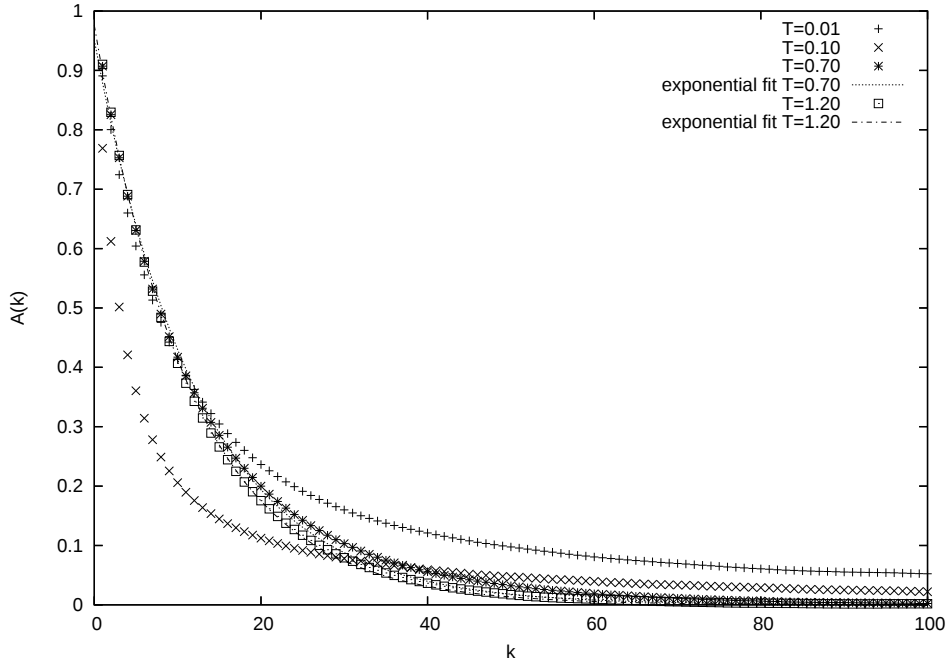


Abbildung 6: Autokorrelationsfunktion für verschiedene Temperaturen.

Eigentliches Ziel der Messung sollte jedoch der Vergleich der herkömmlichen Messung mit der sein, bei der die Akzeptanzrate festgehalten wird. Auf den Bildern ab Abbildung 7 ist jedoch zunächst kein gravierender Unterschied der beiden Messungen ersichtlich. Deshalb soll noch die relative Abweichung der gemessenen mittleren Energie und Wärmekapazität mit den exakten Werten verglichen werden (siehe Abbildungen 15 und 16).

Hier läßt sich erkennen, dass tatsächlich beide Messungen gleichmäßig um die exakten Ergebnisse streuen. Demnach scheint beim durchgeführten Experiment keine Abweichung aufzutreten, wenn man die Akzeptanzrate durch eine Anpassung des Updateparameters während der laufenden Messung einstellt. Es läßt sich vielmehr besonders bei der Wärmekapazität die Tendenz erkennen, dass für niedrige Temperaturen die Fehler bei der normalen Messung kleiner sind, für größere jedoch eher die mit festgehaltener Akzeptanzrate. Die Fehler der Energie sind für niedrige Temperaturen so klein, da dann - wie auch aus den zugehörigen Histogrammen ersichtlich werden wird - die Verteilungsbreite σ sehr kleine Werte annimmt. Es sind nur solche Zustände in relevanter Häufigkeit realisiert, die sehr nahe am Grundzustand liegen. Die anderen werden sehr stark unterdrückt. Entsprechend wird der Fehler, den man bei der Mittelung über die Energien macht, sehr klein.

Die bereits angesprochene Tendenz, dass für höhere Temperaturen die Fehler für die Messung mit fester Akzeptanzrate kleiner zu werden scheinen, könnte sich durch einen Blick auf Abbildung 13 erklären lassen. Bis etwa $T = 0.4$ liegt die Akzeptanzrate für den normalen Versuch unter der festen 0.8. Ab dann ändert sich dies allerdings und es ist damit die festgehaltene Akzeptanzrate näher an den als optimal angenommenen 0.5. Allerdings ist natürlich nicht klar, ob das angesprochene Verhalten der Fehler tatsächlich daher rührt. Immerhin kann man es sowohl bei der Energie als auch bei der Wärmekapazität beobachten.

Es wäre nun denkbar, dass nur deshalb keine nennenswerte Abweichung der Messergebnisse auftritt, weil sich kurz nach Beginn der Simulation ein Öffnungswinkel einstellt, für den die Akzeptanzrate gerade auf dem gewünschten Wert (0.8) liegt, und der Updateparameter danach konstant bleibt. Dann wäre es möglich, dass durch die hohe Statistik die kurze Anfangsphase, in der der Parameter tatsächlich geändert wurde nach einer langen Simulationszeit nicht mehr ins Gewicht fällt. Dies ist allerdings nicht der Fall, wie Abbildung 17 zeigen soll. Bei der gewählten Meth-

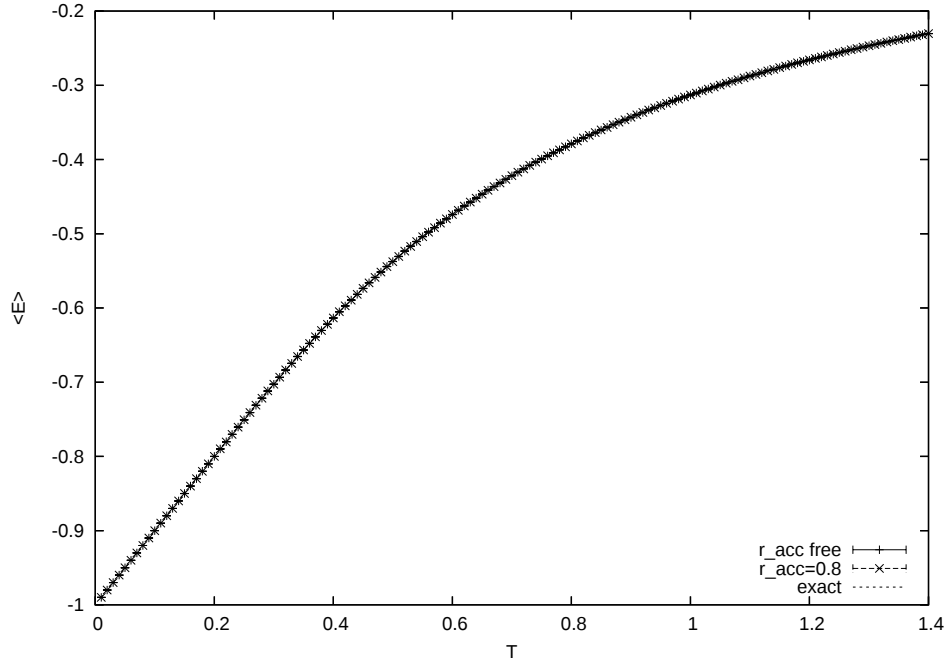


Abbildung 7: Energie.

ode, in der der Parameter nach jedem sweep um einen festen Wert geändert wird, muss dieser auch bei langen Simulationszeiten ständig korrigiert werden und fluktuiert daher selbst bei langen Simulationen (10 Millionen sweeps) über die gesamte Monte Carlo Zeit.

Außerdem wurden noch die Verteilungen von Energie, End-zu-End Abstand und Gyrationradius gemessen. Bei den Plots 18 bis 23 wurden die besonders tiefen Temperaturen (bei der Energie bis $T = 0.1$ und bei End-zu-End Abstand und Gyrationradius bis $T = 0.03$) abgeschnitten, da dort die Verteilungen sehr scharf - also schmal und hoch - waren. Man hätte dann den abgeflachten Rest für höhere Temperaturen kaum noch gesehen.

Das jeweilige Verhalten ist so, wie man es auch erwartet hätte. Die Verteilungen laufen für große Temperaturen breit. Bemerkenswert ist, dass End-zu-End Abstände realisiert werden, die sehr nahe bei $R_{ee} = 0$ liegen. Ein Grund dafür ist, dass es in dem betrachteten Modell keinerlei abstoßende Wechselwirkungen gibt. Der Vergleich der Versuche mit freier und festgehaltener Akzeptanzrate weist auch hier keine Unterschiede auf.

Zusammenfassend kann man feststellen, dass im betrachteten Modell offensichtlich die Änderung des Updateparameters offenbar keinen Einfluss auf das Messergebnis hat.

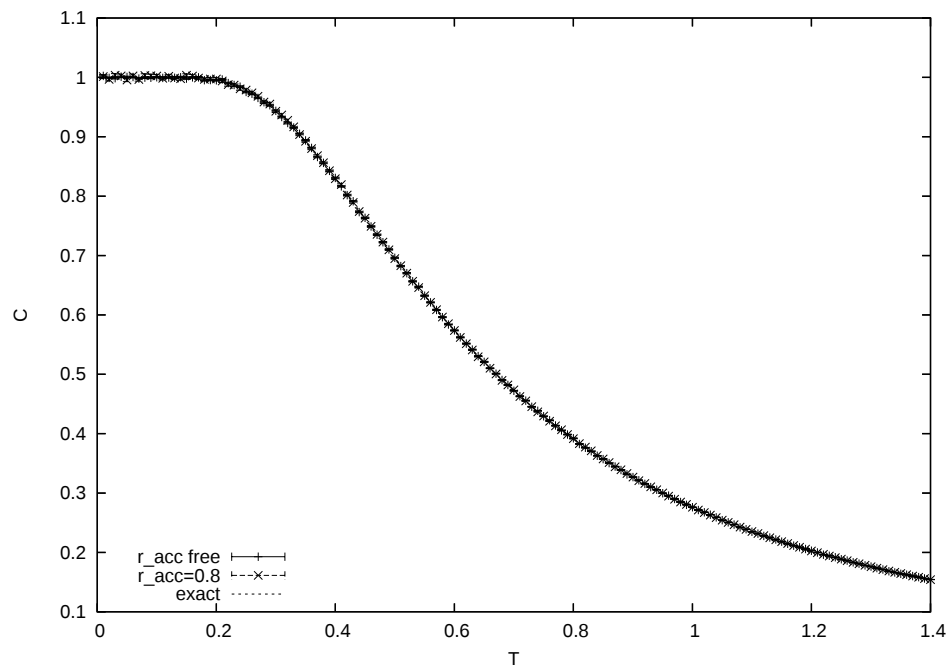


Abbildung 8: Wärmekapazität.

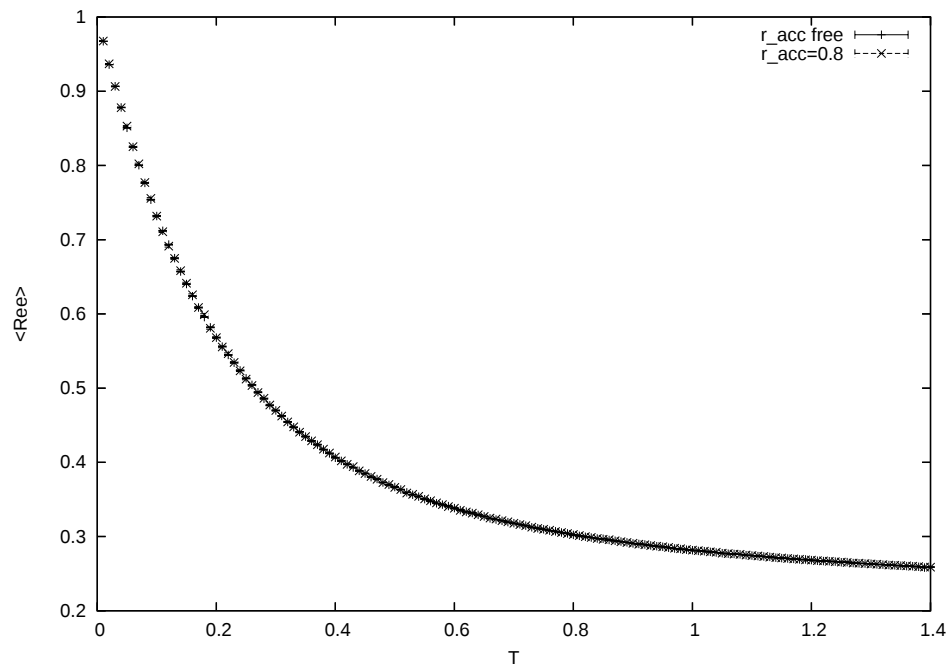


Abbildung 9: End-zu-End Abstand.

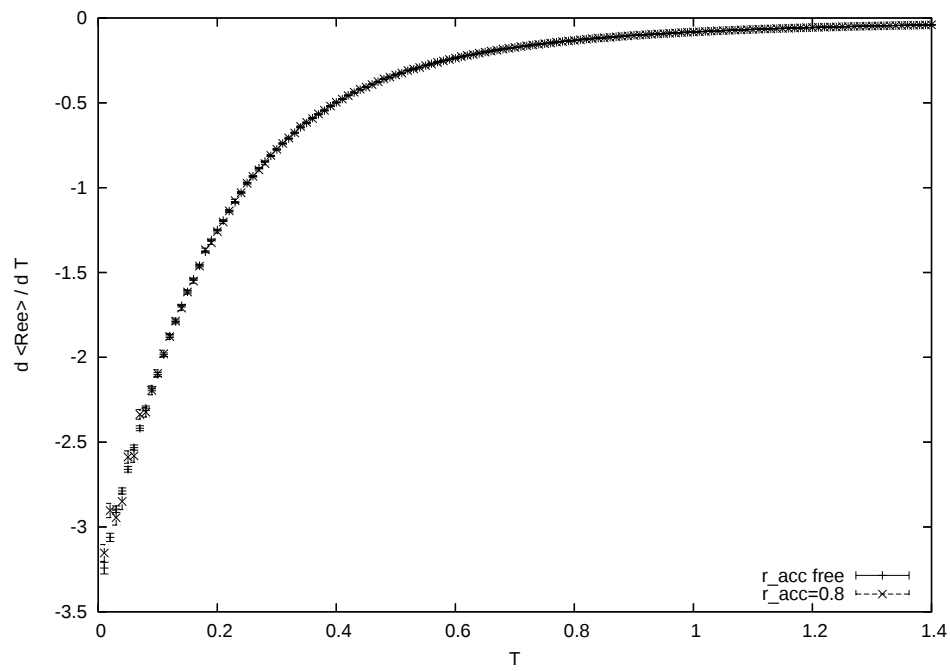


Abbildung 10: Fluktuation des End-zu-End Abstandes.

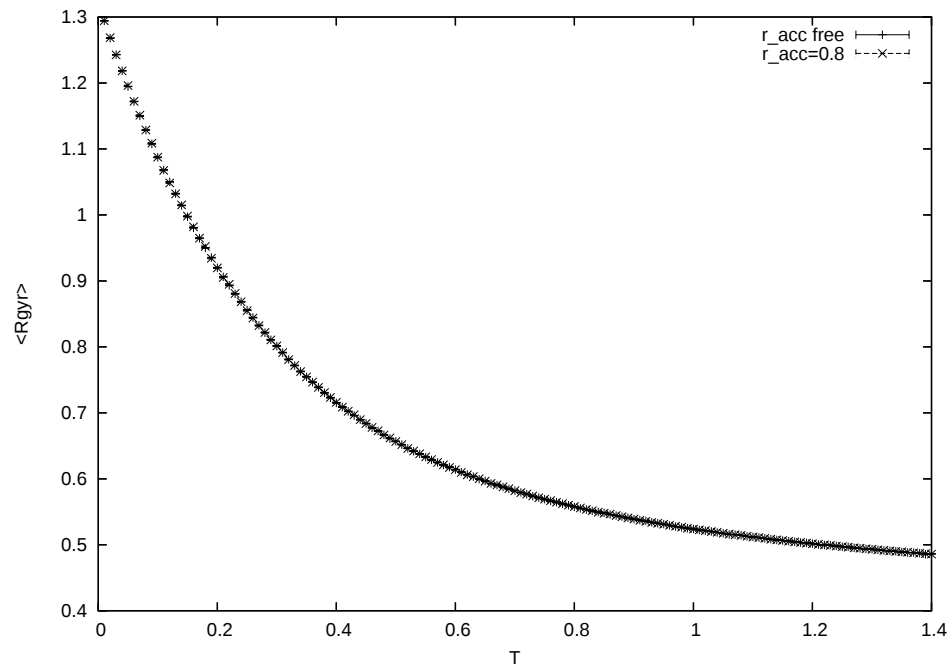


Abbildung 11: Gyrationradius.

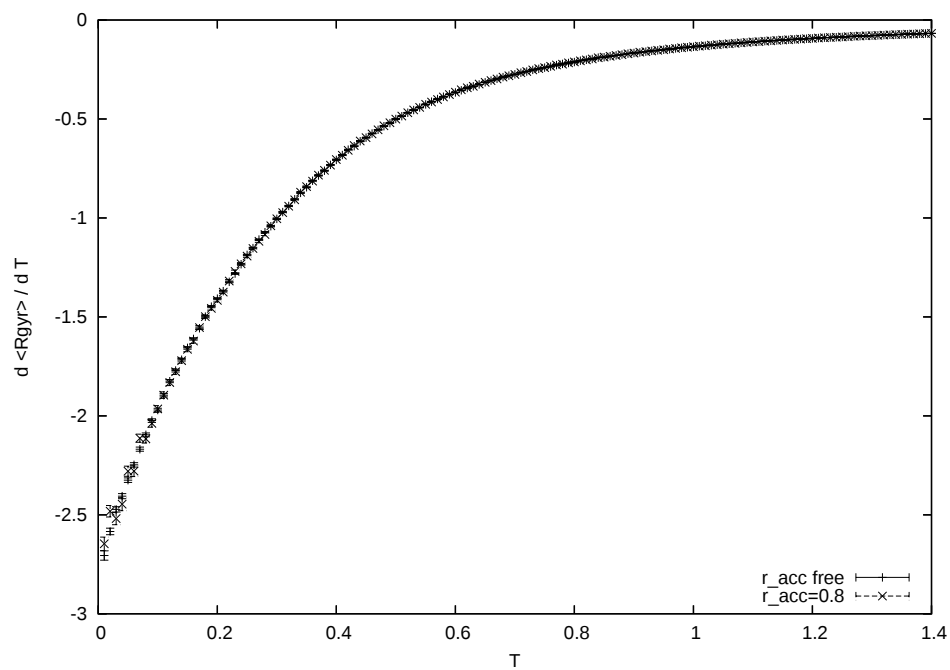


Abbildung 12: Fluktuation des Gyrationradius.

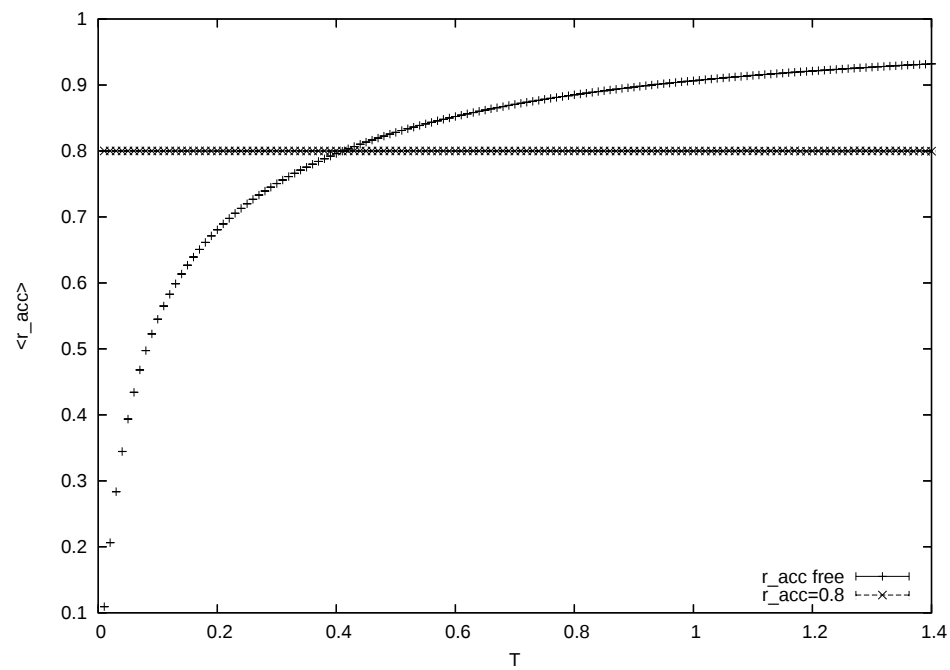


Abbildung 13: Akzeptanzrate.

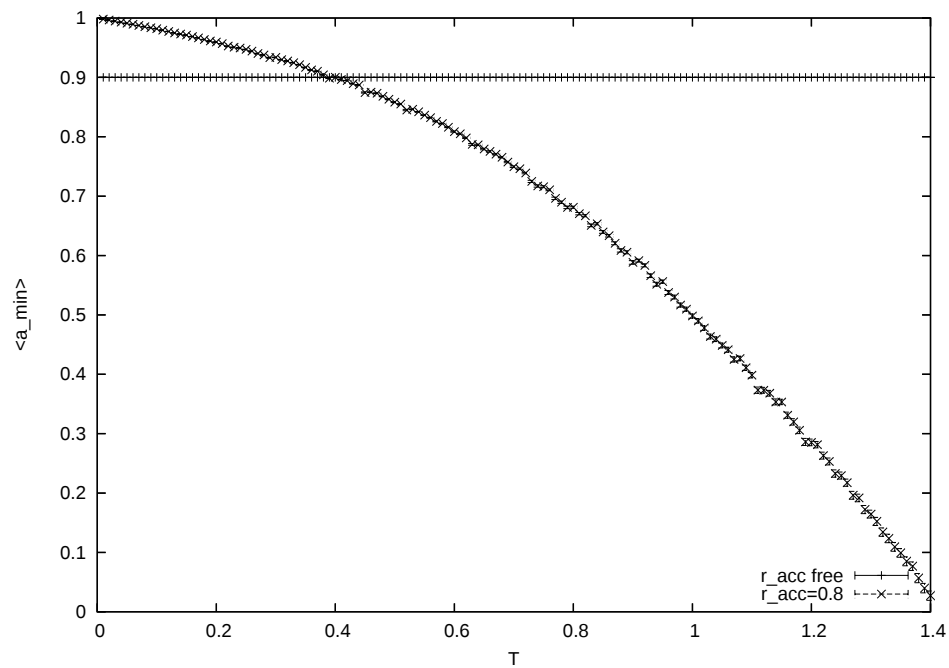
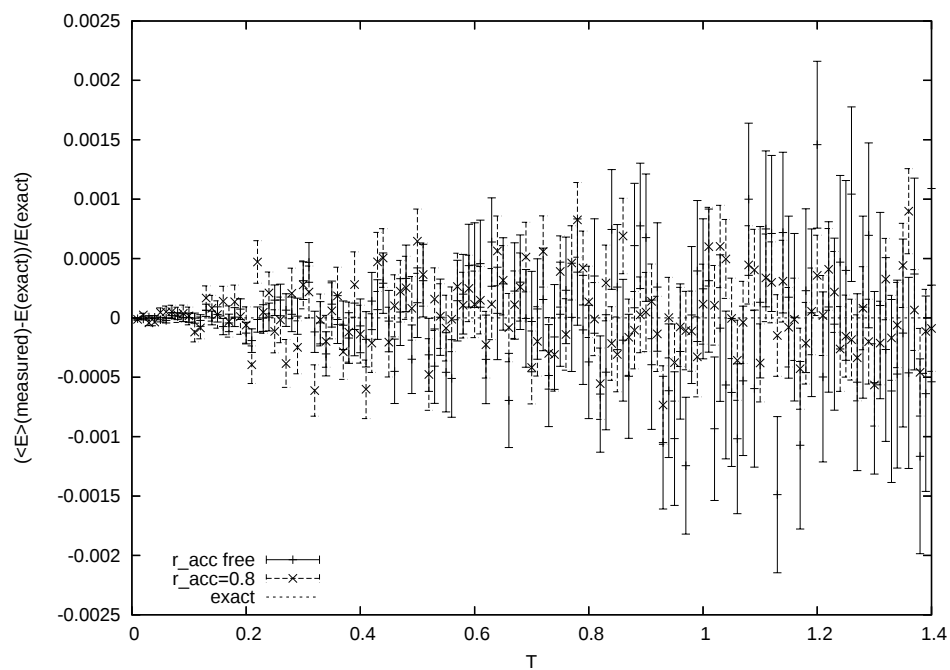
Abbildung 14: Update-Parameter $a_{\min}$.

Abbildung 15: Relative Abweichung der gemessenen Energie von den exakten Werten.

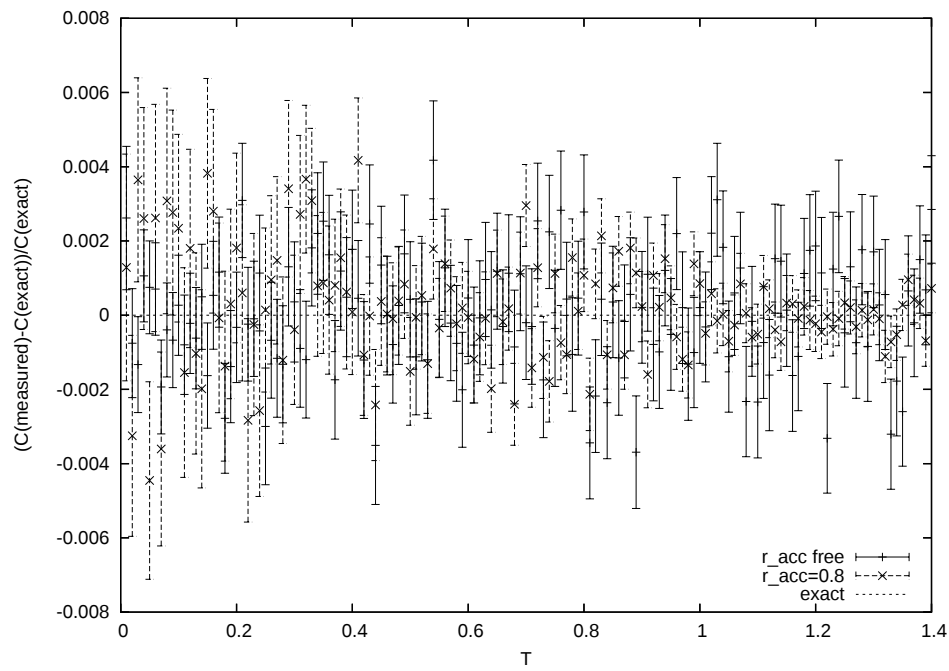


Abbildung 16: Relative Abweichung der gemessenen Wärmekapazität von den exakten Werten.

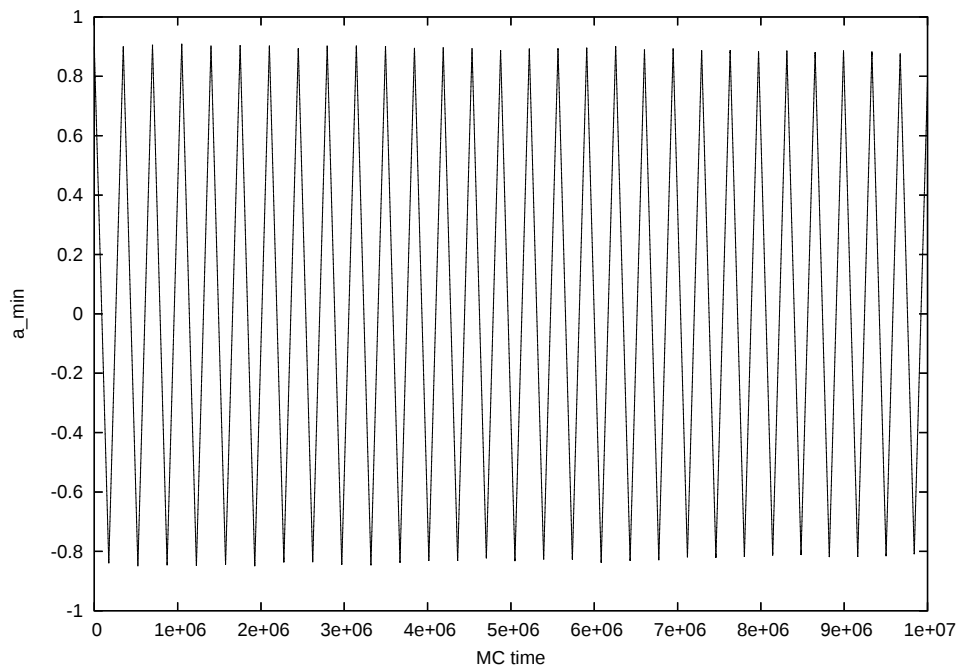


Abbildung 17: Der Öffnungswinkel wird über die gesamte Simulation ständig angepasst und ändert sich stark.

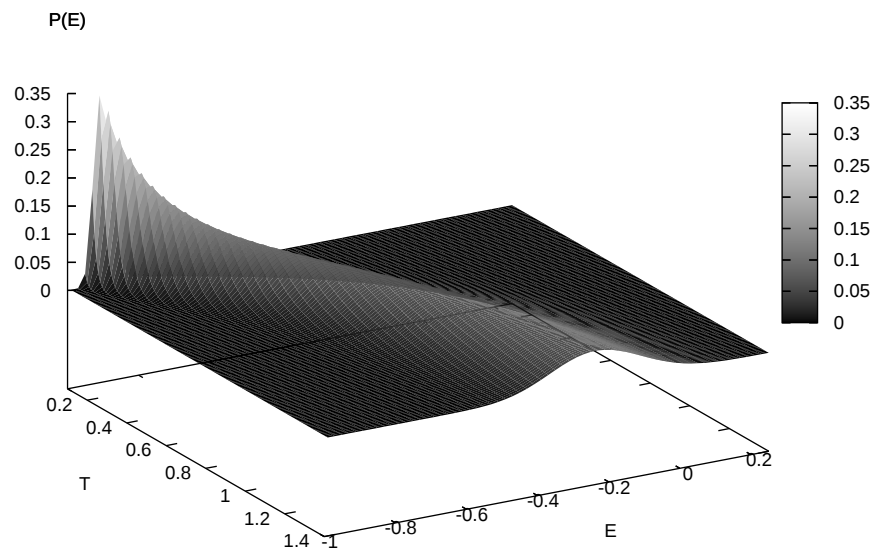


Abbildung 18: Energieverteilung bei der normalen Messung.

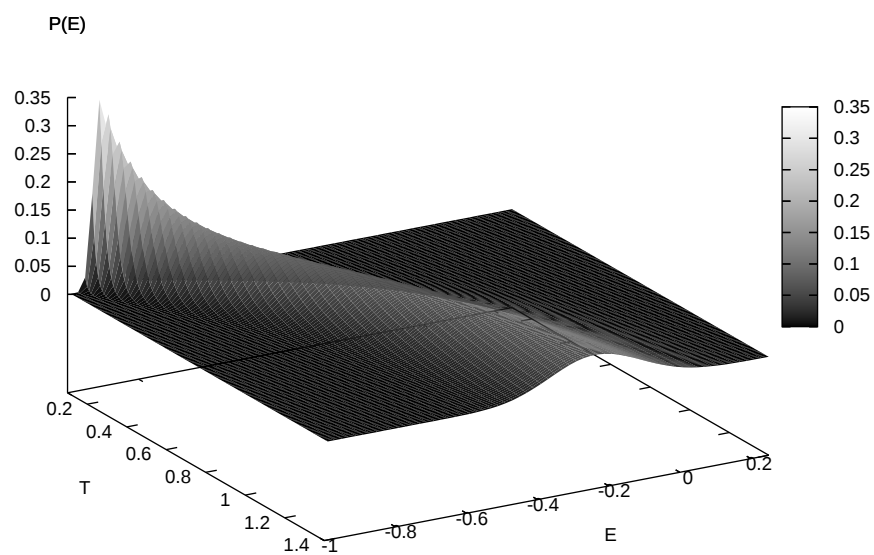


Abbildung 19: Energieverteilung bei der Messung mit festgehaltener Akzeptanzrate.

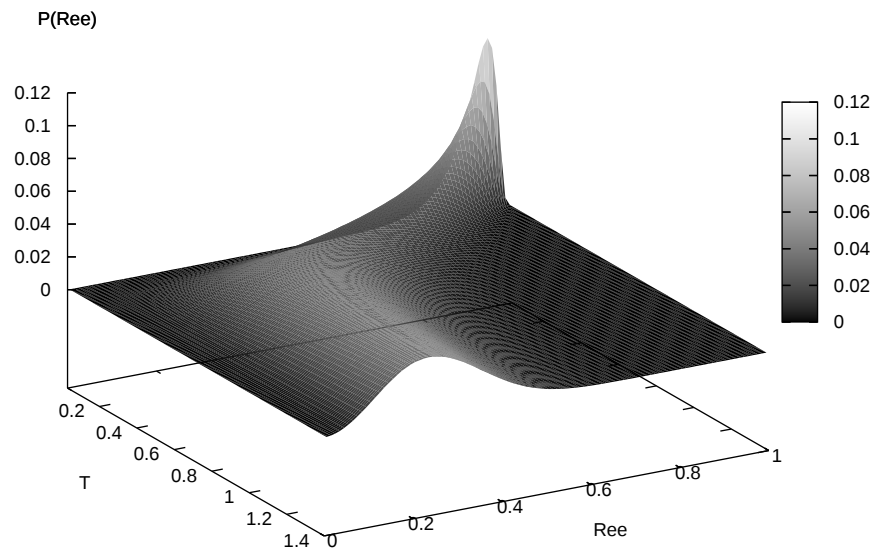


Abbildung 20: Verteilung des End-zu-End Abstandes bei der normalen Messung.

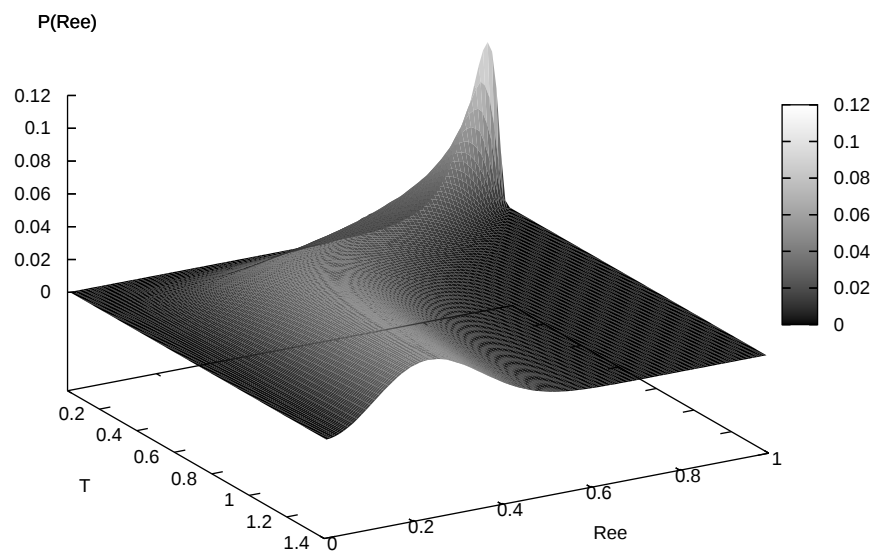


Abbildung 21: Verteilung des End-zu-End Abstandes bei der Messung mit festgehaltener Akzeptanzrate.

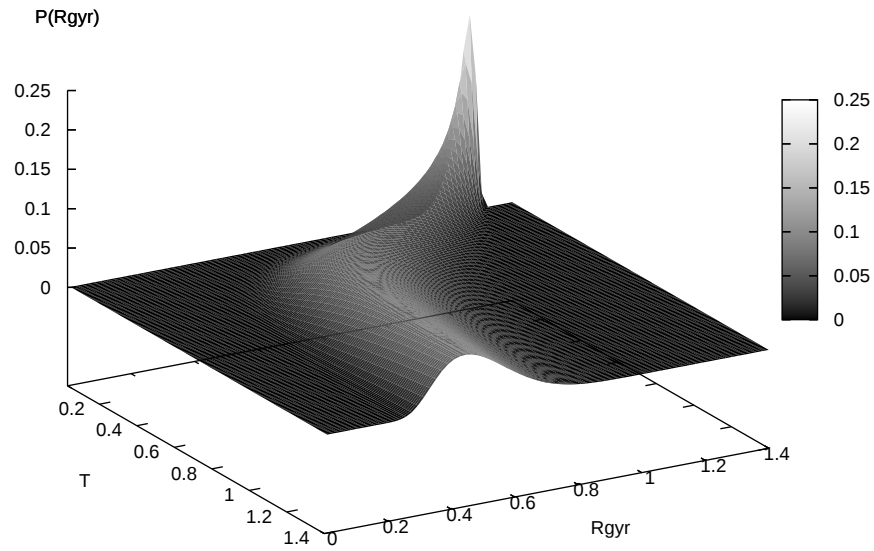


Abbildung 22: Verteilung des Gyrationradius bei der normalen Messung.

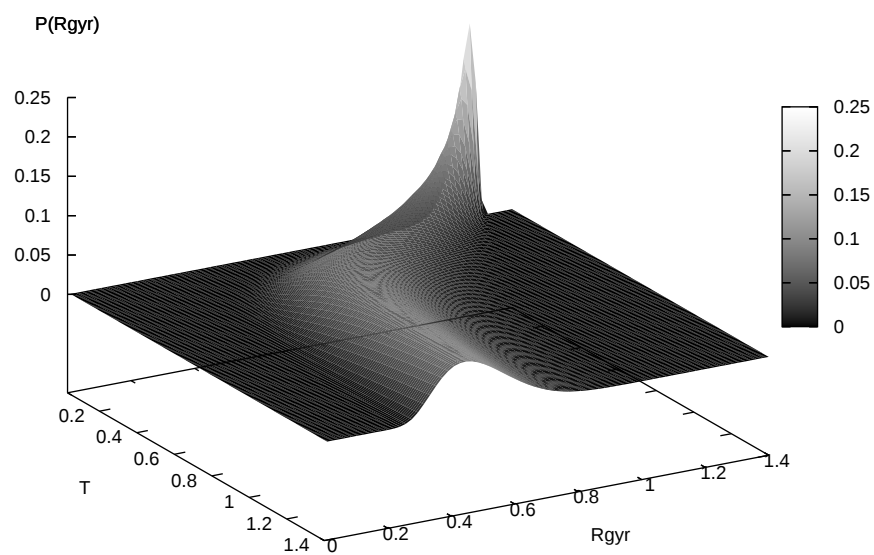


Abbildung 23: Verteilung des Gyrationradius bei der Messung mit festgehaltener Akzeptanzrate.

6 Wärmekapazität bei $O(n)$ -Modellen

Durch die Beobachtung des finite-size Effektes, welcher beim eindimensionalen Heisenberg-Modell mit periodischen Randbedingungen bei tiefen Temperaturen in Form eines lokalen Maximums in der Wärmekapazität auftritt, war die Motivation für den Versuch geschaffen, allgemeinere Aussagen über das Verhalten der Wärmekapazität bei $T = 0$ zu machen. Für die Klasse der eindimensionalen $O(n)$ -Modelle geht dies jedoch wieder nur für freie Randbedingungen gut, da sonst die Berechnungen wesentlich komplizierter werden.

Ein $O(n)$ -Modell entspricht formal exakt dem Heisenberg-Modell, allerdings lebt es in n Dimensionen. Man betrachtet Spins im n -dimensionalen Raum, die zur Vereinfachung der Rechnung wieder die Länge 1 haben sollen. Eine andere Länge würde sich lediglich in einem Faktor niederschlagen. Die Energiefunktion hat wieder folgende Form:

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+1} . \quad (6.1)$$

Um für beliebige Dimensionen die Zustandssumme zu berechnen, bietet sich wieder eine Parametersierung in Kugelkoordinaten an. Kugelkoordinaten in n Dimensionen lassen sich wie folgt ausdrücken:

$$\begin{aligned} x_1^n &= r \sin \alpha_{n-1} \sin \alpha_{n-2} \dots \sin \alpha_2 \sin \alpha_1 \\ x_2^n &= r \sin \alpha_{n-1} \sin \alpha_{n-2} \dots \sin \alpha_2 \cos \alpha_1 \\ x_3^n &= r \sin \alpha_{n-1} \sin \alpha_{n-2} \dots \cos \alpha_2 \\ &\vdots \\ x_{n-1}^n &= r \sin \alpha_{n-1} \cos \alpha_{n-2} \\ x_n^n &= r \cos \alpha_{n-1} \\ \text{allgemein: } x_l^n &= r \prod_{i=l}^{n-1} (\sin \alpha_i) \cos \alpha_{l-1} \quad \text{mit } \alpha_0 \equiv 0 . \end{aligned} \quad (6.2)$$

Dabei sind die Grenzen für die Winkel $\alpha_i \in [0, \pi]$ für $i > 1$ und für den ersten $\alpha_1 \in [0, 2\pi]$. Bei der Berechnung der Zustandssumme wird über alle möglichen relativen Lagen zweier Spins integriert, daher kann ein Spin frei gewählt werden. Bei geschickter Wahl wird das Skalarprodukt zweier nach (6.2) parametrisierten Vektoren $\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j = r_i r_j \cos \alpha_{n-1,j}$. Dabei ist $\alpha_{n-1,j}$ gleichzeitig ein Parameter von $\mathbf{s}_j$ und der von $\mathbf{s}_i$ und $\mathbf{s}_j$ eingeschlossene Winkel. Man kann also (6.1) in anderer Form schreiben:

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \cos \vartheta_i . \quad (6.3)$$

Die Zustandssumme wird also ganz analog zu (3.1):

$$\begin{aligned} Z_{(N-1)}^n &= \int_{|\mathbf{s}_1|=1} d\mathbf{s}_1 \int_{|\mathbf{s}_2|=1} d\mathbf{s}_2 \dots \int_{|\mathbf{s}_N|=1} d\mathbf{s}_N \exp \left[-\beta \left(-J \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+1} \right) \right] \\ &= \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \dots \int d\Omega_{N-1} \exp \left[\beta J \sum_{i=1}^{N-1} \cos \vartheta_i \right] \\ &= \left(\int d\Omega_i \exp [\beta J \cos \vartheta_i] \right)^{N-1} = (Z_1^n)^{N-1} . \end{aligned} \quad (6.4)$$

Mit dieser Definition läßt sich nun der Beitrag eines Bindungswinkels ϑ (Z_1) zur Zustandssumme berechnen. Dafür müssen wir jedoch die Jacobideterminante für n Dimensionen kennen. Mittels

vollständiger Induktion soll bewiesen werden, dass diese gerade

$$|\mathcal{J}^n| = r^{n-1} \prod_{i=1}^{n-1} \sin^{i-1} \alpha_i = |\mathcal{J}^{n-1}| r \sin^{n-2} \alpha_{n-1} \quad (6.5)$$

ist. Der Induktionsanfang für $n = 1$ ist leicht zu zeigen:

$$\mathcal{J}^1 = \frac{\partial r}{\partial r} = 1 = r^{1-1} . \quad (6.6)$$

Für den Induktionsschritt ist es günstig die Form der Jacobideterminante von Kugelkoordinaten für $n + 1$ Dimensionen mit der für n Dimensionen zu vergleichen. Im folgenden seien zeilenweise die Koordinaten x_1^{n+1} bis x_{n+1}^{n+1} eingetragen, während spaltenweise die Ableitungen ∂_{α_n} bis ∂_{α_1} und ∂_r stehen.

$$\mathcal{J}^{n+1} = \begin{vmatrix} \cos \alpha_n x_1^n & \ddots & & \sin \alpha_n \frac{x_1^n}{r} \\ \vdots & & \sin \alpha_n \frac{\partial x_i^n}{\partial \alpha_j} & \vdots \\ \cos \alpha_n x_i^n & & \ddots & \sin \alpha_n \frac{x_i^n}{r} \\ \vdots & & & \vdots \\ -r \sin \alpha_n & 0 & \dots & 0 & \cos \alpha_n \end{vmatrix} \quad (6.7)$$

Bis auf die letzte Zeile lassen sich alle Felder durch $\mathcal{J}^n$ ausdrücken, denn von der zweiten bis zur letzten Spalte stehen genau die Einträge aus $\mathcal{J}^n$ jeweils mit einem Faktor $\sin \alpha_n$ multipliziert. Und die erste Spalte entspricht der letzten, multipliziert mit einem Faktor $r \cos \alpha_n$. Man kann also (6.7) durch Ausmultiplizieren der letzten Zeile mit den sich jeweils ergebenden Unterdeterminanten umschreiben:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^{n+1} &= -(-1)^n r \sin \alpha_n (\mathcal{J}^n \sin^n \alpha_n) + \cos \alpha_n (r \cos \alpha_n (-1)^{n-1} \sin^{n-1} \alpha_n) \\ &= (-1)^{n-1} r \sin^{n-1} \alpha_n \mathcal{J}^n \underbrace{(\sin^2 \alpha_n + \cos^2 \alpha_n)}_{=1} . \end{aligned} \quad (6.8)$$

Damit ist die rekursive Schreibweise von (6.5) gezeigt und es kann an die Integration von (6.4) gegangen werden.

$$\begin{aligned} Z_1^n &= \int d\Omega_i \exp [\beta J \cos \vartheta_i] \\ &= \underbrace{\int_0^{2\pi} d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \dots \int_0^\pi d\alpha_{n-2} \prod_{i=1}^{n-2} (\sin^{i-1} \alpha_i)}_{\Omega_{n-1}} \int_0^\pi d\alpha_{n-1} \sin^{n-2} \alpha_{n-1} \exp[-\beta J \cos \alpha_{n-1}] \end{aligned} \quad (6.9)$$

Dabei ist Ω_{n-1} das Maß in $n - 1$ Dimensionen, also die Oberfläche der $n - 1$ dimensionalen Einheitskugel. Das Integral in (6.9) läßt sich mit Hilfe der Substitution $t = \cos \alpha_{n-1}$ in eine Form

bringen, die auf die modifizierten Besselfunktionen führt:

$$\begin{aligned}
Z_1^n &= \int_0^\pi d\alpha_{n-1} \sin^{n-2} \alpha_{n-1} e^{-\beta J \cos \alpha_{n-1}} = \int_{-1}^1 dt \underbrace{\sin^{n-2} \alpha_{n-1}}_{(1-t^2)^{\frac{n-3}{2}}} e^{-\beta J t} \\
&= \int_{-1}^0 dt (1-t^2)^{\frac{n-3}{2}} e^{-\beta J t} + \int_0^1 dt (1-t^2)^{\frac{n-3}{2}} e^{-\beta J t} \\
&= \int_0^1 dt' (1-t'^2)^{\frac{n-3}{2}} e^{\beta J t'} + \int_0^1 dt (1-t^2)^{\frac{n-3}{2}} e^{-\beta J t} \\
&= \int_0^1 dt (1-t^2)^{\frac{n-3}{2}} (e^{\beta J t} + e^{-\beta J t}) = \int_0^1 dt (1-t^2)^{\frac{n-3}{2}} 2 \cosh(\beta J t) .
\end{aligned} \tag{6.10}$$

Eine Möglichkeit der Definition der modifizierten Besselfunktionen ist [2]:

$$I_m(x) = \frac{2 \left(\frac{x}{2}\right)^m}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right)} \int_0^1 dt (1-t^2)^{m-\frac{1}{2}} \cosh(xt) . \tag{6.11}$$

Mit $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ und $\Omega_{n-1} = (2\sqrt{\pi}^{d-1})/\Gamma((n-1)/2)$ ergibt sich also die Zustandssumme für das $O(n)$ Modell, wenn man in den Gleichungen (6.10) und (6.11) x mit βJ und m mit $n/2 - 1$ identifiziert:

$$Z_1^n = I_{\frac{n-2}{2}}(\beta J) \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{(\beta J)^{\frac{n-2}{2}}} 2^{\frac{n-2}{2}} \frac{2\sqrt{\pi}^{n-1}}{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)} = I_{\frac{n}{2}-1}(\beta J) (\beta J)^{1-\frac{n}{2}} \sqrt{2\pi}^n . \tag{6.12}$$

Um nun die innere Energie zu bestimmen gibt es eine Identität [2] für die modifizierten Besselfunktionen, die im Falle von (6.12) die Ableitung vereinfacht:

$$\frac{\partial}{\partial x} (x^{-n} I_n(x)) = x^{-n} I_{n+1}(x) . \tag{6.13}$$

Damit wird die innere Energie:

$$\begin{aligned}
U_1^n &= -\frac{1}{Z_1^n} \frac{\partial Z_1^n}{\partial \beta} \\
&= - \underbrace{\left(I_{\frac{n}{2}-1}(\beta J) (\beta J)^{-(\frac{n}{2}-1)} \sqrt{2\pi}^n \right)^{-1}}_{\frac{1}{Z_1^n}} \underbrace{I_{\frac{n}{2}}(\beta J) (\beta J)^{-(\frac{n}{2}-1)} \sqrt{2\pi}^n \underbrace{J}_{\frac{\partial(\beta J)}{\partial \beta}}}_{\frac{\partial Z_1^n}{\partial \beta}} \\
&= -J \frac{I_{\frac{n}{2}}(\beta J)}{I_{\frac{n}{2}-1}(\beta J)} .
\end{aligned} \tag{6.14}$$

Mit einer weiteren Identität [2],

$$\frac{\partial}{\partial x} (I_n(x)) = \frac{1}{2} (I_{n-1}(x) + I_{n+1}(x)) , \tag{6.15}$$

kann man daraus die Wärmekapazität berechnen:

$$\begin{aligned}
 C_1^n &= \frac{\partial U_1^n}{\partial T} = \frac{\partial U_1^n}{\partial(\beta J)} \frac{\partial(\beta J)}{\partial T} = \frac{\partial U_1^n}{\partial(\beta J)} \left(-\frac{J}{k_B T^2} \right) = \frac{\partial U_1^n}{\partial(\beta J)} (-J\beta^2 k_B) \\
 &= \frac{J^2 \beta^2 k_B}{2} \frac{\left(I_{\frac{d}{2}-1}(x) + I_{\frac{d}{2}+1}(x) \right) I_{\frac{d}{2}-1}(x) - \left(I_{\frac{d}{2}-2}(x) + I_{\frac{d}{2}}(x) \right) I_{\frac{d}{2}}(x)}{I_{\frac{d}{2}-1}^2(x)} \Big|_{x=\beta J} \\
 &= \frac{J^2 \beta^2 k_B}{2} \left(1 + \frac{I_{\frac{d}{2}-1}(x) I_{\frac{d}{2}+1}(x) - I_{\frac{d}{2}}^2(x) - I_{\frac{d}{2}-2}(x) I_{\frac{d}{2}}(x)}{I_{\frac{d}{2}-1}^2(x)} \right) \Big|_{x=\beta J}. \tag{6.16}
 \end{aligned}$$

Um das Verhalten bei tiefen Temperaturen zu charakterisieren, wäre nun eine analytische Form von $\lim_{T \rightarrow 0} C$ und $\lim_{T \rightarrow 0} \partial C / \partial T$ in Abhängigkeit der Dimension n wünschenswert. Leider schlägt der Versuch fehl, die Asymptotik der modifizierten Besselfunktionen für große Argumente [2] ($T \rightarrow 0$ entspricht $\beta J \rightarrow \infty$)

$$I_n(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{x}\right) \right) \tag{6.17}$$

zu nutzen, um damit eine solche Form zu erhalten. Auch die Entwicklung in höhere Ordnungen von $1/T$ bringt ohne eine weitere geschickte Behandlung keinen Erfolg. Vielmehr ist zum Beispiel mit Hilfe von Computer-Algebra-Systemen die explizite Lösung für fest vorgegebene Dimensionen n möglich. Für ungeradzahlige Dimensionen wird der Index der modifizierten Besselfunktionen halbzahlig, was eine Umschreibung in hyperbolische Funktionen erlaubt. Für diese Fälle ist die Berechnung der Limite noch etwas leichter als für geradzahlige Dimensionen. Entsprechend versagte das computergestützte Lösungsverfahren bei geradzahligen Dimensionen eher. In der nachstehenden Tabelle sind die Ergebnisse aufgeführt.

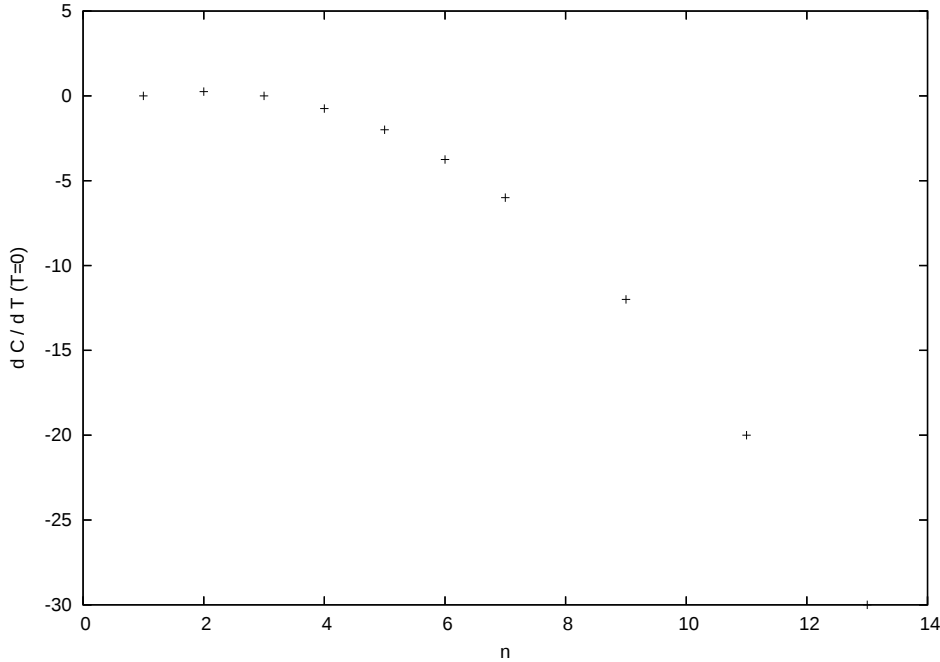


Abbildung 24: Anstieg der Wärmekapazität für $O(n)$ -Modelle bei $T = 0$.

Die Werte verstehen sich jeweils normiert auf die Anzahl der Bindungswinkel (daher der Index $_1$ - weil für nur einen Bindungswinkel berechnet), mit $k_B \equiv J \equiv 1$. Es hat den Anschein, als ob $\lim_{T \rightarrow 0} C_1^n = (n-1)/2$ ist.

n	1	2	3	4	5	6	7	9	11	13
$C_1^n _{T=0}$	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{5}{2}$	3	4	5	6
$\partial C_1^n / \partial T _{T=0}$	0	$\frac{1}{4}$	0	$-\frac{3}{4}$	-2	$-\frac{15}{4}$	-6	-12	-20	-30

Tabelle 2: Verhalten der Wärmekapazität in $O(n)$ -Modellen bei $T = 0$.

7 Zusammenfassung

Wie anfangs erläutert war die Fragestellung, inwieweit eine Änderung des Updateparameters $a_{\min}$ während einer Monte-Carlo-Simulation die Messergebnisse beeinflussen. Bei dem untersuchten Modell, dem eindimensionalen Heisenberg-Modell mit freien Randbedingungen, konnte weder im direkten Vergleich der Messergebnisse, noch in Hinblick auf die Abweichung von den exakten Ergebnissen, eine Abweichung festgestellt werden. Zum Vergleich wurden die Messgrößen Energie und Wärmekapazität sowie End-zu-End Abstand, Gyrationradius und deren Fluktuationen herangezogen. Neben der Bestimmung der Mittelwerte bei verschiedenen Temperaturen wurden auch die Verteilungen bei diesen Temperaturen betrachtet. Die Ergebnisse stimmten in allen Punkten im Rahmen der Fehler überein. Dies war der Fall, obwohl über die gesamte Simulation der Parameter $a_{\min}$ ständig angepasst wurde, um die Akzeptanzrate r_{acc} auf dem gewünschten Wert zu halten.

Es läßt sich daher schließen, dass beim eindimensionalen Heisenbergmodell die Änderung eines Update-Parameters beim Metropolis-Algorithmus nicht zu abweichenden Messergebnissen führt.

Literatur

- [1] W. Janke, *Statistical Analysis of Simulations: Data Correlations and Error Estimations*, in *Quantum Simulations of Many-Body-Systems: From Theory to Algorithms*, lecture Notes, J. Grotendorst, D. Marx, A. Muramatsu (Eds.), John von Neumann Institute for Computing, Jülich, 2002, Vol. **10**, S. 423-445.
- [2] I. N. Bronstein und K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik* (Teubner Leipzig 1979), S. 493.