

Numerische Studien am Sechs-Vertex-Modell im endlichen Volumen

Als Diplomarbeit im Dezember 1996 vorgelegt von
Christian Demmer

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Institut für Theoretische Physik I
Wilhelm-Klemm-Straße 9
48149 Münster

Numerische Studien am Sechs-Vertex-Modell
im endlichen Volumen

Als Diplomarbeit im Dezember 1996 vorgelegt von
Christian Demmer

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Institut für Theoretische Physik I
Wilhelm-Klemm-Straße 9
48149 Münster

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
0 Einführung in das Modell	4
0.1 Definition des Sechs-Vertex-Modells	4
0.2 Allgemeiner Transfermatrix-Formalismus	6
0.3 Transfermatrix des Sechs-Vertex-Modells	9
0.4 Linienhaltung	10
0.5 Einschränkungen und Parametrisierung	10
0.6 Überblick über das Modell	11
0.7 Das BCSOS-Modell	12
1 Bethe-Ansatz-Gleichungen	15
1.1 Herleitung	15
1.2 Lösung	18
1.3 Lösungsversuche für die Bethe-Gleichungen	25
1.3.1 Numerischer Lösungsversuch	25
1.3.2 Lösungsversuch mit GRÖBNER-Basen	27
2 Deterministische Transfermatrix-Methoden	29
2.1 Transfermatrix-Reduktion	30
2.2 Numerische Diagonalisierung der Transfermatrix	32
2.3 Powermethode	34
2.3.1 Implementierung	37
2.3.2 Weitere Eigenwerte mit der Powermethode	41
2.4 Endliche-Volumen Korrekturen	41
3 Stochastische Transfermatrix-Methoden	46
3.1 Naive stochastische Verfahren	46
3.2 mehrere Konfigurationen	51
3.3 Stochastisches Verfahren mit variabler Läuferzahl	54
3.4 Lokales Transfermatrix-Monte-Carlo-Verfahren	61
3.5 Varianzreduktion	67
3.6 Ein erstes Transfermatrix-Monte-Carlo Resultat	68

4 Korrelationsfunktionen	70
4.1 Korrelationslänge im thermodynamischen Limes	70
4.2 Spektrum der Transfermatrix	71
4.3 Transfermatrixmultiplikation	77
Resumée	81
Literaturverzeichnis	82

Einleitung

Exakt lösbare Modelle spielen in der Statistischen Mechanik und in der Euklidischen Quantenfeldtheorie eine wichtige Rolle. Historisch bedeutsam war z.B. die exakte Lösung des 2-dimensionalen Ising-Modells durch Onsager im Jahre 1944 [Ons44]. Mit der exakten Lösung eines nichttrivialen statistischen Modells wurden damals viele offene Fragen geklärt. Beispielsweise war nun bewiesen, daß die beobachteten thermodynamischen Phänomene in Ferromagneten in der Umgebung des Phasenübergangs tatsächlich streng aus einem sehr einfachen mikroskopischen Modell hergeleitet werden können. Eine weitere wichtige Beobachtung war, daß die kritischen Exponenten (noch mehr als die experimentell in drei Dimensionen gemessenen Exponenten) deutlich von den „klassischen“ Werten aus der Landau-Theorie abweichen. Die exakte Lösung des 2-dimensionalen Ising-Modells spielt auch heute noch in vielen Situationen eine Rolle, sei es als Arbeitspferd bei der Entwicklung neuer Verfahren und Algorithmen, bei denen man den Vergleich mit den exakt bekannten Ergebnissen durchführen möchte, sei es im Rahmen von Studien, in denen ein 2-dimensionales Ising-Modell als „effektives Modell“ auftritt.

Im Laufe der Jahre wurden immer mehr 2-dimensionale Modelle exakt gelöst. Eine gute Einführung in dieses Gebiet gibt das Buch von Baxter [Bax82].

Ein prominentes Modell, das mit Hilfe von Bethe-Ansatz-Methoden exakt gelöst werden kann, ist das Sechs-Vertex-Modell, um das es in dieser Arbeit gehen wird. Während man das Ising-Modell in zwei Dimensionen auch auf endlichen Gittern exakt lösen kann, ist dies beim Sechs-Vertex-Modell bislang nicht gelungen.

Dieses Modell kann (in seiner einfachsten Interpretation) aufgefaßt werden als ein Modell für ein „verallgemeinertes 2-dimensionales Eis“ oder auch als ein Modell für ein ferroelektrisches Material in zwei Dimensionen. Durch konfigurationsweise Uminterpretation kann man das Sechs-Vertex-Modell aber auch als ein statistisches Modell für eine Grenz- oder Oberfläche auffassen [vB77]. Der Phasenübergang des Modells entpuppt sich in dieser Darstellung dann als „roughening-transition“, die aus der Theorie der 2-dimensionalen Grenzflächen wohlbekannt ist [Abr86].

Die „roughening-transition“ ist ein Phasenübergang, bei dem aus einer im wesentlichen wohldefinierten (rigiden) Fläche durch thermische Fluktuationen eine „rauhe“ Fläche wird, die zwar lokal immer noch wohldefiniert ist, die aber Hügel und Täler auf allen Skalen enthält, so daß im thermodynamischen Limes die mittlere Flächendicke divergiert (und zwar mit dem Logarithmus der Systemausdehnung).

Es wird allgemein vermutet, daß dieser Phasenübergang vom Kosterlitz-Thouless-Typ ist. Ein solcher Phasenübergang ist von der Ordnung „unendlich“, d. h., am Übergangspunkt bleibt die freie Energie pro Volumen mit allen ihren Ableitungen stetig. Allerdings hat die freie Energie (und mit ihr ein ganzer Satz von anderen Größen wie z.B. die Korrelationslänge) am kritischen Punkt eine wesentliche Singularität.

Zum erstenmal wurde die Existenz dieses Übergangs von KOSTERLITZ und THOULESS für das 2-dimensionale XY-Modell postuliert [KT73].

Trotz der Anschaulichkeit der Argumente, die einen solchen Phasenübergang nahelegen, ist das Kosterlitz-Thouless-Szenario für fast alle Modelle bis heute nicht streng bewiesen. Die wesentliche Singularität am kritischen Punkt und logarithmische Korrekturen zum Skalenverhalten machen sowohl theoretische als auch numerische Untersuchungen zu einem schwierigen Unterfangen.

In dieser Situation kann nun das Sechs-Vertex-Modell eine wichtige Rolle spielen. Im Gegensatz zu der Situation bei den anderen SOS-Modellen und den dazu dualen Spin-Modellen (wie z. B. dem XY-Modell) ist hier die Gültigkeit der Kosterlitz-Thouless-Theorie exakt bewiesen.

Man kann, aufbauend auf der Idee der sogenannten „Universalität“, durch einen Vergleich der Renormierungsgruppen-Flüsse des Sechs-Vertex-Modells (in der BCSOS-Darstellung) mit denen eines Kandidaten-Modells das Kosterlitz-Thouless-Szenario für das Kandidaten-Modell testen und darüber hinaus auch die kritischen Parameter sehr genau bestimmen. Dies ist für eine Reihe von wichtigen 2-dimensionalen Flächen- und Spin-Modellen erfolgreich durchgeführt worden [HMP94] [HP96].

Diese Analysen nutzen die exakt bekannten Resultate für das BCSOS-Modell weitgehend aus, benötigen aber umfangreiche Monte-Carlo-Simulationen des BCSOS-Modells, um das Verhalten auf endlichen Gittern zu bestimmen, weil die exakte Lösung des Sechs-Vertex-Modells nur im thermodynamischen Limes gelungen ist.

Es ist natürlich eine interessante Frage, ob man ohne auf Monte-Carlo-Simulationen zurückgreifen zu müssen, Eigenschaften des Sechs-Vertex-Modells im endlichen Volumen bestimmen kann. Dies könnte in zweierlei Hinsicht sehr hilfreich sein:

- Man kann Analysen wie in [HMP94], [HP96] durchführen und dabei auf BCSOS-Daten ohne statistische Fehler zurückgreifen.
- Aus dem Finite-Size-Verhalten des BCSOS-Modells, welches ein Bona-Fide-KT-Modell ist, kann man lernen, wie sich ein KT-Modell und seine Meßgrößen im endlichen Volumen verhalten. Dies kann helfen, die systematischen Effekte in numerischen Untersuchungen von KT-Kandidaten auf endlichen Gittern besser zu verstehen, bzw. „richtige“ Fit-Ansätze für die Meßgrößen zu finden.

In dieser Arbeit werden erste Schritte in diese Richtung getan. In einem ersten Teil

(Kapitel 1) wird der Frage nachgegangen, ob man die Bethe-Ansatz-Gleichungen, deren Lösung im unendlichen Volumen gerade die Berechnung der Zustandssumme und der Korrelationslänge ermöglicht, numerisch für endlich große Gitter lösen kann. Es ergeben sich einige interessante Einsichten, aber es zeigt sich, daß die numerische Komplexität des Problems mit wachsender Systemgröße zu stark ansteigt. Zumindest mit den bis jetzt angewandten Methoden ist eine numerische Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen auf Gittern, die nicht sehr klein sind, nicht realistisch.

In einem zweiten Abschnitt (Kapitel 2) wird daher die numerische Lösung im Transfermatrix-Formalismus untersucht. Dabei werden sowohl die vollständige Bestimmung des Spektrums durch direkte Diagonalisierung der Transfermatrix als auch die Bestimmung der freien Energie durch den führenden Eigenwert mithilfe der „Power-Methode“ gründlich studiert. Dabei kann man verschiedene Symmetrien des Modells ausnutzen, um die Größe der Transfermatrix zu reduzieren.

Für die Powermethode gibt es eine stochastische Verallgemeinerung. Indem man die Transfermatrix als stochastische Matrix betrachtet, kann man die Iteration der Transfermatrix als stochastischen Prozeß im Konfigurationsraum des Modells simulieren. Dadurch wird man in die Lage versetzt, erheblich größere Matrizen betrachten zu können, als es in einer deterministischen Iteration möglich wäre. Auf der anderen Seite muß man natürlich eine neue Art von Problemen behandeln, die dem stochastischen Prozeß zu eigen sind. Insbesondere das Problem exponentiell wachsender Varianz spielt bei der Behandlung dieser Methoden in Kapitel 3 eine wesentliche Rolle.

In einem letzten Kapitel wird etwas detaillierter auf das Spektrum der Transfermatrix eingegangen. Das Verhalten einiger Eigenwerte in Abhängigkeit von Temperatur und Gittergröße wird studiert. Darauf aufbauend wird versucht, unter Verwendung des Transfermatrixformalismus eine sinnvolle Paarkorrelationsfunktion für endliche Gitter zu definieren. In diesem Zusammenhang wird auch eine Erklärung für einen Faktor 2 gegeben, der in der in [Bax82] angegebenen Korrelationslänge auftaucht und verschiedentlich für Unklarheiten gesorgt hat.

In Kapitel 0 wird zunächst eine Einführung in das Sechs-Vertex-Modell gegeben und der Transfermatrixformalismus erläutert.

Kapitel 0

Einführung in das Modell

0.1 Definition des Sechs-Vertex-Modells

Ausgangspunkt für das Sechs-Vertex-Modell ist der Versuch, das Verhalten von Substanzen wie Eis in einem zweidimensionalen rechtwinkligen Gittermodell zu beschreiben. Im Eis des Wassers ist jedes Sauerstoffatom tetraederförmig von vier Wasserstoffatomen umgeben, so daß ein dreidimensionales Gitter entsteht, in dem sich zwischen je zwei Sauerstoffatomen ein Wasserstoffatom befindet. Das Wasserstoffatom besitzt dabei zu dem einen Sauerstoffatom eine kovalente, zu dem andern eine Wasserstoffbrückenbindung. Man kann sich vorstellen, daß sich das Wasserstoffatom an zwei verschiedenen Positionen auf der gedachten Verbindungslinie zweier Sauerstoffatomen aufhalten kann. Je nachdem, zu welchem Sauerstoffatom die kovalente Bindung besteht, ist es diesem Sauerstoffatom räumlich näher. In der Chemie wird dieses Verhalten als Protomerie bezeichnet [Rie90]. Man kann annehmen, daß sich keine Störungen durch H_3O^+ in dem Gitter befinden, weil deren Konzentration auch im Wasser sehr gering ist. Deshalb müssen sich von den vier Wasserstoffatomen, die ein Sauerstoffatom umgeben, zwei nahebei und zwei an der entfernten Position befinden. Diese Forderung nennt man die Eisregel. Abgesehen von der Eisregel sind die Positionen energetisch gleichwertig.

Zur Modellierung der wesentlichen Eigenschaften dieses Systems genügt ein Gitter mit Koordinationszahl 4, also ein zweidimensionales quadratisches Gitter. Dabei sollen die Sauerstoffatome die Schnittpunkte (Vertices) des Gitters bilden. Die zwei zu jedem Sauerstoffatom gehörigen Wasserstoffatome befinden sich auf den Kanten des Gitters, d. h. an einem Vertex gibt es $\binom{4}{2} = 6$ Möglichkeiten, die zwei Wasserstoffatome zu positionieren. Jede Kante soll nur einmal besetzt werden, so daß jedes Sauerstoffatom insgesamt von vier Wasserstoffatomen umgeben ist, von denen sich je zwei in der Nähe eines Sauerstoffatoms befinden, wie es die Eisregel fordert. Dies bedeutet lokale elektrische Neutralität. Ein Beispiel ist in Abbildung 0.1 gezeigt.

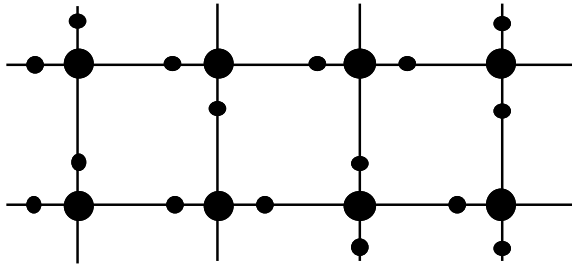


Abbildung 0.1: Beispiel für eine Eisgitterkonfiguration.

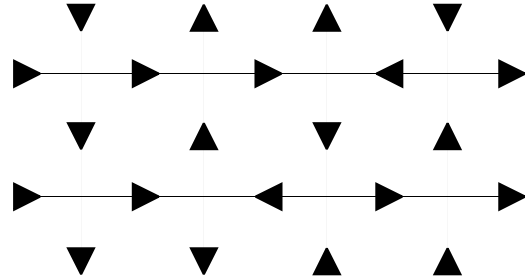


Abbildung 0.2: Dasselbe Beispiel in der Pfeildarstellung.

Die Zustandssumme ist gegeben durch

$$Z = \sum_{\text{alle Konfigurationen}} \exp\left(\frac{E(\text{Konfiguration})}{k_B T}\right), \quad (0.1)$$

wobei über alle möglichen Konfigurationen des Gitters summiert wird.

Die 6 möglichen Anordnungen der Wasserstoffionen werden als Vertextypen bezeichnet. Beim Eismodell haben alle sechs Vertextypen die gleiche Energie. Man kann das Modell jedoch verallgemeinern, indem man jedem Vertextyp eine Energie ε_i (Gewicht) zuordnet.

Außerdem ist es zweckmäßig, zwei weitere, etwas abstraktere Darstellungen des Modells einzuführen. Die erste erhält man, wenn man auf jede Kante einen Pfeil setzt, der in Richtung des Endes der Kante zeigt, das von einem Wasserstoffion besetzt ist (Abbildungen 0.3, 1. Zeile, und 0.2). In dieser Darstellung liegt es nahe, die Pfeile als Beschreibung eines Flusses anzusehen. Die lokale elektrische Neutralität kann dann als Divergenzfreiheit an jedem Vertex betrachtet werden.

Die zweite, die sogenannte Liniendarstellung, ergibt sich aus der ersten, indem man für jeden nach links oder unten zeigenden Pfeil eine Linie zu dem Vertex zeichnet, wie in Abbildung 0.3 angegeben.

Damit ist

$$E(\text{Konfiguration}) = \sum_{i=1}^6 m_i \varepsilon_i. \quad (0.2)$$

Die m_i bezeichnen die Anzahl der Vertices des Typs i in einer Konfiguration des Gitters. Die Numerierung der Vertextypen ist durch Abbildung 0.3 festgelegt [Bax82].

Je nach Wahl der Gewichte erhält man verschiedene Modelle. Für $\varepsilon_i = 0$, $i = 1 \dots 6$ erhält man das Eismodell. Wählt man $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_4 > 0$ und ε_5 und $\varepsilon_6 = 0$, so erhält man das sogenannte F-Modell, das aus zwei Gründen bei den meisten der folgenden Untersuchungen benutzt wird. Es ist leichter handhabbar als das

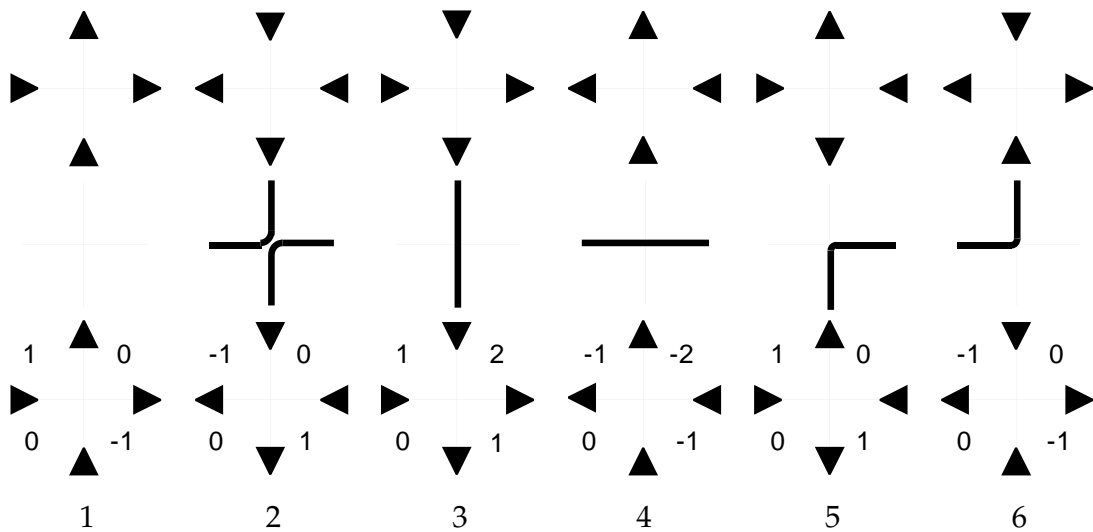


Abbildung 0.3: Die sechs möglichen Vertices in Pfeildarstellung (1. Zeile), Liniendarstellung (2. Zeile) und in der in der Pfeildarstellung zusammen mit den Höhenvariablen des BCSOS-Modells, das in Abschnitt 0.7 beschrieben wird (3. Zeile).

Sechs-Vertex-Modell mit beliebigen Parametern, weil diese ε_i zu einer symmetrischen Transfermatrix führen, weswegen es auch als symmetrisches Sechs-Vertex-Modell bezeichnet wird. Außerdem ist dieses Modell interessant, weil es isomorph zum BCSOS-Modell ist, das in Abschnitt 0.7 beschrieben wird. Zunächst wird der Transfermatrixformalismus eingeführt, der das wesentliche Hilfsmittel zur analytischen und numerischen Berechnung der Zustandssumme ist.

0.2 Allgemeiner Transfermatrix-Formalismus

Der Transfermatrix-Formalismus¹ ist eine Methode, die Berechnung der Zustandssumme in ein algebraisches Problem umzuformen, das durch Berechnung der Eigenwerte einer Matrix gelöst werden kann. Der Transfermatrix-Formalismus kann auf D -dimensionale Gittermodelle angewendet werden, die sich mit einer Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn, bezogen auf $(D - 1)$ -dimensionale Untergitter formulieren lassen. Dabei wird eine Richtung formal ausgezeichnet. Die Untergitter in dieser Richtung seien mit $1, \dots, M$ nummeriert. Außerdem werden periodische Randbedingungen in der ausgezeichneten Richtung angenommen. Die Beschränkung auf $(D - 1)$ -dimensionale Untergitter ist nicht notwendig, man kann das Gitter in der ausgezeichneten Richtung auch in Scheiben zerlegen, die aus mehreren Schichten des $(D - 1)$ -dimensionalen Untergitters bestehen, und so auch Modelle mit anderen Wechselwirkung als nur zwischen nächsten Nachbarn behandeln. Dies wird im weiteren aber nicht benötigt.

¹Die Beschreibung des allgemeinen Formalismus basiert im wesentlichen auf [RF94], [Tho79] und [Par88].

Das Gitter hat nun die Gestalt $L \times \{1, \dots, M\}$, wobei L der $D - 1$ -dimensionale übrige Teil des Gitters ist. Die Menge aller Konfigurationen des Modells auf L sei mit K bezeichnet. Dann hat man einen \mathbb{C} -Vektorraum

$$\mathcal{H} := \{ \psi \mid \psi : K \rightarrow \mathbb{C} \}$$

von Abbildungen ψ , die jeder Konfiguration auf L eine komplexe Zahl zuordnen.

Für $c, c' \in K$ seien Vektoren φ_c definiert durch

$$\varphi_c(c') := \begin{cases} 1 & ; \text{ falls } c = c' \\ 0 & ; \text{ sonst.} \end{cases}$$

Die Menge $\{ \varphi_c \mid c \in K \}$ bildet daher eine Basis von \mathcal{H} , die sogenannte Konfigurationsbasis. Um ein Skalarprodukt auf \mathcal{H} zu definieren, fordert man, daß die Basiselemente φ_c orthogonal sind. Damit ist das Skalarprodukt durch

$$\langle \varphi_c, \varphi_{c'} \rangle = \delta(c, c')$$

festgelegt.

Für die Zustandssumme gilt mit $\beta := \frac{1}{k_B T}$ allgemein

$$Z = \sum_C \exp(-\beta E(C)),$$

wobei über alle Konfigurationen $C = (c_1, c_2, \dots, c_M)$ des gesamten Gitters summiert wird. Der Energiebeitrag einer Konfiguration kann wegen der Annahme, daß nur nächste Nachbarn wechselwirken, in eine Summe der Energiebeiträge benachbarter Konfigurationen auf L zerlegt werden.

$$E(C) = \sum_{i=1}^M E(c_i, c_{i+1})$$

Damit ist

$$\begin{aligned} Z &= \sum_C \exp\left(-\beta \sum_{i=1}^M E(c_i, c_{i+1})\right) = \sum_C \prod_{i=1}^M \underbrace{\exp(-\beta E(c_i, c_{i+1}))}_{=: T(c_i, c_{i+1})} \\ &= \sum_{c_1, c_2, \dots, c_M} T(c_1, c_2) T(c_2, c_3) \dots T(c_{M-1}, c_M) T(c_M, c_1) \\ &= \text{Spur } T^M = \sum_i \lambda_i^M, \end{aligned} \tag{0.3}$$

wobei λ_i die Eigenwerte der Transfermatrix T sind.

Damit kann man nun die freie Energie pro Gitterpunkt im thermodynamischen Limes ausrechnen. N sei die Anzahl der Gitterpunkte in L , und die Eigenwerte

seien geordnet: $\lambda_0 > \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$. l bezeichne hier den Entartungsgrad des größten Eigenwertes λ_0 .

$$\begin{aligned}
f &= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{MN} \log Z \\
&= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{MN} \log \left[\lambda_0^M \left(l + \sum_{i>0} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^M \right) \right] \\
&= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(\lambda_0) \tag{0.4}
\end{aligned}$$

Auch Erwartungswerte können im Transfermatrix-Formalismus ausgerechnet werden, z.B. die Paarkorrelation zweier Funktionen aus \mathcal{H} .

Seien $g_1, g_2 \in \mathcal{H}$ und G_1, G_2 die zugehörigen Multiplikationsoperatoren $G_i(c, c') := g_i(c)\delta(c, c')$, $i = 1, 2$. Die Korrelationsfunktion zwischen einer Funktion am Ort i und einer am Ort $i + l$ ist dann gegeben durch

$$\langle g_1(c_i)g_2(c_{i+l}) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_C g_1(c_i)g_2(c_{i+l}) \exp(-\beta E(C)).$$

$\langle \cdot \rangle$ bezeichnet hier den Erwartungswert. Mit demselben Formalismus wie oben erhält man unter Berücksichtigung, daß die Multiplikationsoperatoren an den richtigen Stellen in das Matrixprodukt eingefügt werden müssen,

$$\begin{aligned}
\langle g_1(c_i)g_2(c_{i+l}) \rangle &= \frac{\text{Spur } G_2 T^l G_1 T^{M-l}}{Z} = \frac{1}{Z} \sum_j \langle \varphi_j, G_2 T^l G_1 T^{M-l} \varphi_j \rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{j,k} \langle \varphi_j, G_2 T^l \varphi_k \rangle \langle \varphi_k, G_1 T^{M-l} \varphi_j \rangle \\
&= \frac{1}{\lambda_0^M \left(1 + \sum_{j>0} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0} \right)^M \right)} \sum_{j,k} \lambda_j^l \lambda_k^{M-l} \langle \varphi_j, G_2 \varphi_k \rangle \langle \varphi_j, G_1 \varphi_k \rangle \\
&= \frac{1}{1 + \sum_{j>0} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0} \right)^M} \sum_{j,k} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0} \right)^l \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0} \right)^{M-l} \langle \varphi_j, G_2 \varphi_k \rangle \langle \varphi_j, G_1 \varphi_k \rangle.
\end{aligned}$$

Im Limes $M \rightarrow \infty$ hat man

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0} \right)^{M-l} = \delta(k, 0) \quad \text{und} \quad \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{\left(1 + \sum_{j>0} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0} \right)^M \right)} = 1.$$

Damit folgt

$$\langle g_1(c_i)g_2(c_{i+l}) \rangle = \sum_j \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0} \right)^l \langle \varphi_j, G_2 \varphi_0 \rangle \langle \varphi_j, G_1 \varphi_0 \rangle. \tag{0.5}$$

Um eine richtige Korrelationsfunktion zu erhalten, die, wie man es erwartet, auf 0 abfällt, muß man $\langle g_1(c_i) \rangle \langle g_2(c_{i+l}) \rangle$ abziehen. Dadurch entfällt in 0.5 in der Summe der Term mit $j = 0$.

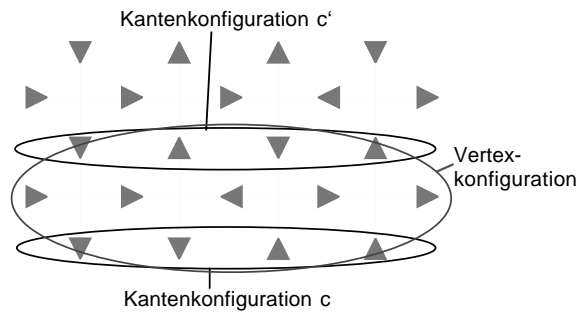


Abbildung 0.4: Zur Veranschaulichung der Bezeichnungen.

0.3 Transfermatrix des Sechs-Vertex-Modells

Betrachtet man ein 2-dimensionales Gitter mit M Zeilen und N Spalten und periodischen Randbedingungen, so besitzt es entsprechend M Zeilen von vertikalen Kanten. In der Liniendarstellung kann jede Kante mit einer Linie belegt sein oder nicht, so daß der Zustand einer Zeile durch ein c aus der Menge der Konfigurationen K beschrieben wird. $K = \{0, 1\}^N$ könnte z.B. eine Art der Darstellung sein. In der Pfeildarstellung würde man die Richtung des Pfeils auf der Kante als Kodierung verwenden.

Ein Paar c, c' von Kantenkonfigurationen beschreibt den Zustand einer dazwischenliegenden Zeile von Vertices (Abbildung 0.4). Wenn $c = c'$ ist, dann gibt es zwei mögliche Vertexkonfigurationen. In der Liniendarstellung kann man entweder die Kantenkonfigurationen mit den Vertextypen 1 und 3 oder mit den Vertextypen 2 und 4 verbinden. Ist $c \neq c'$ gibt es entweder keine erlaubte Vertexkonfiguration, die die Kantenkonfigurationen verbindet, oder genau eine. Auf den Seiten 16 und 17 befinden sich Bilder und eine genauere Diskussion zur Veranschaulichung für die Beispiele $n = 0$ und $n = 1$.

Man definiert die Transfermatrix $T \in M(2^N, \mathbb{R})$ durch

$$T(c, c') := \begin{cases} \sum \exp\left(-\frac{m_1 \varepsilon_1 + \dots + m_6 \varepsilon_6}{k_B T}\right) & ; \text{ wenn } c \text{ und } c' \text{ zusammen eine erlaubte} \\ & \text{Vertexkonfiguration beschreiben,} \\ 0 & ; \text{ wenn die Vertexkonfiguration nicht er-} \\ & \text{laubt ist,} \end{cases} \quad (0.6)$$

wobei bei den Diagonalelementen über die beiden möglichen Vertexkonfigurationen summiert wird, die mit den zwei gegebenen Kantenkonfigurationen möglich sind. Die m_1, \dots, m_6 bezeichnen die Anzahl von Vertices des jeweiligen Typs, die in der Vertexkonfiguration auftreten, die durch die Kantenkonfigurationen festgelegt ist (vgl. Abbildung 0.3).

Die Zustandssumme des Sechs-Vertex-Modells kann nun mittels des Transfermatrix-Formalismus berechnet werden.

0.4 Linienhaltung

Betrachtet man die Liniendarstellung mit periodischen Randbedingungen für die Kantenkonfigurationen (z.B. in Abbildung 0.7), so stellt man fest, daß in einer gegebenen Konfiguration des Gitters alle Linien, ohne sich zu schneiden, durch jede Zeile verlaufen. (Die Linien in Vertextyp 2 aus Abbildung 0.3 schneiden sich nicht.) Wenn in einer Kantenkonfiguration n Kanten mit Linien belegt sind, so hat jede dazu passende Kantenkonfiguration ebenfalls n belegte Linien. Diese Tatsache ist Ausdruck der Divergenzfreiheit.

Die Folge ist, daß die Transfermatrix T eine Blockdiagonalgestalt in der Konfigurationsbasis hat, wenn man die Basis so ordnet, daß die Konfigurationen mit gleichem n hintereinander angeordnet sind, beginnend mit $n = 0$ usw. Damit erhält man $N + 1$ quadratische Blöcke der Größe $\binom{N}{n} \times \binom{N}{n}$, $n \in \{0, \dots, N\}$, die sich auf der Diagonalen von T befinden; alle übrigen Elemente der Transfermatrix sind 0. Innerhalb der Blöcke befinden sich auch 0-Einträge, da nicht alle Kantenkonfigurationen zu gleichem n in einer erlaubten Weise verbunden werden können. Die Untermenge K_n der Menge der Konfigurationen K soll die Konfigurationen enthalten, die gleiches n besitzen.

Aus der linearen Algebra weiß man, daß es in einer solchen Situation genügt, die Blöcke einzeln zu diagonalisieren. Es stellt sich heraus, daß der größte Eigenwert der Transfermatrix sich in dem größten Block mit $n = N/2$ befindet [Bax82]. Wenn N ungerade ist, gibt es zwei größte Blöcke, und der größte Eigenwert ist entartet.

0.5 Einschränkungen und Parametrisierung

Die Wahl der Gewichte wird durch die Annahme $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, $\varepsilon_3 = \varepsilon_4$, $\varepsilon_5 = \varepsilon_6$ eingeschränkt. Die Folge ist, daß die Energie konstant bleibt, wenn man alle Pfeile einer Konfiguration invertiert. Dies entspricht einer Situation ohne äußere Felder, wie sie im folgenden immer betrachtet wird. Die Wahl $\varepsilon_5 = \varepsilon_6$ ist keine Einschränkung, wenn man periodische Randbedingungen verwendet, denn die Knotentypen 5 und 6 müssen wegen der Linienhaltung immer in Paaren auftreten, so daß nur $\varepsilon_5 + \varepsilon_6$ in die Zustandssumme eingeht.

Es ist zweckmäßig, die Gewichte der Vertextypen dementsprechend zu parametrisieren

$$\omega_i := \exp\left(\frac{\varepsilon_i}{k_B T}\right), \quad i = 1, \dots, 6, \quad (0.7)$$

und folgende Namen zu vergeben

$$\begin{aligned} a &:= \omega_1 = \omega_2, \\ b &:= \omega_3 = \omega_4, \end{aligned}$$

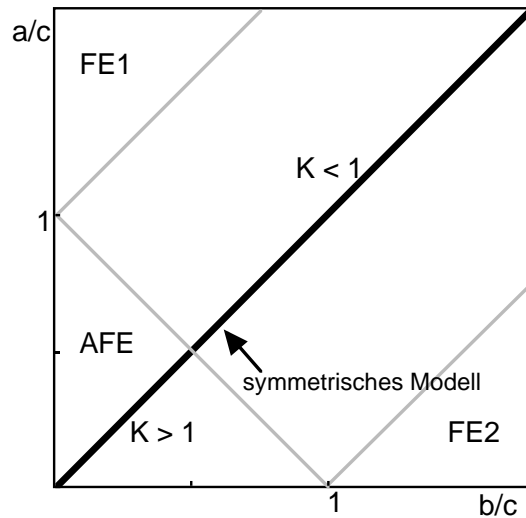


Abbildung 0.5: Überblick über die Phasen des Modells. (FE = ferroelektrisch, AFE = antiferroelektrisch)

$$c := \omega_5 = \omega_6. \quad (0.8)$$

Ohne Einschränkung kann man $c = 1$ wählen, denn physikalisch relevant sind nur die Verhältnisse der Parameter. Ein gemeinsamer Faktor entspricht nur einer Verschiebung des Energienullpunktes.

Für das symmetrische Sechs-Vertex-Modell ($a = b, c = 1$) bietet sich eine Parametrisierung relativ zum kritischen Punkt K_c des Modells an.

$$a = b = \exp(-2K_c K), \quad K_c = \frac{1}{2} \log(2), \quad (0.9)$$

so daß der Phasenübergang bei $K = 1$ liegt. Physikalisch gesehen entspricht dann K bis auf einen Faktor dem Inversen der Temperatur.

0.6 Überblick über das Modell

Im allgemeinen Fall kann man sich den Phasenraum, bezogen auf die Parameter a, b, c als zweidimensional, aufgespannt von den Achsen a/c und b/c , vorstellen, wie in Abbildung 0.5 gezeigt.

Es gibt zwei Bereiche, einen mit $\frac{a}{c} > \frac{b}{c} + 1$ (FE1) und einen mit $\frac{b}{c} > \frac{a}{c} + 1$ (FE2), in denen der Grundzustand aus den Vertextypen 1 oder 2 (FE1) bzw. 3 oder 4 (FE2) besteht. Dies entspricht einer ferroelektrischen Ordnung, alle Pfeile auf den vertikalen bzw. horizontalen Kanten des Gitters sind parallel. Man kann relativ leicht sehen [Bax82], daß die freie Energie pro Volumen $f = \min(\varepsilon_1, \varepsilon_3)$ ist, denn im thermodynamischen Limes ist das Gitter vollständig geordnet. Das Modell ist also

in einem der beiden Grundzustände eingefroren. Im folgenden werden diese Bereiche nicht weiter berücksichtigt.

Wenn $1 > \frac{a}{c} + \frac{b}{c}$, was im symmetrischen Modell $K > 1$ bedeutet, ist der Grundzustand, der bei $K \rightarrow \infty$ erreicht wird, ebenfalls entartet, und besteht abwechselnd aus den Vertextypen 5 und 6, wobei die beiden Grundzustände durch Umkehrung aller Pfeile auseinander hervor gehen. Auf jeder Zeile bzw. Spalte von Kanten des Gitters alternieren die Pfeilrichtungen, so daß dieser Bereich antiferroelektrisch genannt wird.

Der vierte Bereich liegt in dem Gebiet, in dem $a, b, c < 1/2(a+b+c)$ ist. Im symmetrischen Modell heißt das, $K < 1$. Dies ist der Bereich, in dem die Temperatur hoch ist. Bei $K = 1$ liegt der interessante Phasenübergang. Er ist von unendlicher Ordnung, die freie Energie und alle ihre Ableitungen sind stetig bei $K = 1$. Allerdings hat die freie Energie bei $K = 1$ eine wesentliche Singularität. Die Korrelationslänge divergiert für $K \searrow 1$ und hat dort eine wesentliche Singularität. Im Bereich $K < 1$ ist die Korrelationslänge überall unendlich, das Modell ist aber in einem ungeordneten Zustand. Wie schon in der Einleitung erwähnt, kann mittels der Äquivalenz zum BCSOS-Modell (siehe nächster Abschnitt) dieser Übergang als eine „roughening-transition“ interpretiert werden. Es gibt Fluktuationen der Höhenvariablen in jeder Größenordnung. Für eine Diskussion dieses als Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang bezeichneten Phasenübergangs siehe z.B. [Pin95].

0.7 Das BCSOS-Modell

Das Body-Centered-Solid-on-Solid-Modell (BCSOS-Modell) wurde ursprünglich von VAN BEIJEREN [vB77] eingeführt als Näherung des SOS-Modells zur Beschreibung von Oberflächen in kubisch raumzentrierten 3-dimensionalen Ising-Modellen. In diesem Zusammenhang ist das BCSOS-Modell interessant, weil es äquivalent zum sym-

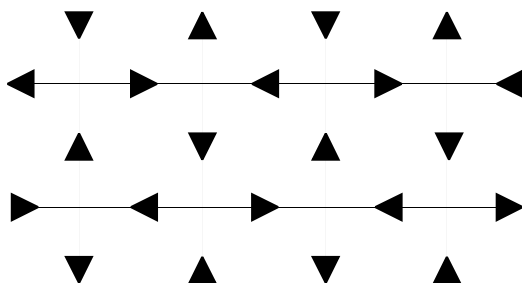


Abbildung 0.6: Einer der beiden antiferroelektrischen Grundzustände. Den zweiten erhält man durch Umkehrung der Richtungen aller Pfeile.

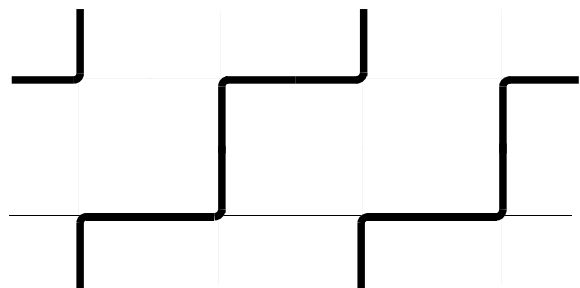


Abbildung 0.7: Der nebenstehende Grundzustand in der Liniendarstellung.

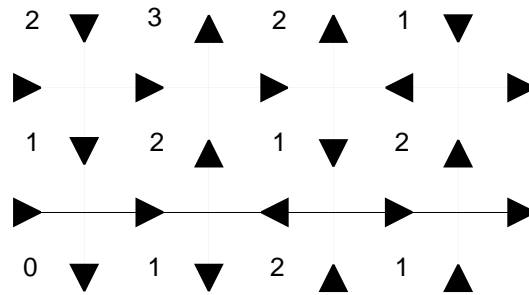


Abbildung 0.8: Beispiel für ein BCSOS-Gitter und die entsprechende Sechs-Vertex-Darstellung mit periodischen Randbedingungen in der Waagerechten.

metrischen Sechs-Vertex-Modell ist.

Die Größen des BCSOS-Modells sind sogenannte Höhenvariablen, ganze Zahlen, die sich auf den Plaketten eines quadratischen Gitters befinden. Bezogen auf das Sechs-Vertex-Modell ist dies das duale Gitter. Die Regel für das Modell ist, daß Höhenvariablen, die nächste Nachbarn sind, sich um 1 unterscheiden müssen. Man erhält die Höhenvariablen aus dem Sechs-Vertex-Modell in der Pfeildarstellung, indem man einen Vertex gegen den Uhrzeigersinn umläuft und jedesmal, wenn man einen nach links zeigenden Pfeil überschreitet, in die nächste Plakette eine um 1 verringerte Zahl einträgt, und wenn man einen nach rechts zeigenden Pfeil überschreitet, eine um 1 erhöhte Zahl einträgt. Jeder Vertextyp besitzt zwei einlaufende und zwei auslaufende Pfeile, so daß man damit die Modellregel des BCSOS-Modells erfüllt. Da die Höhenvariablen nur durch die Differenzen zwischen nächsten Nachbarn definiert sind, sind die Variablen nur bis auf eine Konstante festgelegt. Man kann also z.B. die linke untere Ecke des Gitters als 0 wählen. In Abbildung 0.8 ist ein Beispiel eines Gitterstückchens gezeigt. Andersherum betrachtet könnte man auch sagen, das Sechs-Vertex-Modell (in der Pfeildarstellung) ist eine gut geeignete Darstellung des BCSOS-Modells, die explizit auf den Differenzen beruht.

Die Zustandssumme des BCSOS-Modells ist gegeben durch

$$Z = \sum_{\text{Konfigurationen}} \exp(-KK_c \sum_{[i,j]} |h_i - h_j|), \quad (0.10)$$

wobei $[i, j]$ alle Paare übernächster Nachbarn bezeichnet. Summiert wird über alle Konfigurationen, die nur nächste Nachbarn enthalten, die sich um 1 unterscheiden.

Bei genauerer Betrachtung stellt man fest, daß die Randbedingungen, die man für die Zeilenkonfigurationen im Transfermatrixformalismus wählt, wesentliche Bedeutung haben. Hier werden nur gerade Gitterbreiten N betrachtet, um Schwierigkeiten mit den periodischen Randbedingungen zu vermeiden.

1. Das BCSOS-Modell mit periodischen Randbedingungen ist isomorph zu einem Sechs-Vertex-Modell, das nur Konfigurationen mit $n = \frac{N}{2}$ enthält. Um periodische Randbedingungen im BCSOS-Modell zu realisieren, müssen in jeder Zeile

- genauso viele Pfeile nach oben wie nach unten zeigen. Solche Linienkonfigurationen sind genau die, die in $K_{(N/2)}$ enthalten sind. Dies entspricht dem Teil des Sechs-Vertex-Modells, der durch den zentralen Block der Transfermatrix beschrieben wird.
2. Das BCSOS-Modell mit freien Randbedingungen ist isomorph zum Sechs-Vertex-Modell mit freien Randbedingungen. Für ein Gitter der Größe $N \times M$ ist dabei dann das zugehörige duale Gitter, auf dem sich die Variablen des BCSOS-Modells befinden, von der Größe $(N + 1) \times (M + 1)$. Die Isomorphie ist durch die Zuordnung von Pfeilen zu Differenzen von Höhenvariablen anschaulich klar (siehe auch Abbildung 0.3).

Kapitel 1

Bethe-Ansatz-Gleichungen

Das Sechs-Vertex-Modell wurde für den symmetrischen Fall 1967 von LIEB im thermodynamischen Limes gelöst [Lie67]. Eine besser lesbare Darstellung befindet sich auch in [Lie71]. Die nun folgende Übersicht über den Lösungsweg lehnt sich an die Darstellung von BAXTER in [Bax82] an, die auch den unsymmetrischen Fall berücksichtigt und im Zusammenhang mit BAXTERS Lösung des Acht-Vertex-Modells entstanden ist. Der dabei verwendete Ansatz wurde zuerst von BETHE [Bet31] bei der Behandlung des eindimensionalen Heisenbergmodells verwendet [Pin93].

1.1 Herleitung der Bethe-Ansatz-Gleichungen des Sechs-Vertex-Modells

Das Ziel der Methode ist, das Eigenwertproblem zu lösen, um die Zustandssumme zu erhalten. Wegen der Linienerhaltung genügt es, dies für eine feste Anzahl n von Linien zu tun.

Eine Kantenkonfiguration $c \in K$ kann dann durch ein Tupel $(x_1, x_2, \dots, x_n), x_i \in \{1, \dots, N\}$, mit $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ beschrieben werden, wobei die x_i die Positionen der mit einer Linie belegten Kanten einer Kantenkonfiguration des Gitters sind. Für ein festes n beschreiben diese Tupel die Untermenge von K , die mit K_n bezeichnet wird.

Die Eigenwertgleichung lautet dann für eine Komponente eines Eigenvektors ψ von T

$$\lambda\psi(c) = \sum_{c' \in K_n} T(c, c')\psi(c') \quad (1.1)$$

mit

$$T(c, c') = \sum a^{m_a(c, c')} b^{m_b(c, c')} c^{m_c(c, c')}. \quad (1.2)$$

Abbildung 1.1: $n = 0$: Die erste der beiden möglichen Konfigurationen.

Abbildung 1.2: $n = 0$: Die zweite der beiden möglichen Konfigurationen.

Die m geben die Anzahl des Auftretens eines Vertexyps zu den jeweiligen Gewichten a, b, c an. Summiert wird über alle erlaubten Vertexanordnungen.

Um (1.1) zu lösen, muß die Summe ausgeführt werden, indem man sich die möglichen Konfigurationen und die Anzahlen der darin auftretenden Vertexypen überlegt.

Die einfachen Fälle $n = 0$ und $n = 1$ sollen als Beispiele dienen.

Der Fall $n = 0$

In diesem Fall sind alle Kanten der Linienkonfiguration unbelegt, der Block besteht nur aus einem Element. Der zugehörige Eigenwert kann direkt an (1.2) abgelesen werden. Es gibt zwei mögliche Konfigurationen für die Vertices (Abbildungen 1.1 und 1.2), sie sind entweder alle vom Typ 1 oder vom Typ 4. Daher ist

$$\lambda = a^N + b^N.$$

Der Fall $n = 1$

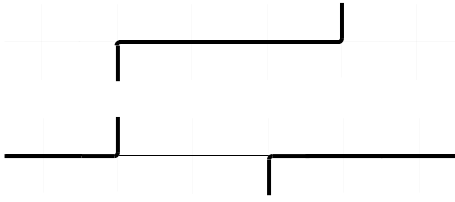
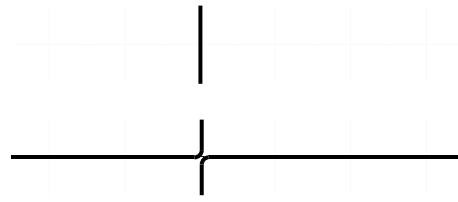
Das Tupel besteht nur aus einer Zahl, in diesem Fall kann der entsprechende Block aus der Transfermatrix abkürzend mit $T(x, y)$, $x, y \in \{1, \dots, N\}$, bezeichnet werden. Es gibt drei Sorten von Konfigurationen. Ist $x < y$, so führt die einzige erlaubte Linie über die dazwischenliegenden Vertices. Entsprechend gibt es für $x > y$ nur die Möglichkeit der Verbindung unter Ausnutzung der periodischen Randbedingungen (siehe Abbildung 1.3). Ist $x = y$, so sind die beiden in Abbildung 1.4 gezeigten Verbindungen möglich. Man erhält so nach Gleichung (1.1)

$$\begin{aligned} \lambda\psi(x) &= a^{N-1}b\psi(x) + ab^{N-1}\psi(x) \\ &+ \sum_{y=x+1}^N a^{N+x-y-1}b^{y-x-1}c^2\psi(y) + \sum_{y=1}^{x-1} a^{x-y-1}b^{N+x-y-1}c^2\psi(y). \end{aligned} \quad (1.3)$$

Setzt man an dieser Stelle nun $a = b$ und $c = 1$ (Symmetrisches Sechs-Vertex-Modell) und verwendet den Ansatz $\psi(x) = z^x$, $z \in \mathbb{C}$, so erhält man nach Summation der entstehenden endlichen geometrischen Reihen ¹

$$\lambda z^x = a^N L(z) z^x + a^N M(z) z^x - \frac{a^{N-2}}{1-z} z^{N+1} + \frac{a^{N-2}}{1-z} z \quad (1.4)$$

¹Der triviale Fall $z = 1$ ist dabei nicht berücksichtigt.

Abbildung 1.3: $n = 1$: Zwei typische Konfigurationen mit $x < y$ und $x > y$.Abbildung 1.4: $n = 1$: Im Fall $x = y$ sind diese beiden Konfigurationen möglich.

mit den Abkürzungen ²

$$L(z) := 1 + \frac{z}{a^2(1-z)}, \quad M(z) := 1 - \frac{1}{a^2(1-z)}. \quad (1.5)$$

Die beiden letzten Terme in (1.4) sind sogenannte Randterme, die von den Summationsgrenzen stammen. Sie können durch die Wahl $z^N = 1$ entfernt werden. Dann sind die rechte und linke Seite von (1.4) proportional zu z^x , und man erhält

$$\lambda = a^N(L(z) + M(z)). \quad (1.6)$$

BAXTER führt diese Summation für beliebiges n durch und gelangt dadurch zu einem allgemeinen Lösungsansatz, der als Bethe-Ansatz bekannt ist.

$$\psi(c) = \sum_{\sigma \in S_n} A_{\sigma(1), \dots, \sigma(n)} z_{\sigma(1)}^{x_1} z_{\sigma(2)}^{x_2} \cdots z_{\sigma(n)}^{x_n} \quad (1.7)$$

mit gewissen $z_i \in \mathbb{C}$ und einer Koeffizientenmatrix A , für die gilt

$$A_{\sigma(1), \dots, \sigma(n)} = \text{sgn}(\sigma) \prod_{1 \leq i < j \leq n} S_{\sigma(i), \sigma(j)}. \quad (1.8)$$

S_n ist die symmetrische Gruppe des Grades n , also sind die σ die Permutationen von n Objekten. Das Vorzeichen einer Permutation ist definiert durch

$$\text{sgn} : S_n \rightarrow \{-1, 1\} : \text{sgn}(\sigma) := \det(P_\sigma). \quad (1.9)$$

Dabei ist P_σ die zu σ gehörende Permutationsmatrix. Dieser Ansatz ist notwendig, um analog zum Fall $n = 1$ die Randterme aus der Summation zu eliminieren. Die Koeffizientenmatrix A wird dann durch die Forderung, daß alle solchen Terme eliminiert werden sollen, berechnet. Die Einzelheiten der Berechnung der Koeffizienten findet man in [Lie67].

Die z_j sind gegeben als Lösung des Gleichungssystems

$$z_j^N = (-1)^{n-1} \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^n \frac{S_{l,j}}{S_{j,l}}. \quad (1.10)$$

²Die Wahl der Abkürzungen mag an dieser Stelle etwas willkürlich erscheinen. Sie dient der Beibehaltung der Notation der allgemeineren Lösung in [Bax82].

Dabei werden im allgemeinen die Abkürzungen verwendet

$$\Delta := \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} = 1 - \frac{1}{2a^2}, \quad (1.11)$$

wobei die zweite Gleichung im symmetrischen Fall (für $c = 1$) gilt.

$$S_{i,j} := 1 - 2\Delta z_j + z_i z_j, \quad (1.12)$$

$$L(z_i) := \frac{ab + (c^2 - b^2)z_i}{a^2 - abz_i}, \quad M(z_i) := \frac{a^2 - c^2 - abz_i}{ab - b^2 z_i}. \quad (1.13)$$

Hat man (1.10) gelöst, so erhält man die Eigenvektoren aus Gleichung (1.7) und die Eigenwerte mittels

$$\lambda = a^N L(z_1)L(z_2) \cdot \dots \cdot L(z_n) + b^N M(z_1)M(z_2) \cdot \dots \cdot M(z_n). \quad (1.14)$$

Allerdings hat (1.10) mehr Lösungen, als Eigenwerte vorhanden sind. Die überzähligen Lösungen sind daran zu erkennen, daß Gleichung (1.7) $\psi = 0$, also keinen Eigenvektor, ergibt. Dies wird in [Bax82] nicht deutlich, sondern ist Ergebnis der Betrachtungen in Abschnitt 1.3.

Das Gleichungssystem (1.10) kann im Prinzip gelöst werden. Allerdings ist dies bis heute, soweit ich weiß, im allgemeinen Fall, d.h. für endliches N und n , nicht gelungen [Bax82]. DE VEGA und WOYNAROVICH bemerken dazu [dVW84], daß dies ein „formidables Problem“ sei. In Abschnitt 1.3 wird dieses Problem näher untersucht.

1.2 Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen im thermodynamischen Grenzfall

In diesem Abschnitt soll versucht werden, den Verlauf der Lösung im einzelnen nachvollziehbar darzustellen und die in [Bax82] nur in einigen Zwischenergebnissen angedeuteten Rechenwege auszuführen.

Die Gleichung (1.10) kann im thermodynamischen Grenzfall zu einer linearen inhomogenen Integralgleichung mit Differenzkern umgeformt werden. Die Beobachtung lehrt [Bax82], daß der größte Eigenwert der Transfermatrix T im Unterblock zu $n = N/2$ zu finden ist, wenn N gerade ist, und zu einer Verteilung der z_1, \dots, z_n gehört, die symmetrisch verteilt auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene liegt. Das legt eine Parametrisierung der z_j nahe:

$$z_j = \exp(ik_j). \quad (1.15)$$

Außerdem definiert man eine Funktion Θ , so daß

$$\frac{S_{l,j}}{S_{j,l}} = \exp(-i\Theta(k_j, k_l)). \quad (1.16)$$

Das bedeutet, daß

$$\exp(-i\Theta(k_j, k_l)) = \frac{1 - 2\Delta \exp(ik_j) + \exp(ik_j + ik_l)}{1 - 2\Delta \exp(ik_l) + \exp(ik_j + ik_l)}. \quad (1.17)$$

Durch explizites Nachrechnen kann man sich davon überzeugen, daß Θ eine reelle Funktion ist.

Setzt man dies in die Gleichungen (1.10) ein, so erhält man, da der Beitrag von $\exp(-i\Theta(k_l, k_l))$ das Produkt nicht ändert,

$$\exp(iNk_j) = (\exp(i\pi))^{n-1} \prod_{l=1}^n \exp(-i\Theta(k_j, k_l)). \quad (1.18)$$

Beide Seiten der Gleichung liegen auf dem Einheitskreis, also logarithmiert man und teilt durch i , um eine reelle Gleichung zu erhalten.

$$Nk_j = 2\pi I_j - \sum_{l=1}^n \Theta(k_j, k_l) \quad (1.19)$$

Wegen der Vielzahl der komplexen Logarithmen ist $I_j \in \mathbb{Z}$, wenn n ungerade ist, und $I_j \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$, wenn n gerade ist. Über diese I_j wird nun der Hypothese folgend, daß die z_j symmetrisch auf dem Einheitskreis verteilt sind, verfügt, indem man

$$I_j = j - \frac{1}{2}(n+1), \quad j \in \{1, \dots, n\}, \quad (1.20)$$

wählt. Damit folgt

$$Nk_j = 2\pi j - \pi(n+1) - \sum_{l=1}^n \Theta(k_j, k_l). \quad (1.21)$$

Da beabsichtigt ist, den Limes $n \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ bei festem $\frac{n}{N}$ durchzuführen, nimmt man an, daß die Verteilung der k_1, \dots, k_n im Limes durch eine Verteilungsfunktion $\rho(k)$ beschrieben werden kann, so daß

$$\int_{-Q}^Q dk N\rho(k) = n. \quad (1.22)$$

Mit diesen Annahmen wird aus Gleichung (1.21) mit $k_j \rightarrow k$ und $j \rightarrow \int_{-Q}^k dk' N\rho(k')$

$$Nk = -\pi(n+1) + 2\pi N \int_{-Q}^k dk' N\rho(k') - \int_{-Q}^Q dk' \Theta(k, k') N\rho(k'). \quad (1.23)$$

Durch Kürzen von N und Ableiten nach k erhält man eine lineare Integralgleichung für $\rho(k)$

$$2\pi\rho(k) = 1 + \int_{-Q}^{+Q} dk' \frac{\partial\Theta}{\partial k}(k, k')\rho(k'), \quad (1.24)$$

wobei die Grenzen Q aus dem gegebenen Verhältnis n/N bestimmt werden können (siehe (1.22)).

Aus dem Transfermatrix-Formalismus (0.4) und dem Eigenwert aus dem Bethe-Ansatz (1.14) erhält man für die freie Energie des symmetrischen Modells

$$f = \epsilon_1 - \frac{1}{\beta N} \sum_{j=1}^n \log(L(z_j)) - \frac{2}{\beta N}. \quad (1.25)$$

Daraus wird im oben beschriebenen Limes

$$f = \epsilon_1 - \frac{1}{\beta} \int_{-Q}^Q dk \log(L(e^{ik}))\rho(k). \quad (1.26)$$

Die Aufgabe ist nun, die Integralgleichung für $\rho(k)$ zu lösen.

Lösung für $-1 < \Delta < 1$

Dieser Bereich von Δ entspricht dem Bereich $K < 1$ in Abbildung 0.5. Bisher wurde von der Beschränkung auf das symmetrische Sechs-Vertex-Modell noch kein wesentlicher Gebrauch gemacht. An der Stelle, wo auf $L(z)$ zurückgegriffen wird, wird jedoch die symmetrische Variante benutzt. Dadurch werden die folgenden Integrationen etwas übersichtlicher.

Entscheidend für die Lösbarkeit ist die Möglichkeit, eine Transformation der Variablen zu finden, so daß die Integralgleichung einen Differenzkern hat. Für $-1 < \Delta < 1$ ist so eine Transformation

$$\mu := \arccos(-\Delta) \in]0, \pi[\quad (1.27)$$

zusammen mit der Einführung einer neuen Variablen α , durch die k parametrisiert wird: $k := k(\alpha)$, so daß folgende Relation gilt:

$$\exp(ik(\alpha)) = \frac{e^{i\mu} - e^\alpha}{e^{i\mu+\alpha} - 1}. \quad (1.28)$$

Um zu sehen, daß diese Transformation sinnvoll ist, betrachtet man die logarithmische Ableitung von (1.28).

$$\begin{aligned} i\partial_\alpha k(\alpha) &= \partial_\alpha \left(\frac{e^{i\mu} - e^\alpha}{e^{i\mu+\alpha} - 1} \right) \frac{e^{i\mu+\alpha} - 1}{e^{i\mu} - e^\alpha} \\ &= i \frac{\sin(\mu)}{\cosh(\alpha) - \cos(\mu)} \end{aligned} \quad (1.29)$$

Die Ableitung ist also reell und > 0 für $\mu \in]0, \pi[$. $k(\alpha)$ ist eine monoton wachsende Funktion. Angewendet auf (1.17) mit $k_j = k(\alpha)$, $k_l = k(\beta)$ erhält man mit der Bezeichnung

$$\begin{aligned} \exp(-i\Theta(k_j, k_l)) &=: \frac{\text{Zähler}}{\text{Nenner}}, \\ \text{Zähler} &= 1 + (e^{i\mu} + e^{-i\mu}) \frac{e^{i\mu} - e^\alpha}{e^{i\mu+\alpha} - 1} + \frac{e^{i\mu} - e^\alpha}{e^{i\mu+\alpha} - 1} \cdot \frac{e^{i\mu} - e^\beta}{e^{i\mu+\beta} - 1} \\ &= \frac{1}{(e^{i\mu+\alpha} - 1)(e^{i\mu+\beta} - 1)} (e^{3i\mu+\beta} - e^{i\mu+\beta} + e^{-i\mu+\alpha} - e^{i\mu+\alpha}) \\ &= \frac{-2i}{(e^{i\mu+\alpha} - 1)(e^{i\mu+\beta} - 1)} \sin(\mu) e^\beta (e^{\alpha-\beta} - e^{2i\mu}). \end{aligned} \quad (1.30)$$

Durch analoge Rechnung erhält man

$$\text{Nenner} = \frac{-2i}{(e^{i\mu+\alpha} - 1)(e^{i\mu+\alpha} - 1)} \sin(\mu) e^\alpha (e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu}). \quad (1.31)$$

Insgesamt folgt

$$\exp(-i\Theta(\alpha, \beta)) = e^{\beta-\alpha} \cdot \frac{e^{\alpha-\beta} - e^{2i\mu}}{e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu}}. \quad (1.32)$$

Dieser Ausdruck unterscheidet sich um den Faktor $\exp(\beta - \alpha)$ von dem von Baxter angegebenen ([Bax82] (8.8.4)). Es stellt sich aber heraus, daß der Faktor notwendig ist, um die richtige Integralgleichung (1.35) zu erhalten.

Für die Substitution in Gleichung (1.23) wird noch die Berechnung der logarithmischen Ableitung von (1.32) benötigt.

$$\begin{aligned} i\partial_\alpha \Theta(\alpha, \beta) &= \\ &= \partial_\alpha \left(e^{\beta-\alpha} \cdot \frac{e^{\alpha-\beta} - e^{2i\mu}}{e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu}} \right) \cdot \frac{e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu}}{e^{\beta-\alpha} (e^{\alpha-\beta} - e^{2i\mu})} \\ &= \frac{(-1 + e^{2i\mu+\beta-\alpha})(e^{\alpha-\beta} - e^{2i\mu}) + (e^{\alpha-\beta} - e^{2i\mu}) + e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu+2\beta-2\alpha}}{(e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu})(1 - e^{2i\mu+\beta-\alpha})} \\ &= \frac{(e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu})e^{2i\mu+\beta-\alpha} + e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu+2\beta-2\alpha}}{e^{\beta-\alpha} - e^{2i\mu} - e^{2i\mu+2\beta-2\alpha} + e^{4i\mu+\beta-\alpha}} \\ &= \frac{e^{\beta-\alpha}(-e^{4i\mu} + 1)}{e^{\beta-\alpha}(1 - e^{2i\mu-\beta+\alpha} - e^{2i\mu+\beta-\alpha} + e^{4i\mu})} \\ &= \frac{-i \sin(2\mu)}{\cosh(\alpha - \beta) - \cos(2\mu)} \end{aligned} \quad (1.33)$$

Die transformierte Verteilungsfunktion wird definiert als

$$R(\alpha) = 2\pi \rho(k) \frac{\partial k}{\partial \alpha}. \quad (1.34)$$

Diese Substitution führt man nun in (1.23) durch und differenziert anschließend in Analogie zu (1.24) nach α :

$$R(\alpha) = \frac{\sin(\mu)}{\cosh(\alpha) - \cos(\mu)} - \frac{1}{2\pi} \int_{-Q_1}^{Q_1} d\beta \frac{\sin(2\mu)}{\cosh(\alpha - \beta) - \cos(2\mu)} R(\beta). \quad (1.35)$$

Die transformierten Grenzen werden wieder durch die Forderung

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-Q_1}^{Q_1} dk R(\alpha) = \frac{n}{N} \quad (1.36)$$

festgelegt.

Diese lineare Integralgleichung mit Differenzkern kann für $Q_1 = \infty$ durch Fouriertransformation gelöst werden.

$$\tilde{R}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R(\alpha) e^{ix\alpha} d\alpha \quad (1.37)$$

Also müssen Integrale der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{e^{ix\alpha} \sin(\mu)}{\cosh(\alpha) - \cos(\mu)} = 2 \sin(\mu) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{e^{ix\alpha}}{e^\alpha + e^{-\alpha} - C}}_{=: I} \quad (1.38)$$

mit der Abkürzung $C := 2 \cos(\mu) \in] -2, 2[$ berechnet werden. Substituiert man $t := e^\alpha$ in I , so erhält man

$$I = \int_0^\infty dt \frac{t^{ix}}{t^2 - Ct + 1} = \int_0^\infty dt q(t) t^{a-1}$$

mit den Bezeichnungen $a := 1 + ix$, $q(t) := (t^2 - Ct + 1)^{-1}$.

In [Rem92] findet man für solche als MELLIN-Transformationen bekannten Integrale

$$I = \frac{2\pi i}{1 - e^{2\pi i a}} \sum_{w \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_{\geq 0}} \operatorname{res}_w(q(z) z^{a-1}) \quad (1.39)$$

unter den Voraussetzungen, daß $\lim_{z \rightarrow \infty} q(z) z^a = 0$, $\lim_{z \rightarrow 0} q(z) z^a = 0$, q endlich viele Polstellen $\in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_{\geq 0}$ hat und $a \notin \mathbb{Z}$ ist. Die Voraussetzungen sind hier erfüllt, sofern $x \neq 0$ ist. In diesem Fall kann das Integral aber einfach gelöst werden, man erhält $I = \pi / (2 \sin(\mu))$ und damit aus (1.37) $\tilde{R}(0) = 1/2$. Das entspricht dem

Ergebnis, das man unten erhält, also gibt es an der Stelle $x = 0$ hier kein Problem. Offensichtlich hat $q(t)$ zwei Polstellen $t_0^\pm = \frac{1}{2}(C \pm i\sqrt{4 - C^2})$, so daß

$$\operatorname{res}_{t_0^\pm}(q(t)t^{ix}) = \left. \frac{t^{ix}}{2t - C} \right|_{t=t_0^\pm} = \frac{(e^{\pm i\mu})^{ix}}{\pm i2 \sin(\mu)}.$$

Damit erhält man für I

$$\begin{aligned} I &= \frac{2\pi i}{1 - e^{2\pi ia}} \left(\frac{(e^{i\mu})^{ix}}{i2 \sin(\mu)} + \frac{(e^{-i\mu})^{ix}}{-i2 \sin(\mu)} \right) \\ &= \frac{\pi}{\sin(\mu)} \frac{\sinh((\pi - \mu)x)}{\sinh(\pi x)}, \end{aligned} \quad (1.40)$$

wobei beim Zusammenfassen der Exponenten des zweiten Summanden darauf geachtet werden muß, daß die komplexe Ebene längs der positiven reellen Achse geschlitzt ist. Insgesamt hat man

$$\tilde{R}(x) = \frac{\sinh((\pi - \mu)x)}{\sinh(\pi x)} - \frac{\sinh((\pi - 2\mu)x)}{\sinh(\pi x)} \tilde{R}(x). \quad (1.41)$$

Den Ausdruck kann man mit Hilfe der Additionstheoreme für hyperbolische Funktionen nach \tilde{R} auflösen.

$$\tilde{R}(x) = \frac{\sinh(\pi - 2\mu)x}{\sinh(\pi x) + \sinh((\pi - 2\mu)x)} = \frac{1}{2 \cosh(\mu x)}$$

Betrachtet man Gleichung (1.36), so sieht man durch Vergleich mit (1.37), daß auf der linken Seite von (1.36) $\tilde{R}(0) = \frac{1}{2}$ steht. Das heißt, $Q_1 = \infty \Leftrightarrow \frac{n}{N} = \frac{1}{2}$.

Zur Berechnung der freien Energie muß die Gleichung (1.26) entsprechend transformiert werden. Man erhält das Integral

$$f = \epsilon_1 - \frac{1}{2\pi} \int_{-Q_1}^{Q_1} \log(L(e^{ik(\alpha)})) R(\alpha) d\alpha. \quad (1.42)$$

Setzt man die Parametrisierung (1.27) und (1.28) zusammen mit $z = e^{ik}$ in die Gleichung (1.5) für $L(z)$ ein, so folgt

$$L(e^{ik(\alpha)}) = \frac{e^{i\mu} - e^{\alpha - i\mu}}{e^\alpha - 1}. \quad (1.43)$$

Als letztes muß nun noch die Fouriertransformierte von $\log(L(e^{ik(\alpha)}))$ berechnet werden. Weil $R(\alpha)$ in (1.42) eine gerade Funktion ist, genügt die Berücksichtigung des geraden, d.h., des Realteils, der sich als $\log(|L(e^{ik(\alpha)})|)$ berechnen läßt.

$$\left| \frac{e^{i\mu} - e^{\alpha - i\mu}}{e^\alpha - 1} \right|^2 = \frac{\cosh(\alpha) - \cos(2\mu)}{\cosh(\alpha) - 1} \quad (1.44)$$

Um die Fouriertransformation auf ein Integral der bekannten Form (1.38) zurückzuführen, leitet man $\log(|L(e^{ik(\alpha)})|)$ nach dem Parameter μ ab.

$$\partial_\mu \left(\frac{1}{2} \log \left(\frac{\cosh(\alpha) - \cos(2\mu)}{\cosh(\alpha) - 1} \right) \right) = \frac{1}{2} \frac{2 \sin(2\mu)}{\cosh(\alpha) - \cos(2\mu)} \quad (1.45)$$

Damit ist die Fouriertransformierte

$$\frac{1}{2\pi} \partial_\mu \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix\alpha} \log(|L(e^{ik(\alpha)})|) d\alpha = \frac{\sinh((\pi - 2\mu)x)}{\sinh(\pi x)}$$

also

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix\alpha} \log(|L(e^{ik(\alpha)})|) d\alpha &= \int_0^\mu \frac{\sinh((\pi - 2\mu')x)}{\sinh(\pi x)} d\mu' \\ &= \frac{-1}{2 \sinh(\pi x)} \left(\frac{1}{x} \cosh((\pi - 2\mu')x) \right)_0^\mu = \frac{\sinh((\pi - \mu)x) \sinh(\mu x)}{x \sinh(\pi x)}. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Für die freie Energie (1.42) erhält man schließlich wegen der Unitarität der Fouriertransformation³ das Integral über das Produkt der Fouriertransformierten

$$f = \varepsilon_1 - k_b T \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sinh(\mu x) \sinh((\pi - \mu)x)}{2x \sinh(\pi x) \cosh(\mu x)}. \quad (1.47)$$

Dieses Integral kann im allgemeinen nicht analytisch berechnet werden.

Lösung für $\Delta < -1$

Dieser Bereich ist der antiferroelektrische Bereich, also $K > 1$ in Abbildung 0.5. Die Parameter μ und α in (1.27) und (1.28) wären hier rein imaginär. Deshalb ersetzt man μ durch $-i\lambda$ und α durch $-i\alpha$; also

$$\lambda := \operatorname{arccosh}(-\Delta). \quad (1.48)$$

Man geht nun genauso vor wie oben. Es stellt sich heraus, daß die transformierte Integralgrenze hier $Q_1 = \pi$ ist. Deshalb kann die Integralgleichung durch Fourierreihen gelöst werden.

Man erhält schließlich

$$f = \varepsilon_1 - k_b T \left(\frac{1}{2} \lambda + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-m\lambda} \sinh(m\lambda)}{m \cosh(m\lambda)} \right). \quad (1.49)$$

³Siehe z.B. [Gro88] Kapitel 3.5.

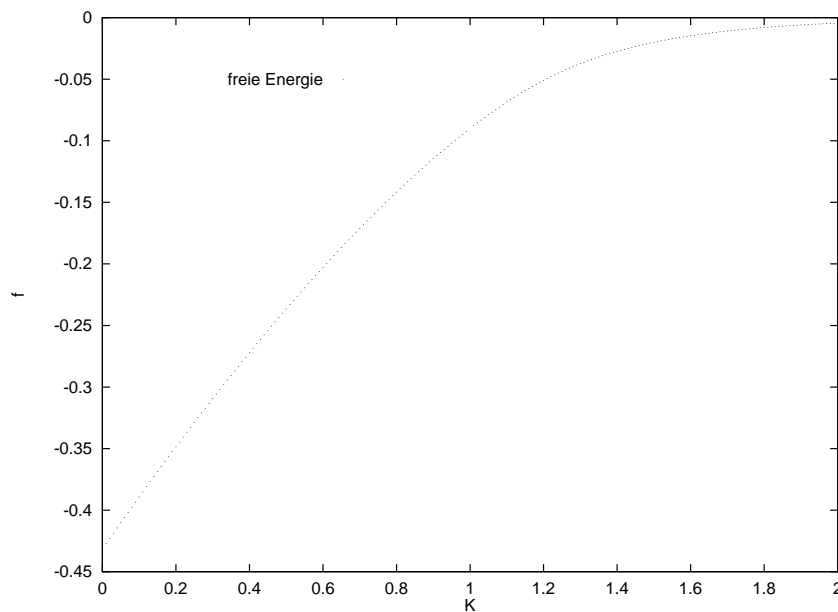


Abbildung 1.5: Die freie Energie, aufgetragen in Abhängigkeit von der K . Bei $K = 1$ befindet sich der Phasenübergang des Modells.

Der Fall $\Delta > 1$ ist im symmetrischen Sechs-Vertex-Modell nicht möglich.

Die Gleichungen (1.47) und (1.49) können zwar nicht analytisch gelöst, aber ohne Schwierigkeiten numerisch ausgewertet werden. Das Ergebnis ist in Abbildung 1.5 zu sehen. Die freie Energie ist am Übergang zwischen den Bereichen bei $K = 1$ stetig.

1.3 Lösungsversuche für die Bethe-Gleichungen

Trotz der wenig erfolgversprechenden Situation sollen zwei Versuche unternommen werden, die Bethe-Gleichungen numerisch zu lösen. Man kann damit zumindest besser verstehen, worin die Probleme im einzelnen liegen.

1.3.1 Numerischer Lösungsversuch

Gleichung (1.10) kann man für festes N und n in ein System von Polynomen umformen.

$$z_j^N \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^n S_{jl} - (-1)^{n-1} \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^n S_{lj} = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (1.50)$$

Man erhält ein System von n gekoppelten Polynomen vom Grad $> N$, das zu (1.10) äquivalent ist, sofern die S_{jl} im Nenner nicht 0 sind. Betrachtet man (1.10) genauer,

sieht man, daß für alle Lösungen (z_1, \dots, z_n) gilt

$$(z_1 z_2 \cdots z_n)^N = 1, \quad \text{also} \quad z_n = \frac{\zeta_N^k}{(z_1 z_2 \cdots z_{n-1})}, \quad k \in \{0, \dots, n-1\}, \quad (1.51)$$

mit einer N -ten Einheitswurzel ζ_N . Mit dieser Beziehung kann eine der Variablen aus dem System (1.50) entfernt werden, allerdings muß man dann wieder ein System von rationalen Funktionen lösen und man hat den zusätzlichen Parameter k zu berücksichtigen. Trotzdem lohnt sich dieses Vorgehen, denn (1.51) beschreibt eine Mannigfaltigkeit, so daß es sehr vorteilhaft ist, die Mannigfaltigkeit zu entfernen, bevor man ein numerisches Lösungsverfahren beginnt.

Die Gleichungen wurden mit *Maple V Release 3* symbolisch generiert, als C-Quelltext exportiert und in ein Programm eingebaut, das auf der Routine `mnewt` aus [PTVF94] beruht, einem Newton-Raphson-Verfahren zur Bestimmung von Nullstellen von nicht-linearen Gleichungssystemen. Dieses Verfahren benötigt außerdem noch die Jakobi-matrix des Gleichungssystems, die auch mit *Maple* erzeugt wurde. Das Newton-Raphson-Verfahren konvergiert dann gegen eine Nullstelle, wenn man von einem guten Startwert aus die Iteration beginnt. Ansonsten konvergiert das Verfahren mit großer Wahrscheinlichkeit überhaupt nicht. Wenn man also nicht genau weiß, wo man nach den Nullstellen suchen muß oder eine ganze Reihe von Nullstellen relativ dicht liegen, hat man keine andere Möglichkeit als den vermuteten Lösungsraum mit einem dichten Gitter von Startwerten systematisch abzusuchen.

Hat man eine Nullstelle von (1.50) gefunden, so muß zunächst überprüft werden, ob es sich auch wirklich um eine Lösung von (1.10) handelt, also ob $S_{jl} \neq 0$ ist. Außerdem muß überprüft werden, ob der zugehörige Eigenvektor (Gleichung (1.7)) existiert. Da es sehr viele Nullstellen in dem System gibt und viele von ihnen nicht einer der gesuchten Lösungen von (1.10) entsprechen, ist das Verfahren sehr zeitaufwendig. In Gleichung (1.7) muß zur Berechnung des Eigenvektors über alle Elemente der symmetrischen Gruppe S_n summiert werden. Interessant werden die Ergebnisse in Größenordnungen von $n > 10$ im Vergleich zu Transfermatrixverfahren (Kapitel 2). Allein die Aufzählung dieser Permutationen ist sehr zeitaufwendig. Hat man die Existenz des Eigenvektors überprüft, kann man mit Gleichung (1.14) den Eigenwert aus der Lösung (z_1, \dots, z_n) berechnen.

Im einfachen Beispiel $n = 2$ kann man das Gleichungssystem noch gut übersehen und auf eine rationale Gleichung reduzieren.

$$\begin{aligned} z_1^N (1 - 2\Delta z_2) + z_1^{N+1} z_2 + z_1 (z_2 - 2\Delta) + 1 &= 0 \\ z_2^N (1 - 2\Delta z_1) + z_2^{N+1} z_1 + z_2 (z_1 - 2\Delta) + 1 &= 0 \end{aligned} \quad (1.52)$$

$$z_1 z_2 = \pm 1 \quad (1.53)$$

In einem konkreten Beispiel mit $N = 5$ und $K = 0$ wurden die Nullstellen berechnet. Die Werte von z_1 für die Nullstellen, die zu einem richtigen Eigenwert führen, sind in Abbildung 1.6 gezeigt. Zwei von ihnen sind überzählige Lösungen, die erst an einem

verschwindenden Eigenvektor zu erkennen sind. Insgesamt findet man 25 Nullstellen in einem quadratischen Gebiet von $-10 < \operatorname{Re}(z) < 10$, $-10 < \operatorname{Im}(z) < 10$. Außerdem kann man sehen, daß etliche der Nullstellen noch deutlich vom Einheitskreis entfernt liegen. Es muß ein recht großes Gebiet abgesucht werden.

Es stellte sich heraus, daß diese Methode an dem großen Aufwand scheitert. Die Dimension des Lösungsraums (aufgefaßt als \mathbb{R} -Vektorraum) wächst linear mit $2(n-1)$, und damit wächst auch die Menge der abzusuchenden Startwerte bei konstanter Dichte mit $2^{2(n-1)}$. In einem Versuch mit $N = 6$, $n = 3$ war der Zeitbedarf bereits so groß, daß der Versuch abgebrochen werden mußte. Die Gleichungen haben in dem Fall mit der Abkürzung $p := 2\Delta$ diese Gestalt:

$$\begin{aligned} & p^2 z_1^N z_2 z_3 - p^2 z_1 z_2 + p z_1^2 z_2 + p z_1 z_2 z_3 - 2 p z_2 z_3 z_1^{N+1} \\ & \quad - z_1^2 z_2 z_3 - p z_1^N z_2 - p z_1^N z_3 + z_2 z_3 z_1^{N+2} \\ & + p z_1 + p z_2 - z_1 z_2 - z_1 z_3 + z_2 z_1^{N+1} + z_3 z_1^{N+1} + z_1^N - 1 = 0 \end{aligned} \quad (1.54)$$

$$\begin{aligned} & p^2 z_1 z_3 z_2^N - p^2 z_2^2 + p z_1 z_2^2 - 2 p z_1 z_3 z_2^{N+1} \\ & + p z_2^2 z_3 - z_1 z_2^2 z_3 - p z_1 z_2^N - p z_3 z_2^N + z_1 z_3 z_2^{N+2} \\ & + 2 p z_2 - z_1 z_2 + z_1 z_2^{N+1} - z_2 z_3 + z_3 z_2^{N+1} + z_2^N - 1 = 0 \end{aligned} \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} & p^2 z_1 z_2 z_3^N - p^2 z_3^2 - 2 p z_1 z_2 z_3^{N+1} \\ & + p z_1 z_3^2 + p z_2 z_3^2 - z_1 z_2 z_3^2 - p z_1 z_3^N - p z_2 z_3^N + z_1 z_2 z_3^{N+2} \\ & + 2 p z_3 - z_1 z_3 + z_1 z_3^{N+1} - z_2 z_3 + z_2 z_3^{N+1} + z_3^N - 1 = 0 \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$z_1 z_2 z_3 = \zeta_3^k, \quad k \in \{0, 1, 2\} \quad (1.57)$$

1.3.2 Lösungsversuch mit GRÖBNER-Basen

Dieses Verfahren besteht aus einem algebraischen Algorithmus, der ein System von Polynomen in ein in dem Sinne äquivalentes System von Polynomen umformt, daß beide Systeme dieselben Nullstellen haben. In der sogenannten Standard- oder GRÖBNER-Basis ist das Gleichungssystem soweit als möglich so umgeformt, daß die Variablen getrennt und eliminiert sind. Dieses Gleichungssystem kann dann sukzessive gelöst werden. Im allgemeinen erhält man mehrere Sätze von Gleichungssystemen. In gewisser Weise ist das Verfahren ähnlich dem Gaußschen Eliminationsverfahren für lineare Gleichungssysteme. Eine genaue Beschreibung befindet sich in [DST93]. Zu *Maple V Release 3* gehört ein Paket, das solch einen Algorithmus zur Verfügung stellt.

Das Verfahren soll hier an einem kleinen Beispiel veranschaulicht werden. Für $n = 2$ erhält man wie im vorigen Abschnitt zwei Polynome (1.53). Wählt man $N = 4$, so

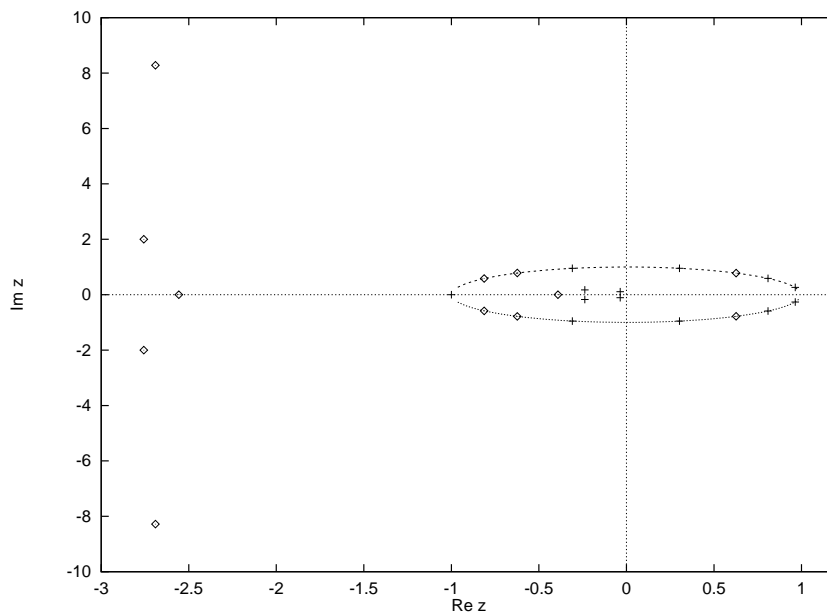


Abbildung 1.6: Lage der Nullstellen in der komplexen Ebene für $N = 5$, $n = 2$, $K = 0$. Die mit Kreuzchen dargestellten Nullstellen gehören nicht zu Eigenwerten.

erhält man durch Anwenden des Algorithmus einen Satz von 6 Gleichungssystemen mit je 2 Gleichungen, die leicht gelöst werden können.

$$-z_2 + z_1 = 0, \quad 1 - pz_2 + z_2^2 = 0, \quad (1.58)$$

$$-z_2 + z_1 = 0, \quad 1 + z_2^4 = 0 \quad (1.59)$$

$$2z_1 - p - pz_2^2 + 2z_2^3 = 0, \quad 2 - pz_2 - pz_2^3 + 2z_2^4 = 0 \quad (1.60)$$

$$z_1 + 1 = 0, \quad z_2 - 1 = 0 \quad (1.61)$$

$$z_1 - 1 = 0, \quad z_2 + 1 = 0 \quad (1.62)$$

$$(2p^2 - 8)z_1 + 4p + (-p^4 + 4p^2 - 8)z_2 + (-4p + 2p^3)z_2^2 - 2p^2z_2^3 = 0, \\ 2z_2^4 - 2pz_2^3 + z_2^2p^2 - 2pz_2 + 2 = 0 \quad (1.63)$$

So hat z. B. bei $K = 2.0$ Gleichungssystem (1.60) eine Nullstelle $(z_1, z_2) = (0.13746 + i 0.99051, 0.13746 - i 0.99051)$. Damit erhält man aus Gleichung (1.14) den Eigenwert $\lambda = 1.04218$, den man mit Hilfe der Ergebnisse aus Kapitel 2 als den höchsten Eigenwert der Transfermatrix zu $N = 4$ identifizieren kann. Im ganzen erhält man wie im vorigen Abschnitt viel mehr Lösungen als Eigenwerte vorhanden sind.

Auch wenn das Verfahren auf den ersten Blick recht vielversprechend aussieht, kann man damit dem Ziel, die Bethe-Gleichungen zu lösen, nicht viel näher kommen. Der Aufwand für das Verfahren hängt im wesentlichen doppelt exponentiell von der Anzahl der Variablen und dem maximalen Grad der Polynome ab. Für 3 Polynome war *Maple* bereits nicht mehr in der Lage, die GRÖBNER-Basis in angemessener Zeit zu berechnen.

Kapitel 2

Numerische, deterministische Transfermatrix-Methoden

Im vorigen Kapitel war der Transfermatrixformalismus der Ausgangspunkt für den Bethe-Ansatz. Die numerische Lösung des daraus gewonnenen Gleichungssystems stellte sich als sehr schwer heraus. Deshalb liegt es nahe, den Versuch, numerische Resultate für endliche Gitter zu erhalten, einen Schritt vorher, bei der Transfermatrix zu beginnen.

In diesem Kapitel werden eine ganze Reihe von Verfahren besprochen, mit denen man einige Eigenwerte der Transfermatrix numerisch berechnen kann. Zunächst werden direkte Standardverfahren zur Diagonalisierung angewendet. Die Powermethode ist ein praktisches iteratives Verfahren, den höchsten Eigenwert zu berechnen. Davon ausgehend werden im nächsten Kapitel stochastische Verfahren entwickelt, die einige Probleme lösen können, die durch die Größe der Transfermatrix entstehen.

Es werden nur Transfermatrizen des symmetrischen Sechs-Vertex-Modells verwendet. In allen Beispielen wird die Parametrisierung durch die inverse Temperatur relativ zum kritischen Punkt, K , verwendet (siehe Kapitel 0, (0.9)). Außerdem werden aus zwei Gründen nur Gitter von gerader Breite N betrachtet. Die Grundzustandskonfiguration des Modells besteht aus abwechselnd den Vertextypen 5 und 6. Bei periodischen Randbedingungen und ungerader Gitterbreite ist diese Konfiguration nicht möglich. Deshalb erhält man für ungerade N eine freie Energie die sich mit $N \rightarrow \infty$ von oben her der freien Energie im thermodynamischen Limes nähert, wohingegen die freie Energie bei geradem endlichem N kleiner ist als im thermodynamischen Limes.

Der zweite Grund hängt mit dem ersten zusammen. Wenn N ungerade ist, gibt es zwei identische Blöcke in der Transfermatrix, die gleich groß und größer als alle anderen sind. Also ist der größte Eigenwert der Transfermatrix wenigstens zweifach entartet. Für gerades N gibt es einen eindeutigen zentralen Block in der Transfermatrix, dessen größter Eigenwert auch der größte der Transfermatrix ist. Daß dieser

Eigenwert nicht entartet ist, ist nicht ohne weiteres klar, denn der zentrale Block enthält eine ganze Reihe Null-Einträge. LIEB [Lie71] gibt an, daß nach FROBENIUS der höchste Eigenwert einer Matrix mit nichtnegativen Einträgen dann nicht entartet ist, wenn es ein ungerades $L(i, j) \in \mathbb{N}$ gibt, so daß $(T^L)_{ij} > 0$ ist. Die numerischen Ergebnisse zeigen zumindest, daß der höchste Eigenwert für endliches N nicht entartet ist. Die Struktur des Spektrums wird in Kapitel 4 genauer betrachtet.

Ein anderer Satz von FROBENIUS [Zur50] garantiert die für die Anwendung der Powermethode wichtige Eigenschaft einer nichtnegativen, reellen, symmetrischen Matrix, nämlich, daß es einen positiven Eigenwert mit maximalem Betrag unter sämtlichen Eigenwerten gibt und der zugehörige Eigenvektor nichtnegative Komponenten hat.

Als erstes wird die Ausnutzung von Symmetrien diskutiert, die man verwenden kann, um die Transfermatrix zu verkleinern.

2.1 Reduktion der Transfermatrix durch Symmetrien

Betrachtet man die Eigenwertgleichung für die Transfermatrix T

$$T\psi(c) = \lambda\psi(c), \quad c \in K, \quad (2.1)$$

so sieht man, daß man verschiedene Symmetrien der Zeilenzustände c bzw. der Eigenvektoren der Transfermatrix ψ ausnutzen kann, um die Dimension der Matrix zu reduzieren. Die Transfermatrix ist invariant bezüglich der Umkehrung aller Belegungszustände einer Kantenkonfiguration, Spiegelung einer Kantenkonfiguration an ihrer Mitte und Rotation einer Kantenkonfiguration längs der Zeile. Das bedeutet, der entsprechende Operator kommutiert mit der Transfermatrix und kann deshalb simultan mit T diagonalisiert werden. Die verschiedenen Symmetrieoperatoren kommutieren nicht untereinander.

Die Symmetrieoperatoren werden zunächst auf den Kantenkonfigurationen K definiert. Dabei bezeichne c_i hier die i -te Kante ($i \in \{1, \dots, N\}$) einer Kantenkonfiguration, die belegt oder unbelegt sein kann.

Der Paritätsoperator P vertauscht den Belegungszustand der Kanten von c .

$$(Pc)_i := \begin{cases} \text{belegt} & ; \text{ falls } c_i \text{ unbelegt} \\ \text{unbelegt} & ; \text{ falls } c_i \text{ belegt.} \end{cases}$$

In der Pfeildarstellung bedeutet die Paritätsumkehr im 6-Vertex-Modell die Umkehrung aller Pfeilspitzen.

S ist die räumliche Spiegelung einer Kantenkonfiguration an ihrer Mitte.

$$(Sc)_i := c_{N-i+1}$$

R bezeichnet die Rotation der Kantenkonfiguration um einen Gitterplatz nach rechts.

$$(Rc)_i := c_{i-1}$$

Wegen der periodischen Randbedingungen ist dies auch eine Symmetrie der Transfermatrix. Die entsprechenden Operatoren auf \mathcal{H} werden mit denselben Symbolen bezeichnet und sind durch $P\psi(c) := \psi(Pc)$ usw. definiert.¹

Die Menge aller Konfigurationen K kann mittels P in zwei Mengen geteilt werden, so daß

$$K = M \cup M^C \quad \text{und} \quad M^C = PM. \quad (2.2)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \sum_{c' \in K} T(c, c')\psi(c') &= \sum_{c' \in M} T(c, c')\psi(c') + \sum_{c' \in M^C} T(c, c')\psi(c') \\ &= \sum_{c' \in M} \underbrace{[T(c, c') + T(c, Pc')]}_{=: \hat{T}(c, c')} \psi(c') \\ &= \lambda\psi(c). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Wählt man jetzt $c \in M$, so hat man mit \hat{T} eine Matrix, deren Dimension nur halb so groß ist wie die von T .

Die Ausnutzung von S verläuft analog.

Ergiebiger ist allerdings die Ausnutzung der Rotationssymmetrie der Kantenkonfiguration. Wendet man die von R erzeugte Gruppe², $\langle R \rangle$, auf die Menge der Konfigurationen K an, so ist K die disjunkte Vereinigung der verschiedenen Bahnen bezüglich $\langle R \rangle$ in K . Ist B ein Vertretersystem der Bahnen in K , so hat man

$$\begin{aligned} &\sum_{c' \in K} T(c, c')\psi(c') \\ &= \sum_{c' \in B} \left[T(c, c') + T(c, Rc') + T(c, R^2c') + \dots + T(c, R^{s(c')-1}c') \right] \psi(c') \\ &= \lambda\psi(c). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dabei ist $s(c')$ die Länge der Bahn von c' . Definiert man jetzt für $c, c' \in B$ die Matrix

$$\hat{T}(c, c') := \sum_{i=0}^{s(c')-1} T(c, R^i c'), \quad (2.5)$$

so ist die Dimension des Problems um den Faktor N verringert.

¹Üblicherweise definiert man $P\psi(c) := \psi(P^{-1}c)$. Weil entweder $P^2 = 1$ ist oder alle möglichen Rotationsoperatoren kommutieren, ist die obige Definition hier genauso gut.

²Für eine allgemeine Einführung in die Begriffsbildung der Operation von Gruppen auf Mengen siehe zum Beispiel [Lor92] §10.

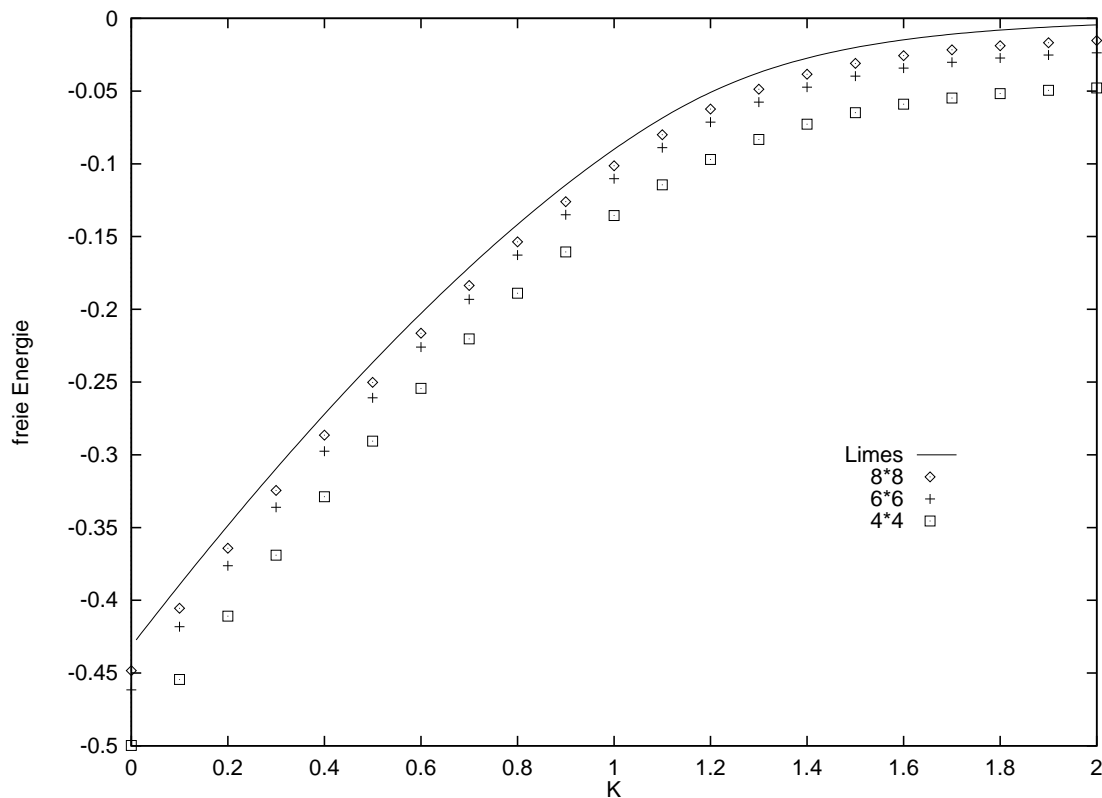


Abbildung 2.1: Freie Energie des Modells für kleine Gitter und im thermodynamischen Limes.

Welche Eigenwerte der Transfermatrix T auch Eigenwerte der reduzierten Matrix \hat{T} sind, hängt von den Symmetrien der zugehörigen Eigenvektoren ab. Der größte Eigenwert ist immer ein Eigenwert von \hat{T} . Er gehört zum Grundzustand des Modells und besitzt aus physikalischen Gründen alle Symmetrien. Bei der Behandlung des Spektrums in Abschnitt 4.2 werden die Symmetrien weiterer Eigenwerte betrachtet.

2.2 Numerische Diagonalisierung der Transfermatrix

Als Ausgangspunkt für weitere Betrachtungen soll das Spektrum der Transfermatrix für kleine Gittergrößen mit Standardverfahren zur Diagonalisierung von Matrizen berechnet werden. Dazu benötigt man eine Routine, die die Transfermatrix entsprechend den Modellregeln erzeugt. Diese wird dann mit den Routinen `tred2` und `tqli` aus [PTVF94] diagonalisiert. Diese Kombination liefert alle Eigenwerte und Eigenvektoren einer reellen symmetrischen Matrix. Um diese Verfahren anzuwenden, muß die Transfermatrix vollständig in den Speicher des Rechners passen (Tabelle 2.1). Dadurch ist die mögliche Größe des Gitters recht beschränkt. Wenn man die Zustandssumme für ein kleines Gitter berechnen will, benötigt man alle Eigenwerte, so

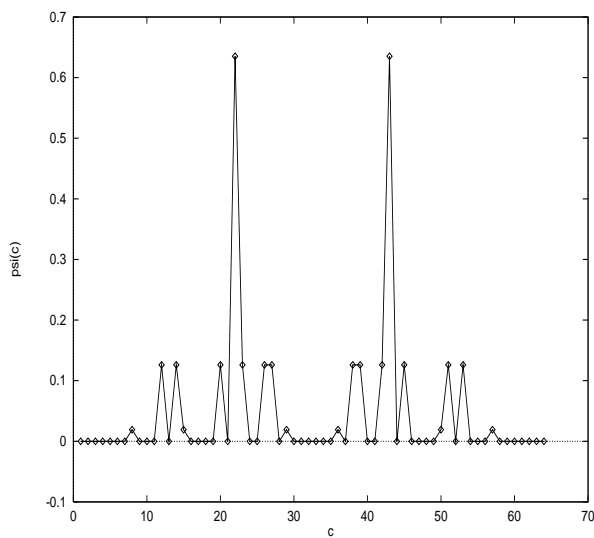


Abbildung 2.2: Der Eigenvektor zum höchsten Eigenwert aufgetragen in Abhängigkeit von einer Numerierung der Kantenkonfigurationen mittels binärer Kodierung der Linienbelegung bei $N = 6$ und $K = 1.5$, also im antiferroelektrischen Bereich. Die beiden Spitzen liegen auf den beiden Kantenkonfigurationen der Grundzustände.

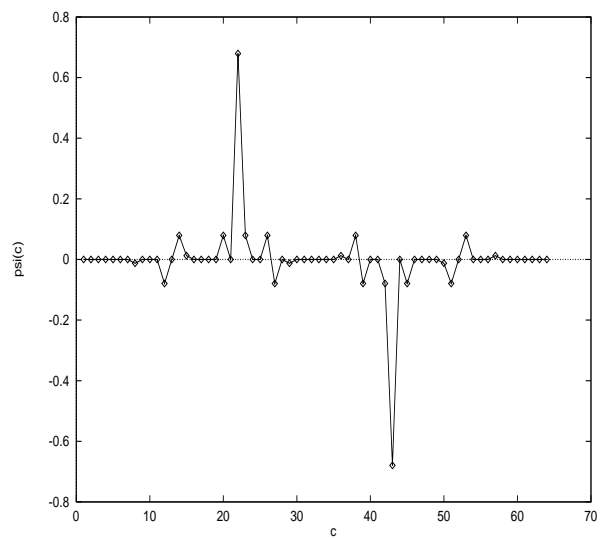


Abbildung 2.3: Der Eigenvektor zum betragsmäßig zweitgrößten Eigenwert bei $N = 6$ und $K = 1.5$. Die beiden Spitzen liegen hier auch auf den beiden Kantenkonfigurationen der Grundzustände. Dies ist die antisymmetrische Überlagerung der beiden Grundzustände

N	Kilobyte
20	266 677 965
18	18 468 003
16	1 294 038
14	92 021
12	6 670
10	496
8	38
6	3

Tabelle 2.1: Der Speicherplatz für den zentralen, größten Block der Transfermatrix in Kilobyte mit 8 Byte Fließkommazahlen.

daß Symmetrienausnutzung in diesem Fall nicht weiter hilft. Der Zeitbedarf für das einmalige Generieren der Matrix und die Diagonalisierung spielen im Vergleich zu den Speicherbeschränkungen hier keine Rolle.

In Tabelle 2.2 sind die aus den Eigenwerten gewonnenen freien Energien für verschiedene Gitter gezeigt. Die Abbildungen 2.2 und 2.3 zeigen (bei $N = 6$ im antiferroelektrischen Bereich) die beiden Eigenvektoren, die zu einer symmetrischen bzw. antisymmetrischen Kombination der beiden Grundzustände gehören.

2.3 Powermethode

Nachdem abzusehen war, daß mit allen Methoden, die die komplette Transfermatrix im Speicher benötigen, kein Fortschritt zu erzielen war, um etwas größere Gitter zu betrachten, mußten andere Methoden angewendet werden. Die Powermethode ist ein einfaches iteratives Verfahren, den größten Eigenwert einer Matrix zu berechnen. Man bekommt damit zwar nicht das komplette Spektrum, aber der führende Eigenwert genügt, um die freie Energie eines Gitters zu erhalten, das in einer Richtung unendlich lang ist ($M \rightarrow \infty$) bei endlicher Breite N , siehe Gleichung (0.4).

Man beginnt das Verfahren mit einem beliebigen auf 1 normierten Startvektor $\phi \in \mathcal{H}$ und wendet die Transfermatrix auf den Vektor an. Anschließend normiert man ihn wieder und wiederholt dies, bis die Norm des Vektors mit der gewünschten Genauigkeit konstant ist. Nach einigen Iterationen dreht sich der Vektor in Richtung des höchsten Eigenwertes, und der Faktor, mit dem der Vektor dann multipliziert wird, ist der Eigenwert. Die Norm, die man in jedem Schritt berechnet, konvergiert also gegen den höchsten Eigenwert.

Die zu iterierende Matrix T ist reell und symmetrisch mit nichtnegativen Einträgen. Die ψ_i , $i \in \{1, \dots, \dim(T)\}$, seien eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren von T . Der Startvektor ϕ läßt sich darstellen als $\phi = \sum_i c_i \psi_i$ mit $c_i = \langle \phi, \psi_i \rangle$. Der L -fach

K	$\infty \times \infty$	8×8	6×6	4×4	2×2
0.0	-	-0.4483767	-0.46154829	-0.49976982	-0.69314718
0.1	-0.38929528	-0.40551945	-0.41814698	-0.45444274	-0.62383246
0.2	-0.34860095	-0.36419422	-0.37629238	-0.41085081	-0.55451774
0.3	-0.30951946	-0.32447865	-0.33605429	-0.36897764	-0.48520302
0.4	-0.27213691	-0.28645872	-0.29751516	-0.32885472	-0.41588830
0.5	-0.23654822	-0.25023152	-0.26077327	-0.29057419	-0.34657359
0.6	-0.20286013	-0.21644460	-0.22595090	-0.25430340	-0.27725887
0.7	-0.17119587	-0.18363426	-0.19321018	-0.22029786	-0.20794415
0.8	-0.14170286	-0.15358806	-0.16277750	-0.18890341	-0.13862943
0.9	-0.11456677	-0.12603301	-0.13496948	-0.16053170	-0.06931471
1.0	-	-0.10134219	-0.11019643	-0.13559375	0.00000000
1.1	-0.06854932	-0.07998934	-0.08889794	-0.11439309	0.06931471
1.2	-0.05088400	-0.06240168	-0.07138266	-0.09701503	0.13862943
1.3	-0.03734839	-0.04868027	-0.05764063	-0.08327150	0.20794415
1.4	-0.02734223	-0.03844274	-0.04728570	-0.07273767	0.27725887
1.5	-0.02004123	-0.03099168	-0.03969023	-0.06485739	0.34657359
1.6	-0.01472955	-0.02560725	-0.03418923	-0.05905803	0.41588830
1.7	-0.0108599	-0.02170758	-0.03021454	-0.05482947	0.48520302
1.8	-0.00803210	-0.01886854	-0.02733340	-0.05175777	0.55451774
1.9	-0.00595817	-0.01679063	-0.02523383	-0.04952624	0.62383246
2.0	-0.00443157	-0.01526267	-0.02369533	-0.04790119	0.69314718

Tabelle 2.2: Die freie Energie des Sechs-Vertex-Modells für kleine quadratische Gitter. In der zweiten Spalte befindet sich zum Vergleich die freie Energie im thermodynamischen Limes, die in Abbildung 1.5 als Ergebnis der Lösung in Kapitel 1 gezeigt und aus Gleichung (1.47) und (1.49) berechnet wurde.

iterierte Vektor sei mit

$$\phi^{(L)} := T^L \phi$$

bezeichnet. Nach L Iterationen erhält man dann folgenden Ausdruck für $\lambda^{(L+1)}$:

$$\begin{aligned} \lambda^{(L+1)} &= \frac{\|\phi^{(L+1)}\|}{\|\phi^{(L)}\|} = \frac{\|T^{L+1}\phi\|}{\|T^L\phi\|} \\ &= \sqrt{\frac{\sum_i |c_i|^2 \lambda_i^{2(L+1)}}{\sum_i |c_i|^2 \lambda_i^{2L}}} = \lambda_0 \sqrt{\frac{\sum_i |c_i|^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0}\right)^{2(L+1)}}{\sum_i |c_i|^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0}\right)^{2L}}}. \end{aligned}$$

Bezeichnet man $r := \frac{\lambda_1}{\lambda_0}$ und $v := \left|\frac{c_1}{c_0}\right|^2$, so erhält man näherungsweise

$$\begin{aligned} \lambda^{(L+1)} &\approx \lambda_0 \sqrt{\frac{1 + \left|\frac{c_1}{c_0}\right|^2 r^{2L+2}}{1 + \left|\frac{c_1}{c_0}\right|^2 r^{2L}}} = \lambda_0 \sqrt{\frac{1}{1 + vr^{2L}} + \frac{vr^{2L+2}}{1 + vr^{2L}}} \\ &\approx \lambda_0 \sqrt{1 - vr^{2L}} \approx \lambda_0 \left(1 - \frac{1}{2} vr^{2L}\right). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Betrachtet man den relativen Fehler $E(L) := \frac{\lambda^{(L)} - \lambda_0}{\lambda_0}$, so erhält man

$$E(L) = -\frac{1}{2} vr^{2L} = -\frac{1}{2} v \exp\left(-2 \log\left(\frac{\lambda_0}{\lambda_1}\right) L\right).$$

Der relative Fehler wird also exponentiell kleiner mit einer Rate von $2 \log(\lambda_0/\lambda_1)$.

Statt der gewöhnlichen Norm kann man auch eine Projektion auf einen beliebigen Vektor ρ verwenden und erhält für

$$\lambda^{(L+1)} = \frac{\langle \rho, \phi^{(L+1)} \rangle}{\langle \rho, \phi^{(L)} \rangle} \quad (2.7)$$

nach analoger Rechnung

$$E(L) = -\frac{\langle \rho, \psi_1 \rangle}{\langle \rho, \psi_0 \rangle} \exp\left(-\log\left(\frac{\lambda_0}{\lambda_1}\right) L\right). \quad (2.8)$$

Die Konvergenz ist dabei nur halb so schnell.

Natürlich ist dies kein Beweis für die Konvergenz der Powermethode, sondern eine Abschätzung für die Konvergenzgeschwindigkeit in vernünftigen Fällen. Man sieht, daß die Rate nur von dem Verhältnis der führenden Eigenwerte bestimmt wird. Der Vorfaktor hängt hingegen wesentlich von $v = \left|\frac{c_1}{c_0}\right|^2$ ab. Die Wahl eines günstigen ϕ , d.h. mit $\langle \phi, \psi_0 \rangle$ möglichst groß, beschleunigt die Konvergenz sehr. Wenn das Spektrum geeignet ist, also z.B. λ_1 dicht an λ_0 liegt, λ_2 aber deutlich kleiner ist,

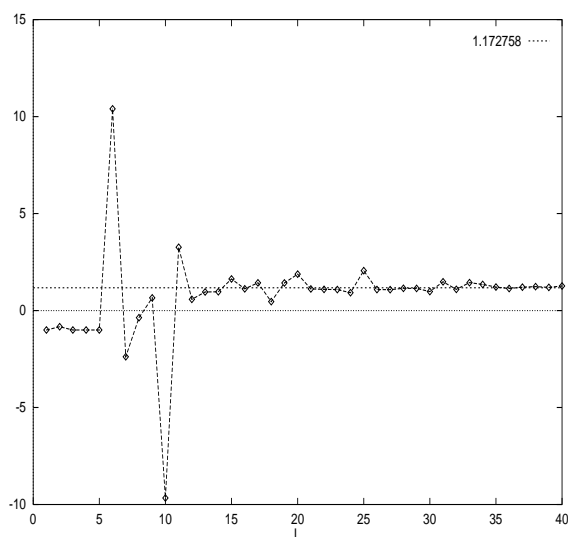


Abbildung 2.4: Die ersten 40 Iterationsschritte der Powermethode mit einem schlechten Startvektor. 1.172758 ist der exakte Wert des größten Eigenwertes. Die Matrix hat die Dimension 20.

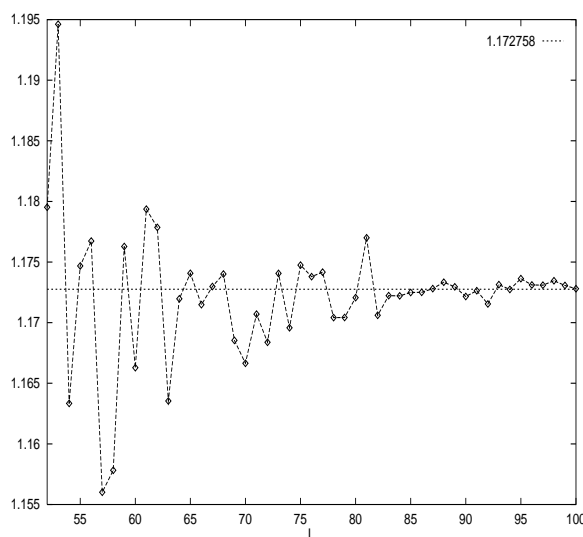


Abbildung 2.5: Auch im weiteren Verlauf derselben Iteration ist die Konvergenz schlecht.

kann man versuchen ϕ so zu wählen, daß $c_1 = 0$ ist. Dann wird die Konvergenz wie oben durch $v = |c_2/c_0|^2$ und λ_2/λ_0 bestimmt.

In Abbildung 2.4 ist das Ergebnis einer Iteration nach Gleichung (2.7) mit einem absichtlich schlecht gewählten Startvektor gezeigt, der orthogonal zu ψ_0 ist und nahe bei ψ_1 liegt. Man sieht, daß die Iteration zunächst einige Schritte in Richtung eines anderen Eigenwertes macht, bevor heftige Fluktuationen die Drehung in die gewünschte Richtung einleiten. Auch nach längerer Iteration (Abbildung 2.5) sind die Oszillationen noch zu sehen, und die Konvergenz ist schlecht. Mit einem guten Startvektor (alle Komponenten haben den gleich Wert) erhält man bereits nach 16 Iterationen ein auf 8 Nachkommastellen stabiles Ergebnis.

Wenn man statt der Projektion die Norm verwendet, so erhält man keine Oszillationen, aber die Konvergenz ist dann auch sehr langsam. Die Verwendung von Projektionen ist bei der exakten Power-Methode ungünstig. Die Effekte werden hier diskutiert, weil Projektionen bei stochastischen Verfahren auftreten. (Kapitel 3)

2.3.1 Implementierung

Im Gegensatz zur direkten Diagonalisierung oder auch der Multiplikation von Matrizen, deren Zeitbedarf von der Ordnung (Dimension)³ ist [PTVF94]³, ist die

³Durch geschickte Zusammenfassung der Multiplikationen kann man auch ein Zeitverhalten wie (Dimension)^{log₂ 7} auf Kosten von mehr Additionen und eines erhöhten Verwaltungsaufwandes erreichen, so daß der Unterschied zwischen $\log_2 7 = 2.8$ und 3 erst bei sehr großen Matrizen

N	4	6	8	10	12	14
$\binom{N}{N/2}^2$	36	400	4900	63504	853776	11778624
Anteil „0“ in %	11	35	56	72	83	90

Tabelle 2.3: Für verschiedene Breiten des Gitters (N) ist die Anzahl der Elemente des zentralen (größten) Blocks der Transfermatrix und der Anteil der Einträge darin, die 0 sind, angegeben.

bei der Powermethode auftretende Multiplikation einer Matrix mit einem Vektor von der Ordnung (Dimension)². Außerdem gibt es noch mehrere Möglichkeiten, das Verfahren zu beschleunigen.

Da die Transfermatrix bei den angestrebten Gittergrößen nicht gespeichert werden kann, müssen die Einträge schnell generiert werden können. Man beobachtet, daß auch innerhalb der Blöcke der Transfermatrix bei großen Matrizen ein erheblicher Teil der Einträge 0 ist. (Tabelle 2.3)

Dies legt nahe, einen Algorithmus zur Erzeugung der Transfermatrix zu verwenden, der explizit nur die belegten Einträge der Transfermatrix erzeugt. Dabei ist es nicht von Bedeutung, in welcher Reihenfolge die Einträge generiert werden, solange garantiert ist, daß jeder belegte Eintrag genau einmal erzeugt wird. Der Speicherbedarf für die Multiplikation der Matrix mit einem Vektor ist dann auf den Speicherplatz für zwei Vektoren reduziert.

Der gesuchte höchste Eigenwert ist im zentralen Block ($n = N/2$) der Matrix zu finden (siehe Abschnitt 1.2). Wie dort angegeben, kann man eine Kantenkonfiguration c als $(x_1, \dots, x_{N/2})$ darstellen. Um festzustellen, ob ein Matrixelement $T(c, c')$ von 0 verschieden ist, muß man überprüfen, ob die Konfigurationen unter Beachtung der Modellregeln, z.B. durch Betrachten der Liniendarstellung, verbunden werden können.

Eine Möglichkeit dafür ist die folgende. Die zweite Konfiguration sei mit (y_1, \dots, y_n) bezeichnet. Definiert man (z_1, \dots, z_n) als Differenz zweier Konfigurationen mit $z_i := x_i - y_i$, so ist die Kombination genau dann zulässig, wenn entweder alle $z_i \geq 0$ oder alle $z_i \leq 0$ sind. In einer konkreten Implementierung kann die Auswertung also schon abgebrochen werden, wenn der erste Vorzeichenwechsel in den z_i auftritt. Sollte die Kombination erlaubt sein, kann dann der Wert des entsprechenden Matrixeintrags (für ein symmetrisches Sechs-Vertex-Modell) durch Abzählen derjenigen i -s, für die $x_i \neq y_i$ gilt, bestimmt werden. Diese Anzahl entspricht der Anzahl der Knotentypen 5 und 6 (Abbildung 0.3).

Die Diagonalelemente der Matrix können leicht erkannt und gesondert behandelt werden. Sie haben alle den gleichen Wert.

deutlich wird. Der entsprechende Abschnitt in [PTVF94] ist dementsprechend als „entertainment“ gekennzeichnet.

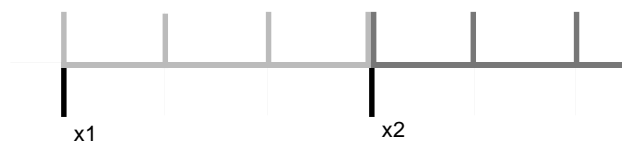


Abbildung 2.6: Die zu x_1, x_2 erlaubten Verbindungen. Die Überlagerung bei x_2 ist nicht erlaubt.

Damit kann jetzt auch ein Verfahren gewonnen werden, das die erlaubten Konfigurationen aufzählt. Genauer heißt das, daß zu einer gegebenen Konfiguration alle passenden Konfigurationen generiert werden sollen, während obiges Verfahren zwei vorgelegte Konfigurationen bewertet. Ausgangspunkt dafür ist, daß man sich zu gegebener Konfiguration $(x_1, \dots, x_{N/2})$ die möglichen Werte der z_i überlegt. Für die positiven z_i muß gelten: $0 \leq z_i \leq x_{i+1} - x_i$, und z_i maximal darf nicht gleichzeitig mit z_{i+1} minimal auftreten (Abbildung 2.6). Auf diese Weise schließt man Überschneidungen der Linien aus und kann so alle möglichen z_i und damit alle möglichen y_i aufzählen. Die negativen z_i können analog behandelt werden.

Eine weitere Optimierungsmöglichkeit bietet die Ausnutzung der Symmetrie der Transfermatrix bezüglich der Rotation der Konfigurationen. Weil die Matrix nicht gespeichert werden kann, kann man allerdings nicht genau auf die gleiche Weise, wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, vorgehen. Nachdem ein Eintrag generiert worden ist, werden alle aus dieser Kombination durch Rotation hervorgehenden Einträge gleichfalls in der Multiplikation berücksichtigt. Dazu ist es notwendig, ein Vertretersystem der Bahnen zu erzeugen, das dann auch die Menge der Startkonfigurationen $(x_1, \dots, x_{N/2})$ bildet. Damit wird auch sichergestellt, daß keine Kombination doppelt erzeugt wird.

Zur Erzeugung der Vertreterliste ist mir nichts Besseres eingefallen, als so vorzugehen, wie das Sieb von Eratosthenes⁴ arbeitet. Eine Liste aller Konfigurationen wird sequentiell abgearbeitet, und alle durch Rotation aus einem schon bearbeiteten Eintrag hervorgehenden Konfigurationen werden gestrichen und die Vertreter gesammelt. Der Zeitbedarf dafür ist bei größeren Gittern recht hoch, die Liste muß aber nur einmal für eine Gittergröße erstellt werden.

Mit diesem Verfahren konnte der größte Eigenwert bis zu einer Gitterbreite von $N = 20$ problemlos berechnet werden. Begrenzt wird dieses Verfahren zum einen durch den Zeitbedarf, zum anderen durch Speicherplatzprobleme. Diese entstehen durch die Notwendigkeit, die in der Liniendarstellung generierten Konfigurationen auf eine Numerierung der Transfermatrizeinträge möglichst ohne Zeitverlust abzubilden. Auch wenn man die Konfigurationen binär kodiert, ist dafür eine Tabelle der Größe $4 \cdot 2^N$ Bytes erforderlich. Sicher könnte man durch den Einsatz schnellerer Rechner N noch etwas vergrößern, aber prinzipiell stößt man dann doch an deutliche Grenzen.

⁴Eratosthenes von Kyrene, vermutlich 284 bis 202 v. Chr., Alexandria, erfand das nach ihm benannte Verfahren zur Auffindung von Primzahlen.

K	$\infty \times \infty$	$20 \times \infty$	$18 \times \infty$	$16 \times \infty$	$14 \times \infty$	$12 \times \infty$
0.0	–	–0.43282922	–0.43313478	–0.43356144	–0.43418273	–0.43513763
0.1	–0.38929528	–0.39060108	–0.39090647	–0.39133285	–0.39195359	–0.39290734
0.2	–0.34860095	–0.34990652	–0.35021179	–0.35063796	–0.35125829	–0.35221121
0.3	–0.30951946	–0.31082487	–0.31113005	–0.31155607	–0.31217613	–0.31312847
0.4	–0.27213691	–0.27344222	–0.27374735	–0.27417328	–0.27479317	–0.27574517
0.5	–0.23654822	–0.23785349	–0.23815861	–0.23858450	–0.23920434	–0.24015622
0.6	–0.20286013	–0.20416545	–0.20447059	–0.20489653	–0.20551644	–0.20646847
0.7	–0.17119587	–0.17250139	–0.17280663	–0.17323273	–0.17385296	–0.17480562
0.8	–0.14170286	–0.14300903	–0.14331456	–0.14374114	–0.14436221	–0.14531644
0.9	–0.11456677	–0.11587489	–0.11618113	–0.11660881	–0.11723166	–0.11818898
1.0	–	–0.09135273	–0.09165980	–0.09208868	–0.09271331	–0.09367348
1.1	–0.06854932	–0.06981705	–0.07011934	–0.07054214	–0.07115876	–0.07210793
1.2	–0.05088400	–0.05180352	–0.05207134	–0.05245273	–0.05301826	–0.05390221
1.3	–0.03734840	–0.03776752	–0.03794803	–0.03822330	–0.03865770	–0.03937647
1.4	–0.02734224	–0.02747548	–0.02756154	–0.02770975	–0.02796504	–0.02845651
1.5	–0.02004123	–0.02007600	–0.02010787	–0.02017132	–0.02027057	–0.02057594
1.6	–0.01472956	–0.01473781	–0.01474805	–0.01477176	–0.01479702	–0.01496696
1.7	–0.01085990	–0.01086178	–0.01086482	–0.01087304	–	–0.01096113
1.8	–0.00803211	–0.00803253	–0.00803339	–0.00803613	–	–0.00807446
1.9	–0.00595818	–0.00595827	–0.00595851	–0.00595940	–	–0.00597575
2.0	–0.00443157	–0.00443159	–0.00443166	–0.00443195	–	–0.00443885

K	$\infty \times \infty$	$10 \times \infty$	$8 \times \infty$	$6 \times \infty$	$4 \times \infty$	$2 \times \infty$
0.0	–	–0.43671524	–0.43960110	–0.44576535	–0.46298939	–0.34657359
0.1	–0.38929528	–0.39448223	–0.39736022	–0.40349296	–0.42049926	–0.27725887
0.2	–0.34860095	–0.35378414	–0.35665658	–0.36276816	–0.37963515	–0.20794415
0.3	–0.30951946	–0.31470006	–0.31756877	–0.32366660	–0.34044894	–0.13862944
0.4	–0.27213691	–0.27731596	–0.28018247	–0.28627231	–0.30300819	–0.06931472
0.5	–0.23654822	–0.24172673	–0.24459247	–0.25067957	–0.26740000	–0.00000000
0.6	–0.20286013	–0.20803933	–0.21090602	–0.21699638	–0.23373386	0.06931472
0.7	–0.17119587	–0.17637787	–0.17924814	–0.18535014	–0.20214228	0.13862944
0.8	–0.14170286	–0.14689197	–0.14977004	–0.15589474	–0.17277757	0.20794415
0.9	–0.11456677	–0.11977036	–0.12266085	–0.12881685	–0.14580306	0.27725887
1.0	–	–0.09525971	–0.09815935	–0.10433535	–0.12137695	0.34657359
1.1	–0.06854932	–0.07367817	–0.07655265	–0.08268399	–0.09962902	0.41588831
1.2	–0.05088400	–0.05538511	–0.05813443	–0.06406659	–0.08063285	0.48520303
1.3	–0.03734840	–0.04064365	–0.04309665	–0.04858585	–0.06438054	0.55451774
1.4	–0.02734224	–0.02939834	–0.03138647	–0.03617231	–0.05076848	0.62383246
1.5	–0.02004123	–0.02118696	–0.02264587	–0.02655973	–0.03960074	0.69314718
1.6	–0.01472956	–0.01532483	–0.01631087	–0.01933153	–0.03061012	0.76246190
1.7	–0.01085990	–0.01115726	–0.01178559	–0.01401158	–0.02348996	0.83177662
1.8	–0.00803211	–0.00817765	–0.00856270	–0.01014818	–0.01792679	0.90109133
1.9	–0.00595818	–0.00602873	–0.00625886	–0.00736138	–0.01362611	0.97040605
2.0	–0.00443157	–0.00446565	–0.00460102	–0.00535514	–0.01032799	1.03972077

Tabelle 2.4: Die freie Energie für verschieden breite, unendlich lange Streifen. Die letzte angegebene Stelle ist unsicher.

2.3.2 Weitere Eigenwerte mit der Powermethode

Obwohl die Powermethode zunächst nur den größten Eigenwert und den zugehörigen Eigenvektor einer Matrix liefert, kann man das Verfahren so erweitern, daß prinzipiell sukzessiv alle Eigenwerte bestimmt werden können.

Nachdem man den höchsten Eigenwert berechnet hat, beginnt man den iterativen Prozeß erneut und subtrahiert in jedem Schritt die Projektion des aktuellen Eigenvektors auf den Eigenvektor zum höchsten Eigenwert. Damit zwingt man die Iteration in eine Richtung, die orthogonal zu der des höchsten Eigenwerts liegt, und damit läuft die Iteration in Richtung des nächstgrößten Eigenwertes. Indem man bei weiteren Iterationen die Projektionen auf alle vorher erhaltenen Eigenvektoren subtrahiert, kann man alle Eigenwerte und Eigenvektoren berechnen. Praktisch kann man das allerdings nur für einige wenige Eigenvektoren durchführen. Zum einen kosten die vielen Projektionen eine Menge Zeit, und zum andern braucht man zum Speichern aller Eigenvektoren ebensoviel Speicher wie die Matrix belegt hätte, so daß damit der Vorteil der Powermethode verloren ginge.

Konkret sieht dann ein Iterationsschritt für den zweiten bzw. dritten Eigenwert wie folgt aus:

$$\phi' = \frac{T\phi^L}{\|T\phi^L\|}, \quad \phi^{(L+1)} = \phi' - \langle \phi', \phi_0 \rangle \phi_0, \quad (2.9)$$

$$\phi' = \frac{T\phi^L}{\|T\phi^L\|}, \quad \phi^{(L+1)} = \phi' - \langle \phi', \phi_0 \rangle \phi_0 - \langle \phi', \phi_1 \rangle \phi_1. \quad (2.10)$$

Durch das erzwungene Drehen der Iterationsrichtung wird auch die Konvergenz verzögert, und es ist schwierig, einen guten Schätzwert für z.B. den Eigenvektor ϕ_2 zu finden. In Kapitel 3 wird dieses Verfahren benutzt, um den dritten Eigenwert der Transfermatrix mit freien Randbedingungen auszurechnen, weil dort Symmetriereduktionen der Matrix nicht weiterhelfen.

2.4 Endliche-Volumen Korrekturen

In diesem Abschnitt soll die Differenz der freien Energie eines unendlich langen Streifens der Breite N von der freien Energie im thermodynamischen Limes betrachtet werden. DE VEGA und andere beschäftigen sich schon seit längerem mit der analytischen Berechnung der Korrekturen ([dVW84],[dVW90], [DdV95]). In [DdV95] wird die dominierende Korrektur der freien Energie im endlich breiten Streifen für den sogenannten kritischen Bereich des Modells, in dem $K < 1$ ist, durch analytische Rechnung gewonnen. Das Ergebnis dieser Rechnung soll hier zum Vergleich dienen. Reduziert auf den Fall des symmetrischen Sechs-Vertex-Modells mit periodischen Randbedingungen, erhält man für $K < 1$ für die freie Energie

$$f \approx f_\infty - \Delta f_N, \quad \Delta f_N = \frac{\pi}{6N^2}. \quad (2.11)$$

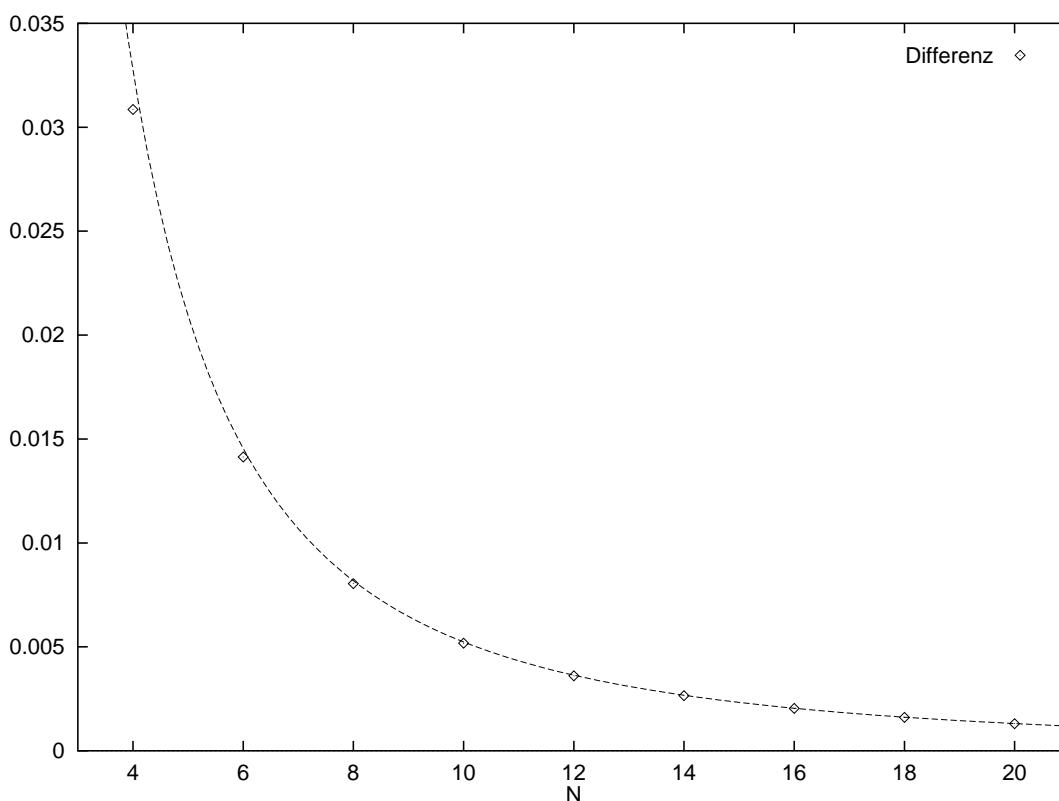


Abbildung 2.7: Die gestrichelte Linie ist die Korrektur von DE VEGA. Die Punkte sind die berechneten Differenzen bei $K = 0.5$.

f_∞ ist die freie Energie im thermodynamischen Limes, und Δf_N bezeichnet die Näherung der Abweichung der freien Energie eines Streifens der Breite N von f_∞ , wie sie in (2.11) angegeben ist. f_N bezeichnet die freie Energie eines $N \times \infty$ großen Gitters.

In Tabelle 2.6 sind die Differenzen $f_\infty - f_N$ für N bis 20, die man aus den Daten aus Abschnitt 2.3 erhält, und dazu die Werte für Δf_N angegeben.

Für $K = 0.5$ ist in Abbildung 2.7 beispielhaft die N -Abhängigkeit der Abweichung dargestellt.

Um die von DE VEGA angegebene $1/N^2$ - Abhängigkeit quantitativ zu vergleichen, wird Gleichung (2.11) logarithmiert

$$\log(\Delta f_N) \propto -2 \log(N) \quad \text{bzw.} \quad \log(f_\infty - f_N) \propto -\alpha \log(N),$$

und anschließend die Steigung berechnet. Man erwartet, daß der Exponent α nahe bei 2 liegt. Die aus den Daten gewonnenen Exponenten sind in Tabelle 2.5 gezeigt. Man sieht, daß für genügend große Gitter diese Erwartung gut erfüllt ist. Für sehr kleine Gitter wird die Abweichung etwas überschätzt.

Um zu sehen, daß der Vorfaktor von Δf_N tatsächlich $\frac{\pi}{6}$ ist, wurde in Abbildung 2.8 $(f_\infty - f_N)N^2$ gegen N aufgetragen. Es ist bemerkenswert, daß diese Beziehung im

N	Exponent
20	-1.993752
18	-1.992231
16	-1.990088
14	-1.986931
12	-1.982019
10	-1.973793
8	-1.958545
6	-1.925687

Tabelle 2.5: Der Exponent α (siehe Text) der Abweichung der freien Energie im endlich breiten Streifen von der freien Energie im thermodynamischen Limes am Beispiel $K = 0.5$.

ganzen Bereich $K < 1$ bis in die Nähe des kritischen Punktes gilt.

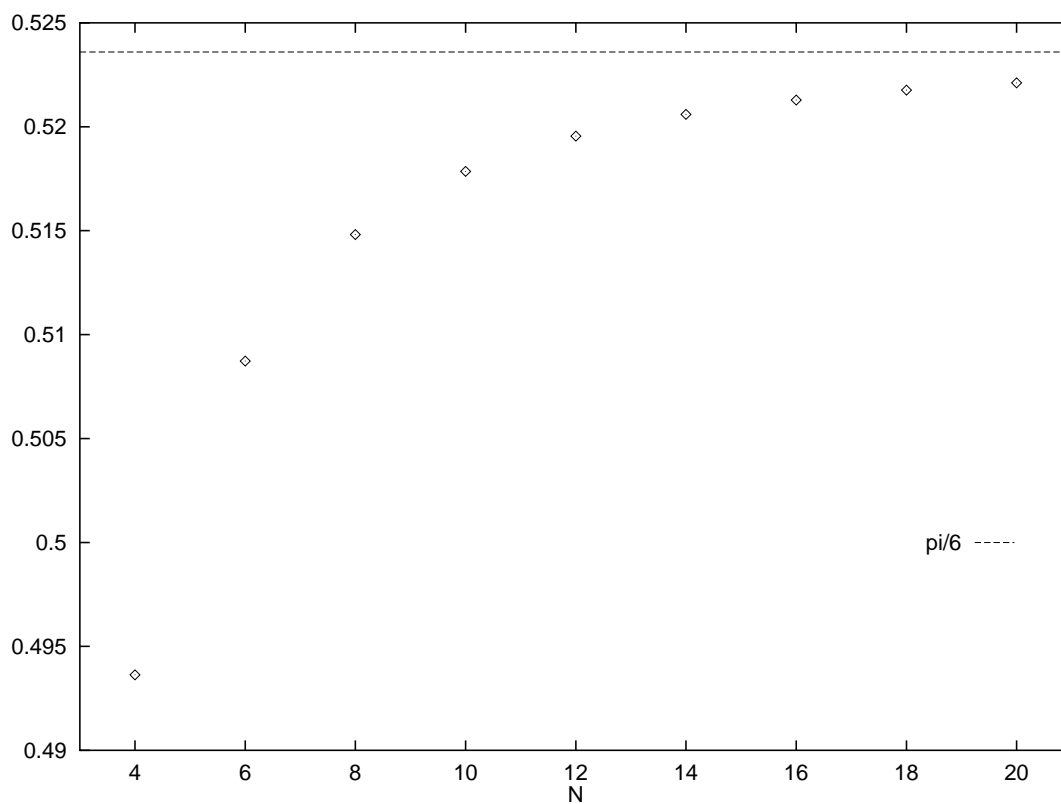


Abbildung 2.8: $(f_\infty - f_N)N^2$ in Abhängigkeit von N bei $K = 0.5$. Der Wert geht mit N gegen $\frac{\pi}{6}$.

	Δf_{20}	Δf_{18}	Δf_{16}	Δf_{14}	Δf_{12}
$K < 1$	0.0013090	0.0016160	0.0020453	0.0026714	0.0036361
K	$f_\infty - f_{20}$	$f_\infty - f_{18}$	$f_\infty - f_{16}$	$f_\infty - f_{14}$	$f_\infty - f_{12}$
0.1	0.0013058	0.0016112	0.0020376	0.0026583	0.0036121
0.2	0.0013056	0.0016108	0.0020370	0.0026573	0.0036103
0.3	0.0013054	0.0016106	0.0020366	0.0026567	0.0036090
0.4	0.0013053	0.0016104	0.0020364	0.0026563	0.0036083
0.5	0.0013053	0.0016104	0.0020363	0.0026561	0.0036080
0.6	0.0013053	0.0016105	0.0020364	0.0026563	0.0036083
0.7	0.0013055	0.0016108	0.0020369	0.0026571	0.0036097
0.8	0.0013062	0.0016117	0.0020383	0.0026593	0.0036136
0.9	0.0013081	0.0016144	0.0020420	0.0026649	0.0036222
1.1	0.0012677	0.0015700	0.0019928	0.0026094	0.0035586
1.2	0.0009195	0.0011873	0.0015687	0.0021343	0.0030182
1.3	0.0004191	0.0005996	0.0008749	0.0013093	0.0020281
1.4	0.0001333	0.0002193	0.0003675	0.0006228	0.0011143
1.5	0.0000348	0.0000666	0.0001301	0.0002293	0.0005347
1.6	0.0000083	0.0000185	0.0000422	0.0000675	0.0002374
1.7	0.0000019	0.0000049	0.0000131	—	0.0001012
1.8	0.0000004	0.0000013	0.0000040	—	0.0000423
1.9	0.0000001	0.0000003	0.0000012	—	0.0000176
2.0	0.0000000	0.0000001	0.0000004	—	0.0000073

	Δf_{10}	Δf_8	Δf_6	Δf_4	Δf_2
$K < 1$	0.0052360	0.0081812	0.0145444	0.0327249	0.1308997
K	$f_\infty - f_{10}$	$f_\infty - f_8$	$f_\infty - f_6$	$f_\infty - f_4$	$f_\infty - f_2$
0.1	0.0051869	0.0080649	0.0141977	0.0312040	-0.1120364
0.2	0.0051832	0.0080556	0.0141672	0.0310342	-0.1406568
0.3	0.0051806	0.0080493	0.0141471	0.0309295	-0.1708900
0.4	0.0051791	0.0080456	0.0141354	0.0308713	-0.2028222
0.5	0.0051785	0.0080442	0.0141313	0.0308518	-0.2365482
0.6	0.0051792	0.0080459	0.0141363	0.0308737	-0.2721748
0.7	0.0051820	0.0080523	0.0141543	0.0309464	-0.3098253
0.8	0.0051891	0.0080672	0.0141919	0.0310747	-0.3496470
0.9	0.0052036	0.0080941	0.0142501	0.0312363	-0.3918256
1.1	0.0051288	0.0080033	0.0141347	0.0310797	-0.4844376
1.2	0.0045011	0.0072504	0.0131826	0.0297488	-0.5360870
1.3	0.0032953	0.0057483	0.0112375	0.0270321	-0.5918661
1.4	0.0020561	0.0040442	0.0088301	0.0234262	-0.6511747
1.5	0.0011457	0.0026046	0.0065185	0.0195595	-0.7131884
1.6	0.0005953	0.0015813	0.0046020	0.0158806	-0.7771915
1.7	0.0002974	0.0009257	0.0031517	0.0126301	-0.8426365
1.8	0.0001455	0.0005306	0.0021161	0.0098947	-0.9091234
1.9	0.0000706	0.0003007	0.0014032	0.0076679	-0.9763642
2.0	0.0000341	0.0001694	0.0009236	0.0058964	-1.0441523

Tabelle 2.6: Die Abweichung der freien Energie des endlich breiten von der des unendlich breiten Gitters, sowie die Korrektur von DE VEGA.

Kapitel 3

Numerische, stochastische Transfermatrix-Methoden

In diesem Kapitel werden einige stochastische Verfahren zur Bestimmung des größten Eigenwerts einer Matrix betrachtet, die alle aus der Powermethode abgeleitet werden. Auf diese Weise besteht die Möglichkeit, die Probleme durch die exponentiell steigende Dimension der Transfermatrix zu lösen. Andererseits entstehen durch die stochastischen Verfahren neue Probleme wie z. B. das Problem der mit der Iteration wachsenden Varianz.

3.1 Naive stochastische Verfahren

Eine reelle Matrix mit nichtnegativen Einträgen wird als stochastisch bezeichnet, wenn $\sum_i A_{ij} = 1$, d. h., die Spalten der Matrix beschreiben normierte Übergangswahrscheinlichkeiten¹; die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs vom Zustand j zum Zustand i ist durch A_{ij} gegeben. Stochastische Matrizen haben einen höchsten Eigenwert $\lambda_0 = 1$ [Sok89].

Die Transfermatrix ist im allgemeinen keine stochastische Matrix, aber jede reelle Matrix mit nichtnegativen Einträgen und positiven Spaltensummen kann in eine stochastische und eine diagonale Matrix zerlegt werden.

$$T = AB, \quad \text{mit} \quad B_{ij} := B_j \delta(i, j), \quad B_j := \sum_k T_{kj} \quad \text{und} \quad A_{ij} := T_{ij}/B_j. \quad (3.1)$$

¹In den meisten mathematischen Texten über Wahrscheinlichkeitstheorie und Markovprozesse werden die Zeilen der Matrix normiert. Die in physikalischen Texten verwendete Normierung erscheint jedoch natürlicher. Sie entspricht einer Anwendung der Matrix von links auf einen Spaltenvektor.

Iteriert man eine stochastische Matrix,

$$\pi_i = \sum_{j,\dots,k,l} A_{ij} \dots A_{kl} A_{lm},$$

so wird nach hinreichend langer Iteration die Wahrscheinlichkeit für den Zustand i , π_i , unabhängig vom Startzustand m zu einer stationären Verteilung [Sok89].

Betrachtet man als stochastischen Prozeß

$$\dots \xrightarrow{A} i_0 \xrightarrow{A} i_1 \xrightarrow{A} i_2 \dots \xrightarrow{A} i_t \xrightarrow{A} i_{t+1} \dots, \quad (3.2)$$

kann man folgenden Schätzwert für den höchsten Eigenwert der Matrix T angeben:

$$\lambda_0^{(L+1)} = \frac{\left\langle \prod_{t=t_0}^{t_0+L+1} B_{i_t} \right\rangle}{\left\langle \prod_{t=t_0}^{t_0+L} B_{i_t} \right\rangle}. \quad (3.3)$$

Dabei bezeichnet $\langle \cdot \rangle$ den Erwartungswert im oben dargestellten stochastischen Prozeß. Prinzipiell ist die Bildung dieses Erwartungswertes nicht erforderlich, eine Iteration der Länge L würde genügen. Warum diese Form des Mitteln zweckmäßig ist, wird unten an einem Beispiel (3.5) erläutert.

Zur Begründung von (3.3) betrachtet man

$$\begin{aligned} \left\langle \prod_{t=t_0}^{t_0+L+1} B_{i_t} \right\rangle &= \sum_{i_0, \dots, i_L} B_{i_L} \underbrace{A_{i_L i_{L-1}} B_{i_{L-1}} \dots A_{i_2 i_1} B_{i_1}}_{=T_{i_L i_{L-1}}} \underbrace{A_{i_1 i_0} B_{i_0}}_{=T_{i_1 i_0}} \pi_{i_0} \\ &= \sum_{i_L} B_{i_L} (T^L \pi)_{i_L} = \langle B, T^L \pi \rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Damit hat man

$$\lambda^{(L+1)} = \frac{\langle B, T^{L+1} \pi \rangle}{\langle B, T^L \pi \rangle}.$$

Dies entspricht der Situation, für die in Abschnitt 2.3 die Konvergenz mittels Gleichung (2.8) abgeschätzt wurde.

Dadurch, daß die Matrix nicht stochastisch ist, entsteht das Problem, daß die Varianz der Komponenten des iterierten Vektors und des Schätzwertes des Eigenwerts mit der Zahl der Iterationen L exponentiell wächst. An einem übersichtlichen Beispiel soll veranschaulicht werden, was geschieht.

Für eine Matrix der Dimension 2 kann der Ausdruck $T^L \pi$ sowohl durch Simulation des entsprechenden stochastischen Prozesses als auch durch deterministische Durchführung der Matrixmultiplikation leicht berechnet werden. Außerdem kann man die Fehler im stochastischen Prozeß auswerten und mit den im deterministischen Prozeß berechneten Fehlern vergleichen. Allgemein gilt für eine Zufallsgröße

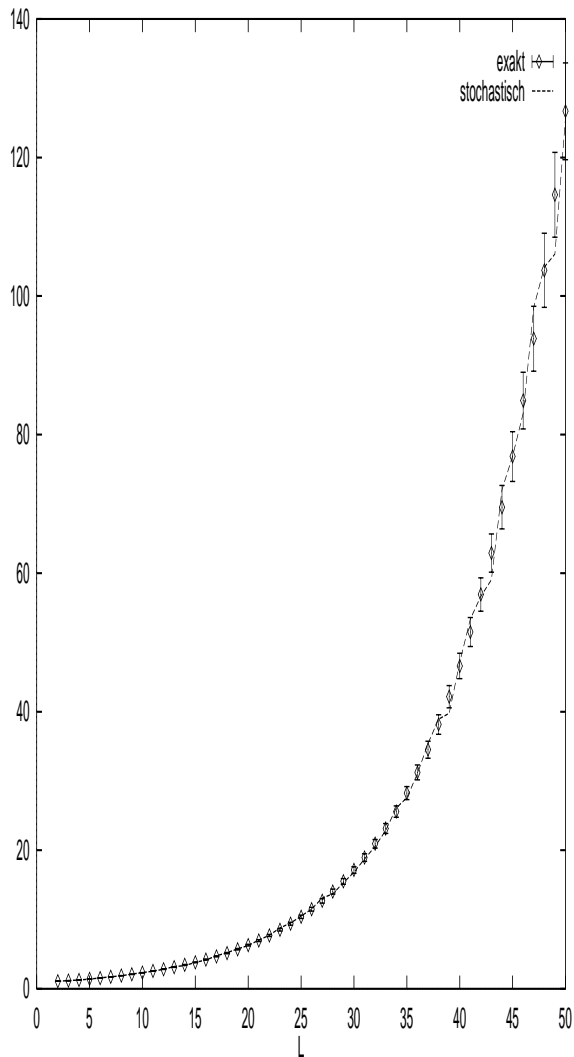


Abbildung 3.1: Die erste Komponente des Vektors $T^L \pi$ in Abhängigkeit von der Anzahl der Iterationen L .

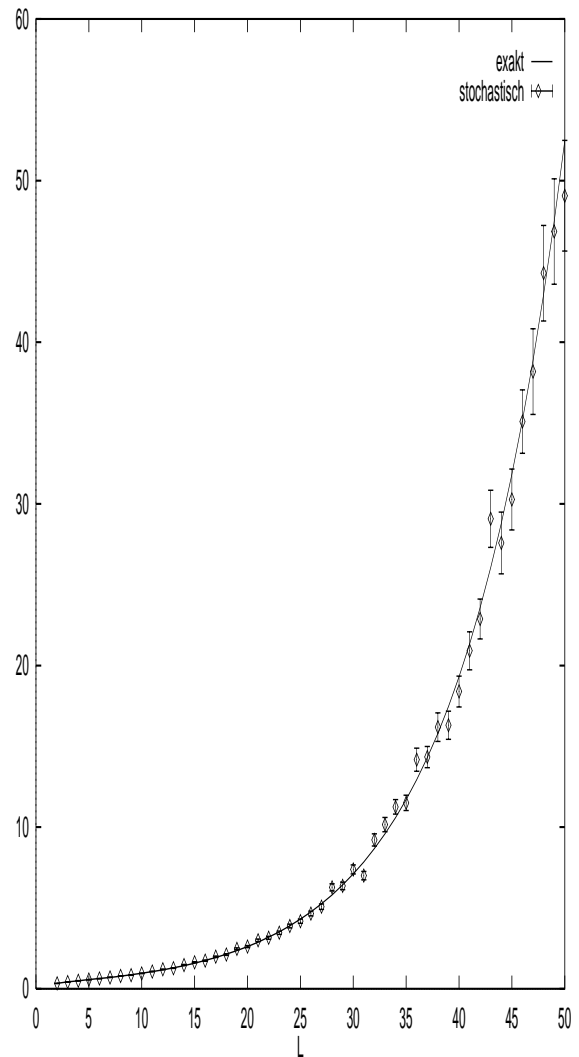


Abbildung 3.2: Die zweite Komponente von $T^L \pi$ in Abhängigkeit von L . Die Erklärung zu beiden Abbildungen befindet sich im Text.

X : $\text{Var } X = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$. Deshalb genügt es, denselben deterministischen Prozeß auf eine Matrix $\hat{T}_{ij} := A_{ij} B_i^2$ anzuwenden, um den Erwartungswert des Quadrats zu erhalten. Damit kann dann die Varianz deterministisch berechnet werden.

Das Beispiel stammt aus [Het84]:

$$T = \begin{pmatrix} \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{6}{4}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{4}{6}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{24}} \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

mit den Eigenwerten $\lambda_0 = 1.10517$ und $\lambda_1 = 0.52782$.

Die beiden Komponenten des Vektors $T^L \pi$ sind in Abbildung 3.1 bzw. 3.2 in Abhängigkeit von der Anzahl der Iterationen L gezeigt. Im ersten Bild sind die Fehlerbalken an den deterministisch berechneten Werten eingezeichnet; die Größe der Fehler ist aus der deterministischen Varianz berechnet. Die gestrichelte Linie ist die stochastische Iteration. Im zweiten Bild sind die stochastischen Fehler an den stochastisch erhaltenen Werten eingezeichnet, während die durchgezogene Linie die deterministische Iteration darstellt. Man sieht, daß die deterministisch berechneten Fehler den Prozeß richtig beschreiben und daß das Problem der mit L wachsenden Varianz deutlich zu Tage tritt.

Die Ursache dafür ist, daß die iterierte Matrix nicht stochastisch ist. Die durch den stochastischen Anteil der Matrix beschriebene Wahrscheinlichkeitsverteilung ist unabhängig von der Größe der B_j , d.h. die Wahrscheinlichkeit, mit der die Zustände im Verlaufe des stochastischen Prozesses aufgesucht werden, entspricht nicht der der Größe der B_j angemessenen Wichtigkeit. Damit ist der wahrscheinlichste Zustand entfernt vom Zustand, der dem Mittel am nächsten läge, und die Varianz ist das Maß für diese Abweichung.

Wie sich dies auf die Bestimmung des Eigenwerts auswirkt, sieht man in Abbildung 3.3. Bis etwa $L = 15$ konvergiert das Verfahren wie die exakte Powermethode gegen den wahren Wert von λ_0 . Ab etwa $L = 20$ wachsen die Fehler stark an, so daß das Ergebnis wieder erheblich ungenauer wird. Die statistischen Fehler werden durch Wiederholung des Experiments gewonnen. Hat man nach N -maliger Durchführung des stochastischen Prozesses die Werte x_1, \dots, x_n erhalten, so hat man mit $\langle X \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{N}$ für die Fehler

$$\text{Fehler}(X) = \sqrt{\frac{\text{Var}(X)}{N}}, \quad \text{mit} \quad \text{Var}(X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\langle X \rangle - x_i)^2 \quad (3.6)$$

Gleichung (3.3) mit einem L , das in dem Sinne optimal ist, daß die Konvergenz soweit als möglich fortgeschritten ist, ohne daß die Fehler schon wesentlich angewachsen sind, ist also der beste Schätzwert für λ_0 . Im Einzelfall kann das L schwierig zu ermitteln sein.

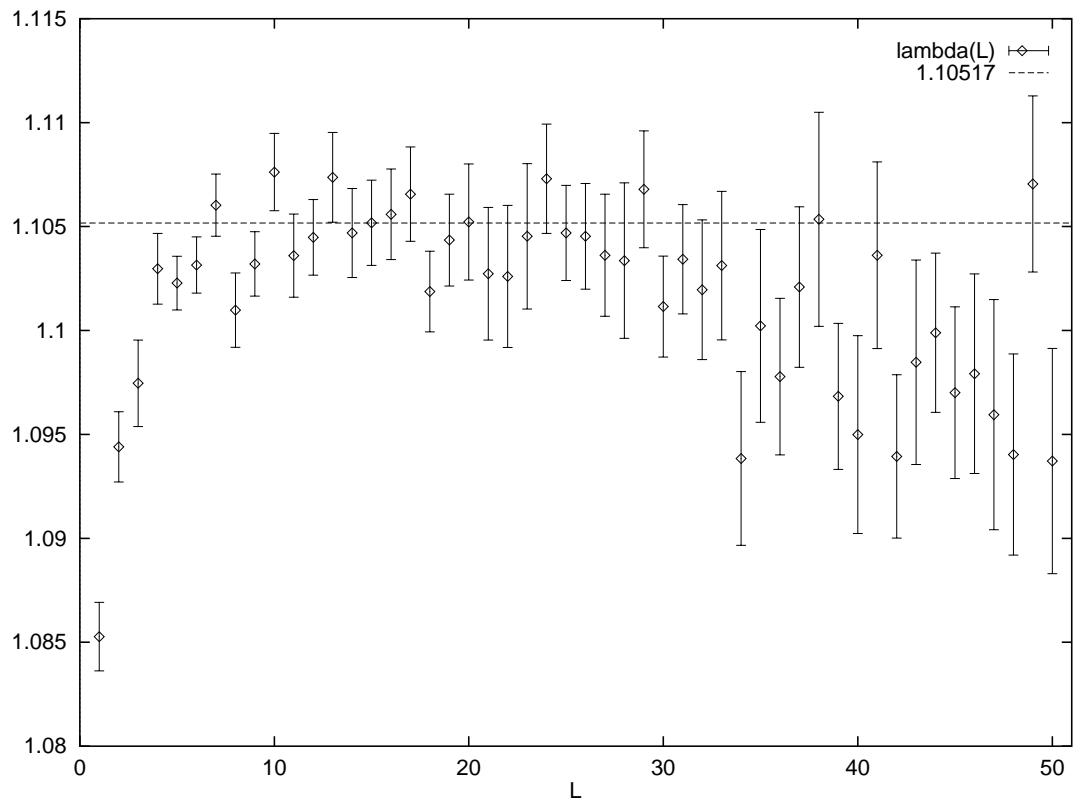


Abbildung 3.3: Stochastische Iteration der Beispielmatrix nach Gleichung (3.3). Zu jedem Wert von L wurde 20 mal der stochastische Prozess (3.2) durchgeführt, um die statistischen Fehler zu erhalten. Jeder dieser Läufe bestand aus 2000 Iterationen. Deshalb sind die gezeigten Werte statistisch unabhängig. Bei dem in [Het84] gezeigten Bild sind die Ergebnisse für die verschiedenen Werte von L aus denselben statistischen Prozessen gewonnen und daher stark korreliert. Die gestrichelte Linie stellt den exakten Eigenwert dar.

3.2 Stochastisches Verfahren mit mehreren Konfigurationen

Das Varianzproblem und seine Ursachen führt zu der Idee, mehrere Zustände simultan im stochastischen Prozeß zu iterieren. Damit wäre an sich noch nichts gewonnen, aber wenn man die Zustände nach jedem Iterationsschritt in geeigneter Weise untereinander „wechselwirken“ läßt, also eine sogenannte Rekonfiguration durchführt, kann man die Varianz erheblich verringern. Dazu muß die Rekonfiguration offenbar solche Zustände bevorzugen, deren B_i relativ am größten sind. HETHERINGTON gibt in [Het84] eine solche Rekonfigurationswahrscheinlichkeit an. Diese Rekonfiguration wird zwischen je zwei stochastischen Iterationsschritten durchgeführt.

Statt des einen Zustandes i_t der im stochastischen Prozeß iteriert wird, wird der Prozeß nun für ein Ensemble

$$Z_t = \{(s_1, \omega_1), (s_2, \omega_2), \dots, (s_m, \omega_m)\}_t$$

von m sogenannten Läufern durchgeführt. Ein Läufer ist ein Paar $(s_i, \omega_i)_t$. Dabei bezeichnet $s_i \in \{1, \dots, \dim(T)\}$ eine Numerierung der Zustände in der Menge der Konfigurationen K entsprechend der Numerierung der Transfermatrix. $\omega_i \in \mathbb{R}$ ist das sogenannte Gewicht des Läufers, das in dem Verfahren von HETHERINGTON einfach die zu dem Zustand s_i gehörige Spaltensumme ist, also $\omega : K \rightarrow \mathbb{R} : \omega_i := B_i$. Außerdem bezeichnet man mit

$$W_t := W(Z_t) := \sum_{i=1}^m (\omega_i)_t$$

die Summe der Läufergewichte zum t -ten Iterationsschritt und definiert einen „Abzähloperator“ $n(i, Z)$, der angibt, wieviele Läufer des Ensembles Z sich im Zustand i befinden.

$$n(i, Z) := \delta(i, s_1) + \delta(i, s_2) + \dots + \delta(i, s_m)$$

Die Rekonfigurationswahrscheinlichkeit, d.h. die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Ensemble Z zu einem Ensemble Z' , ist eine Produktwahrscheinlichkeit:

$$P(Z', Z) := \prod_{i=1}^m p(s'_i, Z), \quad \text{mit} \quad p(s'_i) := \frac{\omega'_i}{W(Z)} n(s'_i, Z). \quad (3.7)$$

Die Produktwahrscheinlichkeit ist als Produkt von normierten Wahrscheinlichkeiten ebenfalls normiert, denn

$$\sum_{i=1}^m p(s'_i) = \sum_{i=1}^m \frac{\omega'_i}{\sum_{j=1}^m \omega_j} \sum_{k=1}^m \delta(s'_i, s_k) = \frac{1}{\sum_{j=1}^m \omega_j} \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^m \omega'_i \delta(s'_i, s_k) = 1.$$

Ein Iterationsschritt, der aus stochastischer Iteration und Rekonfiguration besteht, kann nun im Produktraum K^m wieder als Eigenwertgleichung formuliert werden. Dazu definiert man die stochastische Matrix im Produktraum als $\hat{A}(Z, Z') :=$

$\prod_{i=1}^m A(s_i, s'_i)$. Dann erhält man für $\Psi \in K^m$

$$\hat{A}P\hat{B}\Psi = \lambda\Psi, \quad (3.8)$$

mit $\hat{B}(Z, Z') := \frac{1}{m}W(Z)\delta(Z, Z')$. Es soll nun gezeigt werden, daß ein Eigenwert von (3.8) auch einer der Eigenwertgleichung (2.1) ist. Dazu werden zwei Beziehungen benötigt.

1. Für alle $i \in \{1, \dots, \dim(T)\}$ und alle $Z \in L^m$ gilt

$$\sum_{Z'} n(i, Z')P(Z', Z) = \frac{m \omega(i)}{W(Z)}n(i, Z), \quad (3.9)$$

denn:

$$\begin{aligned} & \sum_{s'_1, \dots, s'_m} [\delta(i, s'_1) + \dots + \delta(i, s'_m)] \prod_{k=1}^m \frac{\omega(s'_k)}{W(Z)} n(s'_k, Z) = \\ &= \sum_{s'_1} \delta(i, s'_1) \sum_{s'_2, \dots, s'_m} \prod_{k=1}^m \frac{\omega(s'_k)}{W(Z)} n(s'_k, Z) + (\text{dieselbe Summe für } s'_2, \dots, s'_m) \\ &= m \sum_{s'_1, \dots, s'_m} \delta(i, s'_1) \frac{\omega(s'_1)}{W(Z)} [\delta(s'_1, s_1) + \dots + \delta(s'_1, s_m)] \cdot \\ & \quad \prod_{k=2}^m \frac{\omega(s'_k)}{W(Z)} [\delta(s'_k, s_1) + \dots + \delta(s'_k, s_m)] \\ &= m \frac{\omega(i)}{W(Z)} n(i, Z) \sum_{s'_2, \dots, s'_m} \prod_{k=2}^m \frac{\omega(s'_k)}{W(Z)} [\delta(s'_k, s_1) + \dots + \delta(s'_k, s_m)] \\ &= m \frac{\omega(i)}{W(Z)} n(i, Z) \underbrace{\sum_{s'_2} \frac{\omega(s'_2)}{W(Z)} [\delta(s'_2, s_1) + \dots + \delta(s'_2, s_m)]}_{=1} \underbrace{\sum_{s'_3} \frac{\omega(s'_3)}{W(Z)} \dots \sum_{s'_m}}_{=1} \dots \\ &= m \frac{\omega(i)}{W(Z)} n(i, Z). \end{aligned} \quad (3.10)$$

2. Für alle $i \in \{1, \dots, \dim(T)\}$ und alle $Z \in L^m$ gilt

$$\sum_{Z'} n(i, Z')\hat{A}(Z', Z) = \sum_j A(i, j)n(j, Z), \quad (3.11)$$

denn:

$$\begin{aligned} & \sum_{s'_1, \dots, s'_m} [\delta(i, s'_1) + \dots + \delta(i, s'_m)] A(s'_1, s_1) \dots A(s'_m, s_m) \\ &= \underbrace{\sum_{s'_1} \delta(i, s'_1) A(s'_1, s_1)}_{A(i, s_1)} \underbrace{\sum_{s'_2} A(s'_2, s_2)}_{=1, \text{ weil } A \text{ stochastisch}} \dots \underbrace{\sum_{s'_m} A(s'_m, s_m)}_{=1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \text{dieselben Terme mit } A(s'_2, s_2), \dots, A(s'_m, s_m) \\
& = A(i, s_1) + \dots + A(i, s_m).
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Für die rechte Seite von (3.11) gilt:

$$\sum_j A(i, j) [\delta(j, s_1) + \dots + \delta(j, s_m)] = A(i, s_1) + \dots + A(i, s_m).$$

Damit ist (3.11) gezeigt.

Definiert man für den Eigenvektor $\phi \in K$: $\phi_i := \sum_Z n(i, Z)\Psi(Z)$ und multipliziert man nun $n(i, Z)$ von links mit Gleichung (3.8), so erhält man für die linke Seite

$$\begin{aligned}
& \sum_Z \sum_{Z'} n(i, Z') \hat{A}(Z', Z) (P \hat{B} \Psi)_Z \\
& \stackrel{(3.11)}{=} \sum_Z \sum_{Z'} \sum_j A(i, j) n(j, Z') P(Z', Z) (\hat{B} \Psi)_Z \\
& \stackrel{(3.9)}{=} \sum_j A(i, j) m \frac{\omega(j)}{W(Z)} n(j, Z) \frac{W(Z)}{m} \Psi_Z = \sum_j A(i, j) \omega(j) \phi_j \\
& = AB\phi.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Auf der rechten Seite hat man

$$\lambda \sum_Z n(i, Z) \Psi_Z = \lambda \phi_i.$$

Damit erhält man insgesamt

$$AB\phi = \lambda \phi.$$

Mittels $n(i, Z)$ kann der stochastische Prozeß (mit Rekonfiguration) im Produktraum zurückgeführt werden auf den ursprünglichen Prozeß im Konfigurationsraum. Durch den zusätzlichen Rekonfigurationsschritt werden Zustände mit großem Gewicht B_i bevorzugt aufgesucht. Dadurch die Varianz reduziert.

Implementierung

Die obige Methode soll an einer kleinen Transfermatrix beispielhaft angewendet werden. Dabei werden die Wahrscheinlichkeiten durch entsprechende Teilung des Intervalls $[0, 1[$ simuliert. Das heißt, daß wenn die normierten Wahrscheinlichkeiten $p_i, i \in \{1, \dots, n\}$, $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ simuliert werden sollen, das Intervall $[0, 1[$ in n Intervalle geteilt wird: $I_1 = [0, p_1[$, $I_2 = [p_1, p_1 + p_2[$, \dots , $I_n = [1 - p_n, 1[$. Eine Pseudozufallszahl aus $[0, 1[$ wird gezogen und festgestellt, in welches Intervall sie fällt. Mit

der Wahrscheinlichkeit p_i liegt die Zufallszahl im Intervall I_i , so daß ein i mit den gegebenen Wahrscheinlichkeiten bestimmt werden kann.

Auch die Rekonfigurationswahrscheinlichkeit (3.7) kann so simuliert werden. Es genügt, das Intervall $[0, 1[$ entsprechend den $\frac{\omega_i}{W(Z)}$, $i \in \{1, \dots, m\}$, zu teilen und m Zufallszahlen zu ziehen. Die Faktoren $n(i, Z)$ sind dann durch die Vielfachheit, mit der ein Intervall zu einem bestimmten Zustand vorkommt, bereits berücksichtigt.

Der Schätzwert für λ wird in Verallgemeinerung von (3.3) durch

$$\lambda^{(L+1)} = \frac{\left\langle \prod_{t=t_0}^{t_0+L+1} \frac{1}{m} W_t \right\rangle}{\left\langle \prod_{t=t_0}^{t_0+L} \frac{1}{m} W_t \right\rangle} \quad (3.14)$$

berechnet.

Das Ergebnis einer solchen Rechnung für eine Transfermatrix der Dimension 20 ist in Abbildung 3.4 im Vergleich mit der naiven Variante gezeigt. Die Rechnung der naiven Methode mit 10-facher Statistik hat etwa denselben Rechenzeitbedarf wie die Iteration mit 10 Läufern. Man sieht, daß die Reduktion der Varianz erheblich ist, grob geschätzt sind die Fehler um einen Faktor 5 geringer.

3.3 Stochastisches Verfahren mit variabler Läuferzahl

Dieses Verfahren ist in der Literatur unter dem Namen Transfermatrix-Monte-Carlo bekannt. Eine Beschreibung des Algorithmus findet sich in [Nig90] und [NB96].

Der Ausgangspunkt für dieses Verfahren ist wieder ein stochastischer Prozeß, der auf Gleichung (2.7) beruht.

$$\lambda^{(L+1)} = \frac{\langle \rho, T^{L+1} \Phi \rangle}{\langle \rho, T^L \Phi \rangle} \quad (3.15)$$

Die Idee ist nun, statt des ganzen Vektors Φ nur einige Komponenten des Vektors Φ stochastisch so zu iterieren, daß die wesentlichen Komponenten dabei berücksichtigt werden. Wie in Abschnitt 3.2 wird die Iteration mit einem Ensemble von Läufern durchgeführt.

$$Z_t = \{(s_1, \omega_1), (s_1, \omega_1), \dots, (s_{m_t}, \omega_{m_t})\}_t.$$

m_t ist hier allerdings nicht fest gewählt, sondern kann in jedem Schritt variieren. Im Gegensatz zu dem Verfahren mit fester Läuferzahl sind die ω nicht die zu dem jeweiligen Zustand gehörigen Spaltensummen, sondern sie repräsentieren die Komponenten des Vektors Φ . Der dünn besetzte Vektor mit den Komponenten, die iteriert

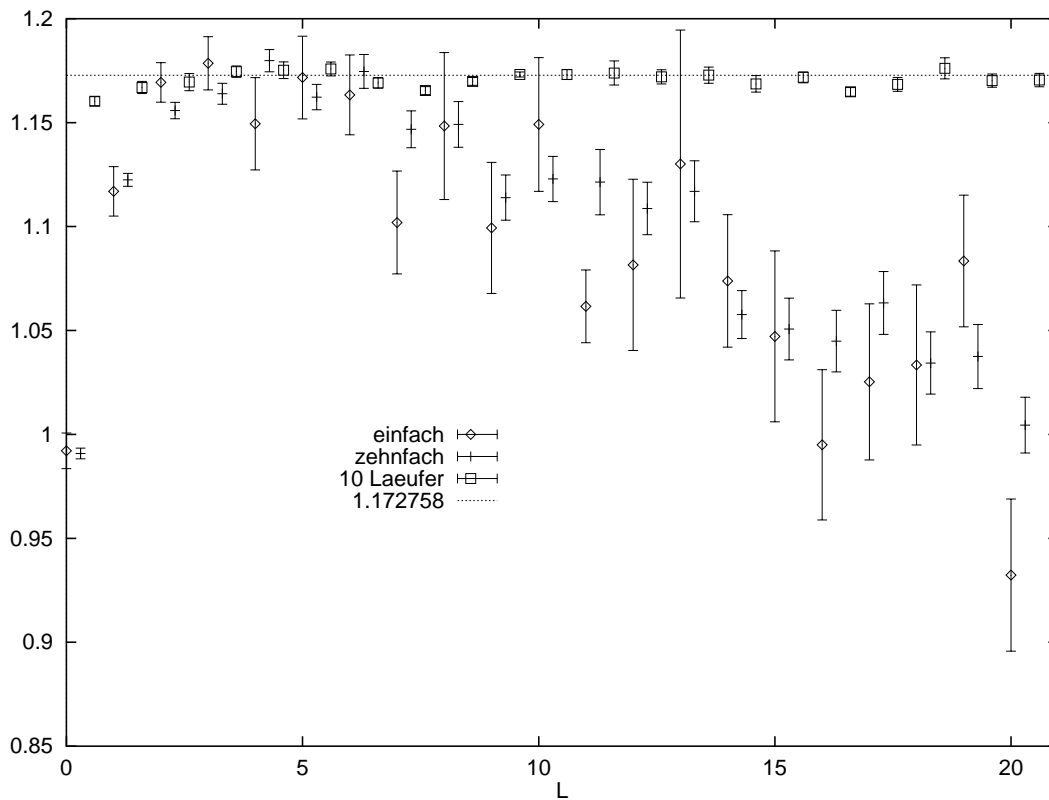


Abbildung 3.4: Als Beispiel dient der zentrale Block der Transfermatrix mit $N = 6$, $n = 3$, also Dimension 20, und $K = 1.5$. Die gestrichelte Linie ist der exakte größte Eigenwert. Zur besseren Übersicht sind die verschiedenen Daten leicht verschoben gezeichnet. Die mit „einfach“ bezeichneten Daten entsprechen 10 mal 1000 Iterationen, wie in Abschnitt 3.1 beschrieben. Dasselbe Verfahren mit 100 mal 1000 Iterationen ist mit „zehnfach“ bezeichnet. Als drittes sind die Ergebnisse von 10 mal 1000 Iterationen mit 10 Läufern gezeigt.

werden, soll mit $\bar{\Phi}$ bezeichnet werden. Zu jedem Iterationsschritt t des Prozesses erhält man ihn durch

$$\bar{\Phi}_j^{(t)} = \sum_{i=1}^{m_t} (\omega_i)_t \delta(j, (s_i)_t).$$

Die Iteration muß so durchgeführt werden, daß

$$\langle c_{t+1} \bar{\Phi}^{(t+1)} \rangle = T \bar{\Phi}^{(t)}, \quad (3.16)$$

also die Eigenwertgleichung für T , für den Erwartungswert auf der linken Seite gilt. Daraus folgt bei L -facher Iteration

$$\left\langle \prod_{i=1}^L c_{t+i} \bar{\Phi}^{(t+L)} \right\rangle = T^L \bar{\Phi}^{(t)}.$$

Setzt man dies in (3.15) ein, erhält man für den Schätzwert von λ

$$\lambda^{(L+1)} = \frac{\sum_t \prod_{i=1}^{L+1} c_{t+i} \langle \rho, \bar{\Phi}^{(t+L+1)} \rangle}{\sum_t \prod_{i=1}^L c_{t+i} \langle \rho, \bar{\Phi}^{(t+L)} \rangle}.$$

Um den Ausdruck auch während der Iteration zum Zeitpunkt t auswerten zu können, substituiert man $t' := t + L + 1$

$$\lambda^{(L+1)} = \frac{\sum_{t'} \prod_{i=0}^L c_{t'-i} \langle \rho, \bar{\Phi}^{(t')} \rangle}{\sum_{t'} \prod_{i=1}^L c_{t'-i} \langle \rho, \bar{\Phi}^{(t'-1)} \rangle} \quad (3.17)$$

und läßt im folgenden die Striche wieder fort. Wählt man ρ so, daß $\langle \rho, \varphi_s \rangle = 1$ für alle Basisvektoren φ_s der Konfigurationsbasis, so hat man

$$\langle \rho, \bar{\Phi}^{(t)} \rangle = \sum_{i=1}^{m_t} (\omega_i)_t = W_t.$$

Setzt man dies in (3.17) ein, erhält man den Ausdruck für den Schätzwert von λ , der in der konkreten Implementierung benutzt wird.

$$\lambda^{(L+1)} = \frac{\sum_{t=t_0}^{t_{max}} \prod_{i=0}^L c_{t-i} W_t}{\sum_{t=t_0}^{t_{max}} \prod_{i=1}^L c_{t-i} W_{t-1}} \quad (3.18)$$

Entscheidend für dieses Verfahren ist, daß der Algorithmus garantiert, daß der Erwartungswert (3.16) respektiert wird. Deshalb wird der Algorithmus im folgenden genau beschrieben.

Beschreibung des Algorithmus

Zu jedem Iterationsschritt t , ($t = 1, \dots, t_{max}$), werden zwei Größen notiert.

1. Die Summe der Läufergewichte.

$$W_t := \sum_{i=1}^{m_t} (\omega_i)_t$$

2. Eine Zahl $c_t \in \mathbb{R}$, mit der die Anzahl der Läufer kontrolliert wird.

$$c_t := \hat{\lambda} \left(\frac{m_{t-1}}{m_0} \right)^{1/\sigma}$$

m_0 ist die vorgegebene Sollzahl der Läufer, $\hat{\lambda}$ ist ein laufender Schätzer für den größten Eigenwert λ (siehe unten). $\sigma \geq 1$ ist ein Maß dafür, wie schnell das Erreichen der Sollzahl der Läufer erzwungen wird. $\sigma = 1$ bedeutet ein schnelles Erreichen der Sollzahl, siehe unten.

Iteration Der Übergang von $Z_t \longrightarrow Z_{t+1}$ verläuft über einen Zwischenschritt. Dabei wird ein temporäres Ensemble konstruiert, das mit gestrichenen Größen bezeichnet wird.

1. Zunächst wird das Ensemble Z'_t konstruiert. Für jeden Läufer aus Z_t wird entsprechend der Wahrscheinlichkeit $A_{s'_i, s_i}$ ein neuer Zustand s'_i ausgewählt. Zusammen mit dem Gewicht $\omega'_i = \omega_i B_{s_i} / c_{t+1}$ bildet er den Läufer (s'_i, ω'_i) .
2. Das Läuferensemble Z'_t wird nun sequentiell durchmustert und nach folgenden Regeln zu dem Ensemble Z_{t+1} zusammengesetzt.
 - (a) Alle Läufer, für deren Gewicht $b_l \leq \omega'_i \leq b_u$ gilt, werden Mitglieder von Z_{t+1} .
 - (b) Je zwei Läufer j, k , deren beider Gewicht $\omega' < b_l$ ist, werden in der Reihenfolge ihres Auftretens zu einem Läufer l zusammengefaßt. Dieser erhält das Gewicht $\omega_l = \omega'_j + \omega'_k$, und der Zustand wird mit den relativen Wahrscheinlichkeiten ω_j und ω_k aus den beiden Möglichkeiten s_j und s_k ausgewählt. Dabei kann ein Läufer mit $\omega_j < b_l$ übrig bleiben. Er wird ebenfalls Bestandteil von Z_{t+1} .
 - (c) Alle Läufer j mit $\omega'_j > b_u$ werden in zwei Läufer geteilt, die denselben Zustand s_j und je die Hälfte des Gewichts ω'_j erhalten.

BLÖTE und NIGHTINGALE empfehlen für die Wahl der Schranken $b_l = \frac{1}{2}$ und $b_u = 2$. Damit werden die Gewichte der Läufer im Mittel etwa bei 1 gehalten, so daß ungefähr $c_t = \hat{\lambda}$ ist, wenn keine Läuferchwankungen vorhanden

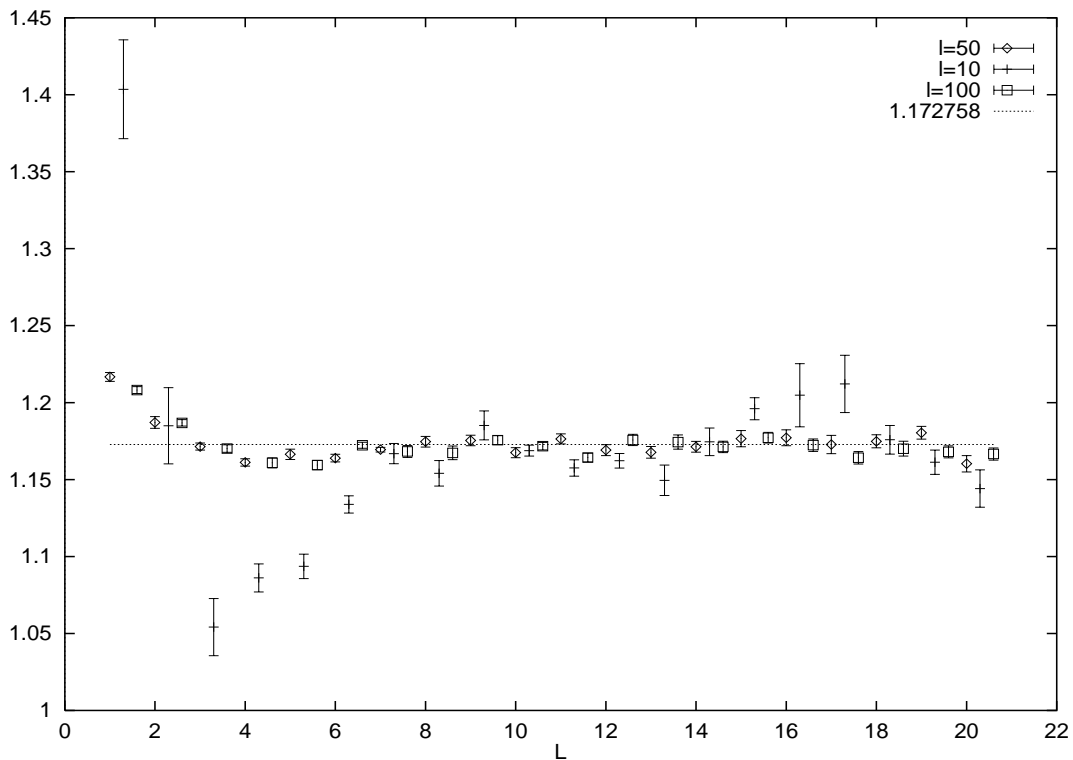


Abbildung 3.5: Der Einfluß der Anzahl der Iterationen, über die gemittelt wird, um den laufenden Schätzwert $\hat{\lambda}$ zu berechnen, ist deutlich sichtbar.

sind. Entspricht die Anzahl der Läufer nicht der Sollzahl, so wird mittels der Definition von c_t dem Ensemble insgesamt Gewicht zugeführt bzw. abgezogen. Durch die Wahl $\sigma > 1$ kann dieser Vorgang verzögert und auf mehrere Iterationsschritte verteilt werden.

Der laufende Schätzwert $\hat{\lambda}$ wird aus den notierten Größen gewonnen.

$$\hat{\lambda}_t = \frac{\sum_{i=t-l}^t \prod_{j=0}^p c_{i-j} W_i}{\sum_{i=t-l}^t \prod_{j=1}^p c_{i-j} W_{i-1}}$$

Dabei ist l die Anzahl der Iterationen, über die das Mittel durchgeführt wird, und p entspricht der optimalen Anzahl der Iterationen L , wie am Ende von Abschnitt 3.1 diskutiert wurde.

Das Resultat für λ erhält man dann nach Gleichung (3.18), wobei die ersten t_0 Iterationen nicht berücksichtigt werden.

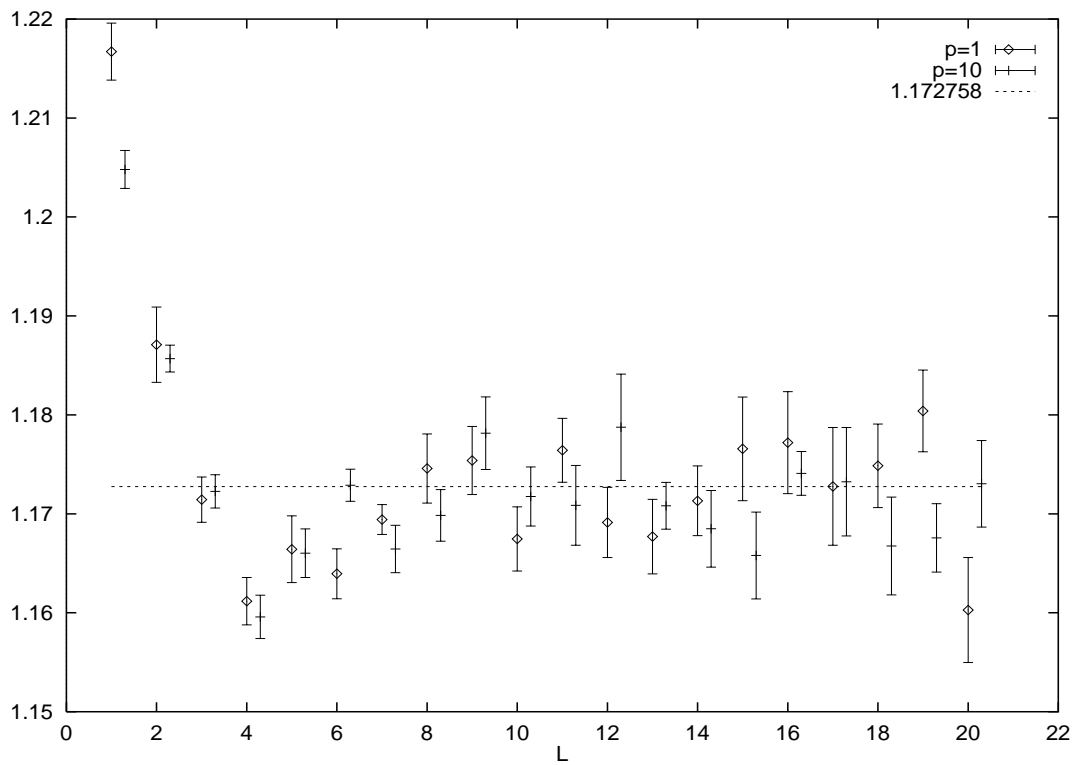


Abbildung 3.6: Die Wahl eines größeren p für die Berechnung von $\hat{\lambda}$ hat wenig Auswirkung auf das Ergebnis.

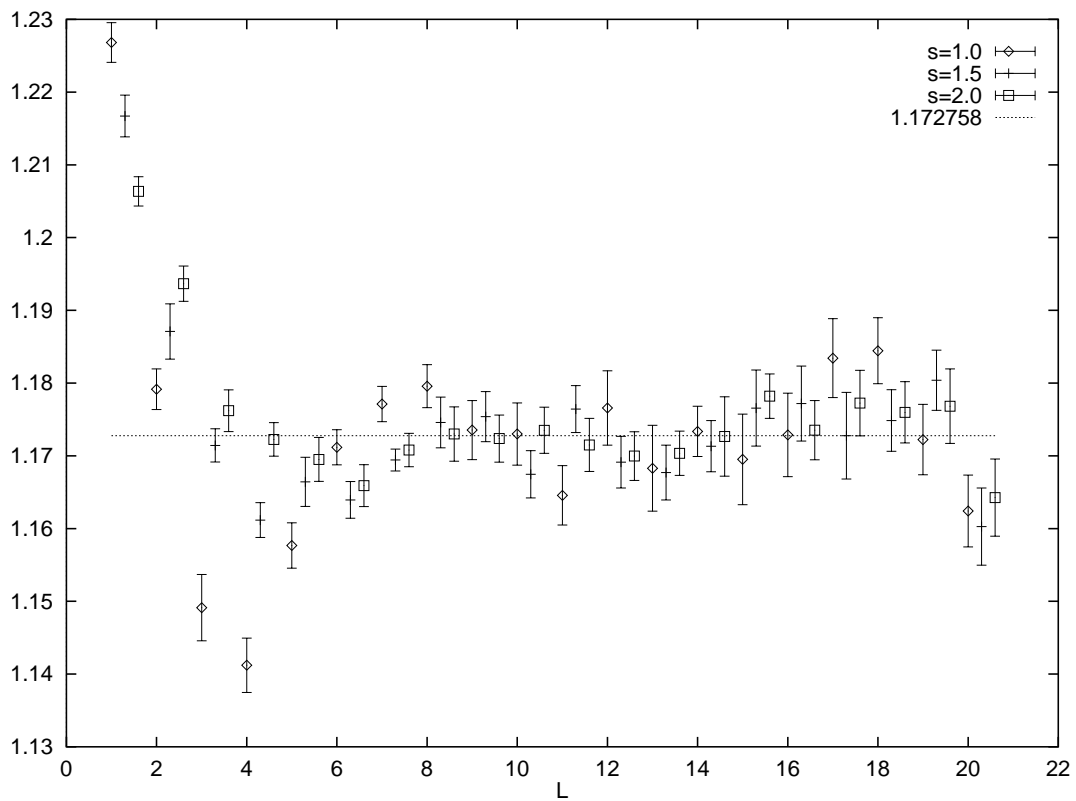


Abbildung 3.7: Der Wert von σ ist von Bedeutung für die Größe der Fehler.

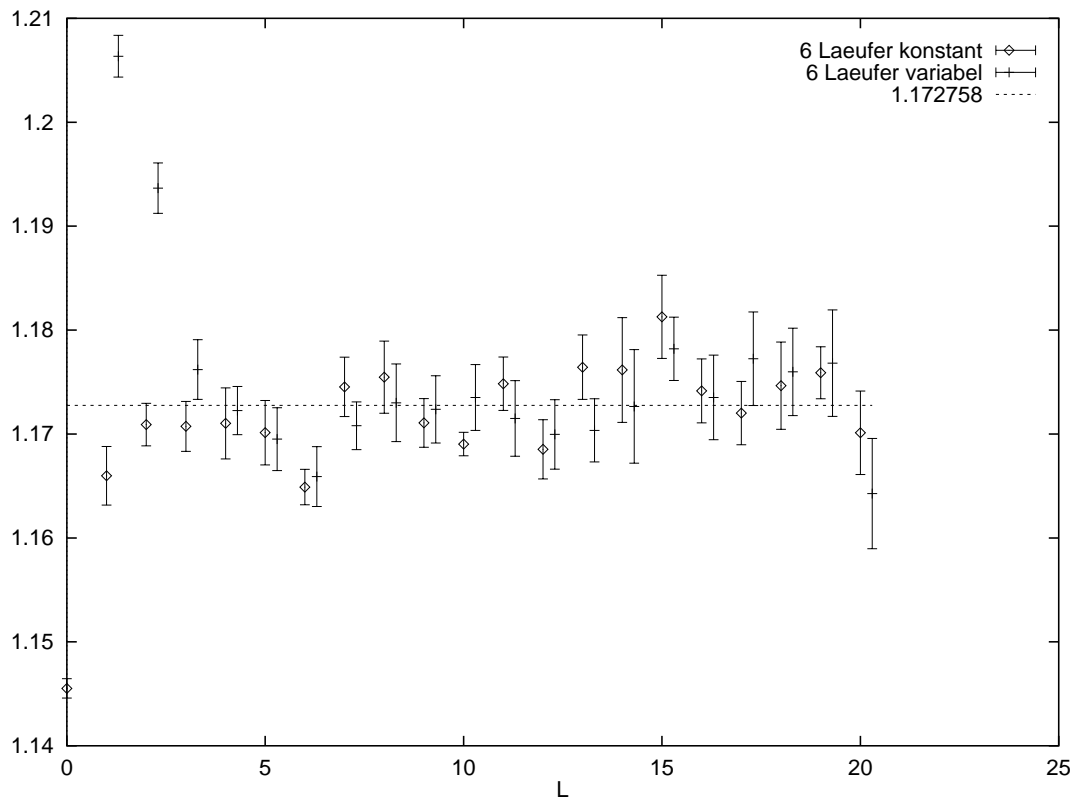


Abbildung 3.8: Vergleich mit dem Verfahren mit fester Läuferzahl.

Implementierung

Entsprechend der Beschreibung wurde das Verfahren implementiert und für das Beispiel einer kleinen Transfermatrix, das auch beim vorigen Verfahren verwendet wurde, getestet. Problematisch dabei ist der Beginn der Iteration. Der erste Wert von $\hat{\lambda}$ muß einigermaßen genau vorgegeben werden, sonst treten zu Beginn erhebliche Fluktuationen in der Läuferanzahl auf.

Die Ergebnisse, die man mit diesem Verfahren erhält, sind im Gegensatz zum vorigen Verfahren von der Wahl der verschiedenen Parameter abhängig. Neben der Läuferanzahl m_0 können die Parameter p und l zur Berechnung des laufenden Schätzwerts und die „Läuferzahlkontrolle“ σ vorgegeben werden.

Der Einfluß dieser Parameter soll an einem Beispiel erläutert werden. Alle Rechnungen wurden mit 3000 Iterationen nach einem Vorlauf von 100 Iterationen berechnet. Zur Bestimmung der statistischen Fehler wurden 10 solche Läufe durchgeführt. Die Sollzahl der Läufer ist 6.

Die Anzahl l der Iterationen, über die bei der Berechnung von $\hat{\lambda}$ gemittelt wird, ist wesentlich für die Genauigkeit des Ergebnisses. Wenn das Mittel über zu wenige Iterationen gebildet wird, steigen die Fehler stark an. In Abbildung 3.5 sind Rechnungen mit drei verschiedenen Werten von l gezeigt. Die Größe von l hat auch

wesentlichen Einfluß auf die Rechenzeit, die von 470 s bei $l = 10$ auf 740 s bei $l = 100$ steigt. Deshalb scheint $l = 50$ (580 s) hier ein vernünftiger Kompromiß zu sein. (Alle hier angegebenen Zeiten beziehen sich auf einen PowerPC 601/66 MHz.)

Die Wahl von p bei der Berechnung von $\hat{\lambda}$ hat keinen wesentlichen Einfluß auf die Größe der Fehler. In Abbildung 3.6 sind Werte für $p = 1$ und $p = 10$ (berechnet mit $l = 50$; Rechenzeit bei $p = 10$: 960 s) dargestellt. Dies entspricht auch der Meinung von Nightingale [Nig96], der die Wahl $p = 1$ für sinnvoll hält.

In Abbildung 3.7 ist zu erkennen, daß eine schwächere Läuferzahlkontrolle die Fehler verringert. Die Fluktuationen der Läuferzahl verlängern die Rechenzeit nicht wesentlich, stellen aber ein praktisches Problem dar, weil entsprechend viel Speicher vorgesehen werden muß, um die Läufer zu verwalten. Bei $\sigma = 4.0$ wurden kurzzeitige Fluktuationen bis zu einer Läuferanzahl von 25 beobachtet, also etwa dem vierfachen Sollwert.

Zum Vergleich mit dem Verfahren mit fester Läuferzahl wurde eine Rechnung mit 6 Läufern mit $p = 1$, $l = 1$ und $\sigma = 2.0$ (Rechenzeit 570s) zusammen mit einem Lauf mit fester Läuferzahl (Rechenzeit 520 s) je über 3000 Iterationen 10 mal durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abbildung 3.8 zu sehen. Ein wesentlicher Vorteil einer der beiden Methoden ist hier nicht zu erkennen. Allerdings ist zu erwarten, daß das Verfahren mit variabler Läuferzahl bei sehr viel größeren Transfermatrizen günstiger ist. Der stochastische Teil der Iteration ist bei beiden Methoden gleich. Die Verwaltung der variablen Läuferzahl ist zwar zunächst erheblich aufwendiger, der Zeitbedarf ist aber von der Ordnung der Läuferzahl m . Hingegen hat das Verfahren mit fester Läuferzahl einen Zeitbedarf von der Ordnung m^2 für die Rekonfiguration, weil diese ebenfalls ein stochastischer Prozeß ist.

Außerdem soll noch erwähnt werden, daß das Verfahren mit variabler Läuferzahl wesentlich davon abhängt, daß der Erwartungswert (3.16) richtig simuliert wird. Die Richtigkeit der Simulation ist formal nicht bewiesen. So könnte man sich z. B. fragen, ob die sequentielle Neugruppierung der Läufer irgendeinen Effekt gegenüber einer zufälligen Paarbildung hat, auch wenn keine derartige Korrelation offensichtlich ist. NIGHTINGALE meint selbst, er glaube nicht, daß solche Annahmen strikt bewiesen werden können [Nig96].

3.4 Lokales Transfermatrix-Monte-Carlo-Verfahren

Die bisher betrachteten Transfermatrix-Verfahren haben alle noch die Beschränkung durch die Numerierung der Zustände, die eine Tabellierung notwendig macht und eine Menge Speicher erfordert. Mit den stochastischen Verfahren ist es möglich, auf diese Numerierung zu verzichten. Dazu sind zwei Dinge erforderlich. Der stochasti-

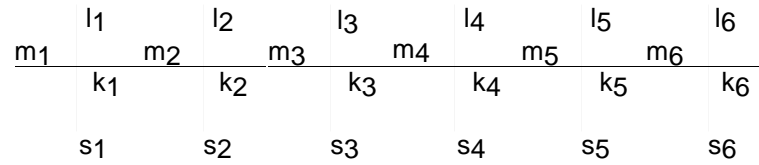


Abbildung 3.9: Bezeichnung der Pfeile auf den Kanten zur Lösung des 1-dimensionalen Sechs-Vertex-Modells.

sche Teil der Iteration muß, ohne daß die Möglichkeit besteht, die Gewichte aus der jeweiligen Spalte der Matrix A aufzuzählen, simuliert werden. Und die Berechnung der Spaltensummen, also die Diagonalmatrix B , muß durchgeführt werden können, ohne die Spalten zu kennen.

Die Spaltensummen entsprechen der Summe der Gewichte aller Linienkonfigurationen, die zu einer gegebenen Konfiguration „passen“. Diese können durch Lösen des 1-dimensionalen Sechs-Vertex-Modells erhalten werden.

Lösung des 1-dimensionalen Sechs-Vertex-Modells

In diesem Abschnitt wird eine etwas andere Bezeichnung der Vertices in einer Zeile verwendet. Die Konfiguration $K \ni c = (s_1, \dots, s_M)$ ist vorgegeben, und die s_i bezeichnen in der Pfeildarstellung die Richtung, in die der Pfeil an der unteren Kante des Vertex i zeigt. Wenn der Pfeil nach unten (bzw. nach links) zeigt, so soll $s_i = 1$, anderenfalls $s_i = 0$ sein. Entsprechend sind die anderen Kanten der Vertices wie in Abbildung 3.9 bezeichnet. Dabei ist offensichtlich $k_i = m_{i+1}$ unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen.

Das Gewicht eines Vertex kann hier als $\omega(s_i, k_i, l_i, m_i)$ geschrieben werden. Damit kann das Gewicht zu einer Konfiguration berechnet werden.

$$\begin{aligned}
 W(c) &= \sum_{\text{alle } k, l, m} \omega(s_1, k_1, l_1, m_1) \omega(s_2, k_2, l_2, m_2) \dots \omega(s_M, k_M, l_M, m_M) \\
 &= \sum_{\text{alle } k, l} \omega(s_1, k_1, l_1, k_M) \omega(s_2, k_2, l_2, k_1) \dots \omega(s_M, k_M, l_M, k_{M-1}) \quad (3.19)
 \end{aligned}$$

Jeder Vertex muß zwei Pfeile, die auf den Vertex zu und zwei, die von ihm wegzeigen, besitzen. Damit ist zu gegebenen s_i, k_i, k_{i-1} ein Vertex bereits eindeutig festgelegt. Definiert man zwei Matrizen $t_s \in M(2, \mathbb{R})$, $s \in \{0, 1\}$:

$$t_s(k_1, k_2) := \omega(s, k_1, l(s, k_2, k_1), k_2), \quad (3.20)$$

so kann man die Summe (3.19) schreiben als

$$W(c) = \text{Spur}(t_{s_1} t_{s_2} \dots t_{s_M}). \quad (3.21)$$

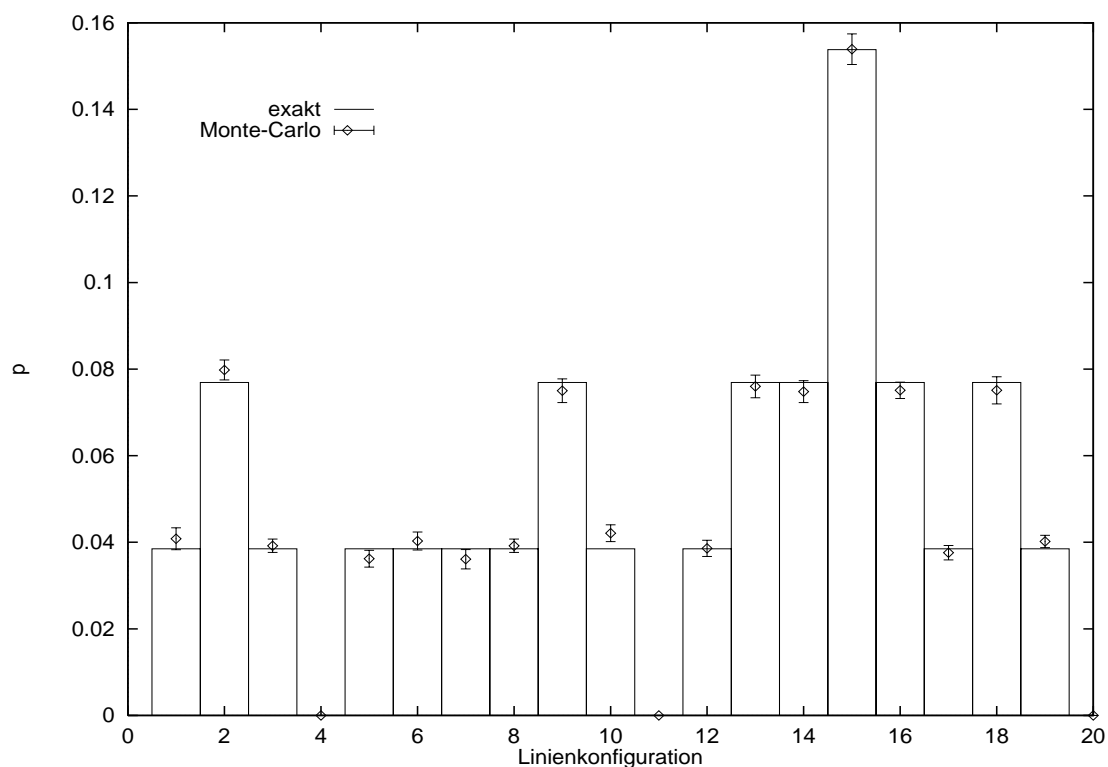


Abbildung 3.10: Vergleich der exakten Wahrscheinlichkeiten und der durch Monte-Carlo-Simulation gewonnenen Wahrscheinlichkeiten. Es wurden 10 Läufe mit 1000 Simulationen zu je 20 sweeps bei $K = 0.5$ durchgeführt, um die statistischen Fehler zu erhalten.

Dabei hat man im symmetrischen Sechs-Vertex-Modell

$$t_0 = \begin{pmatrix} a & 1 \\ 0 & a \end{pmatrix}, \quad t_1 = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 1 & a \end{pmatrix}.$$

Leider kommutieren die beiden Matrizen nicht, so daß keine weitere Vereinfachung möglich ist.

Die Multiplikation von 2×2 -Matrizen ist nicht sehr zeitaufwendig. Die Rechenzeit für die Berechnung des Gewichts $W(c)$ wächst linear mit der Breite M des Gitters.

Monte-Carlo-Verfahren zur stochastischen Iteration

Ausgangspunkt für die Monte-Carlo-Simulation des stochastischen Teils der Iteration, also der Wahrscheinlichkeitsverteilung, wie sie durch die Matrix A (vergleiche (3.1), Seite 46) beschrieben wird, sind die Überlegungen in Abschnitt 2.3.1. Dort war das Ziel, alle zu einer gegebenen Konfiguration entsprechend den Modellregeln passenden Folgekonfigurationen aufzuzählen. Hier soll nun eine Folgekonfiguration gemäß den Wahrscheinlichkeiten in A gefunden werden.

Die vorgegebene Konfiguration wird in der Liniendarstellung als (x_1, \dots, x_n) darge-

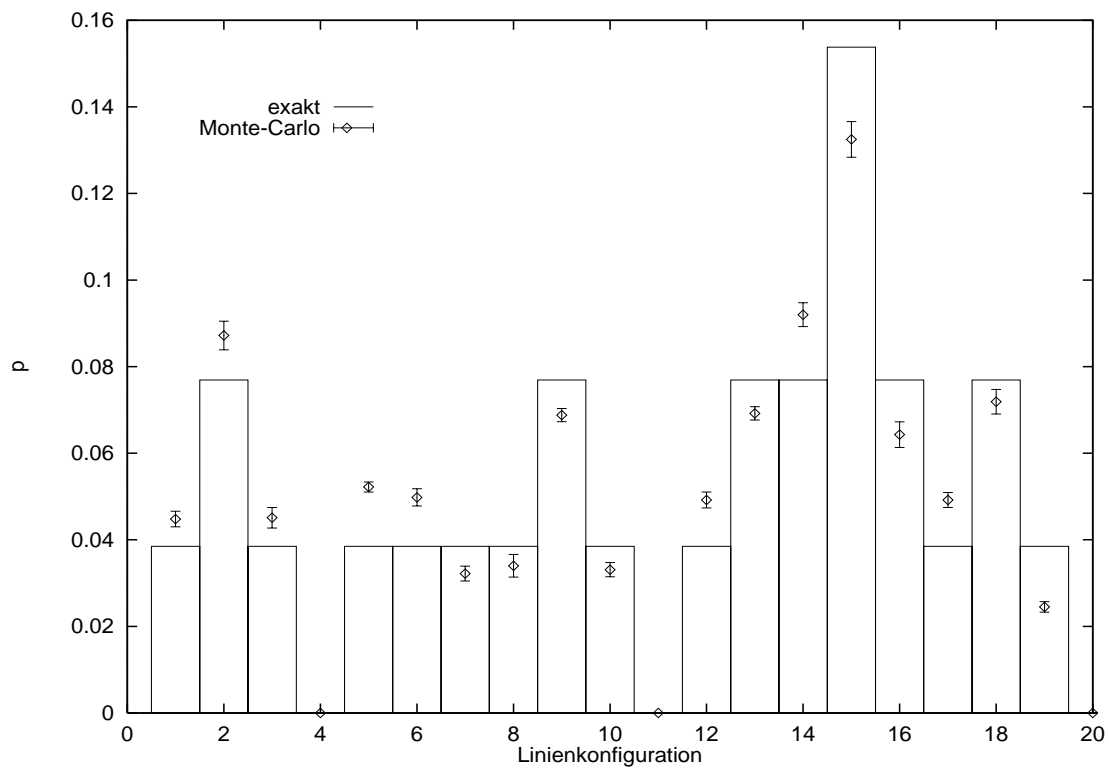


Abbildung 3.11: Zum Vergleich dasselbe Beispiel wie in Abbildung 3.10, aber mit sequentieller Durchführung der sweeps.

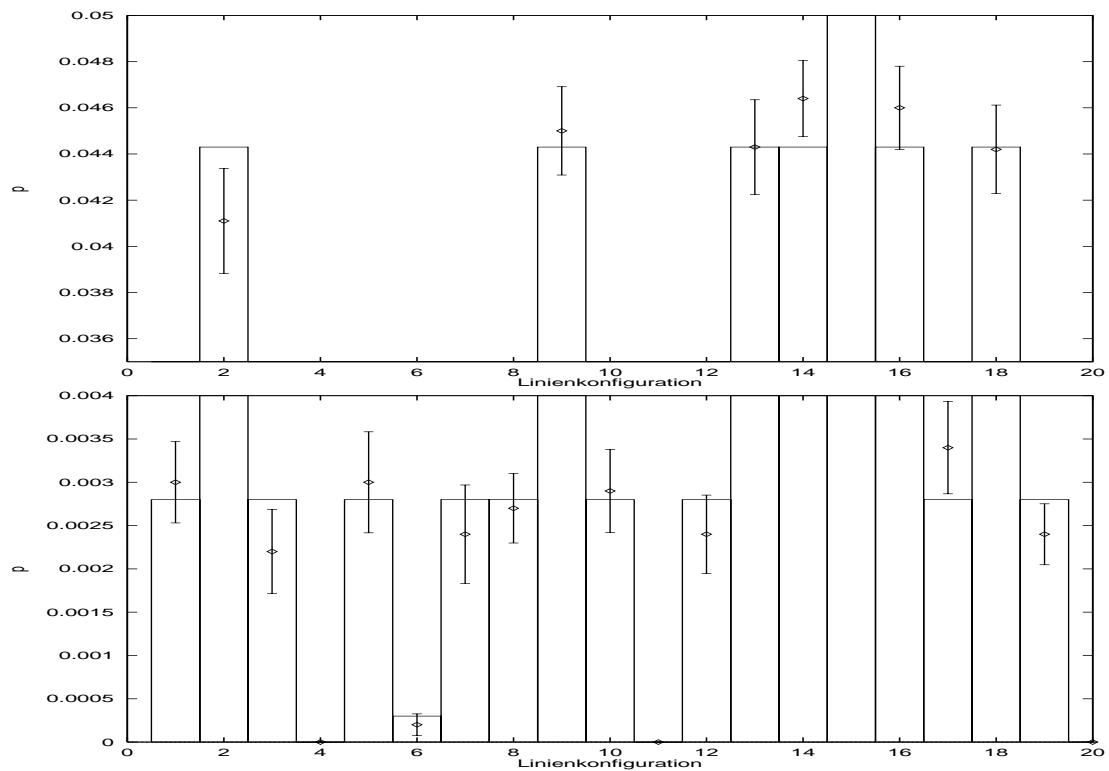


Abbildung 3.12: Dasselbe Beispiel wie Abbildung 3.10 bei $K = 2.0$.

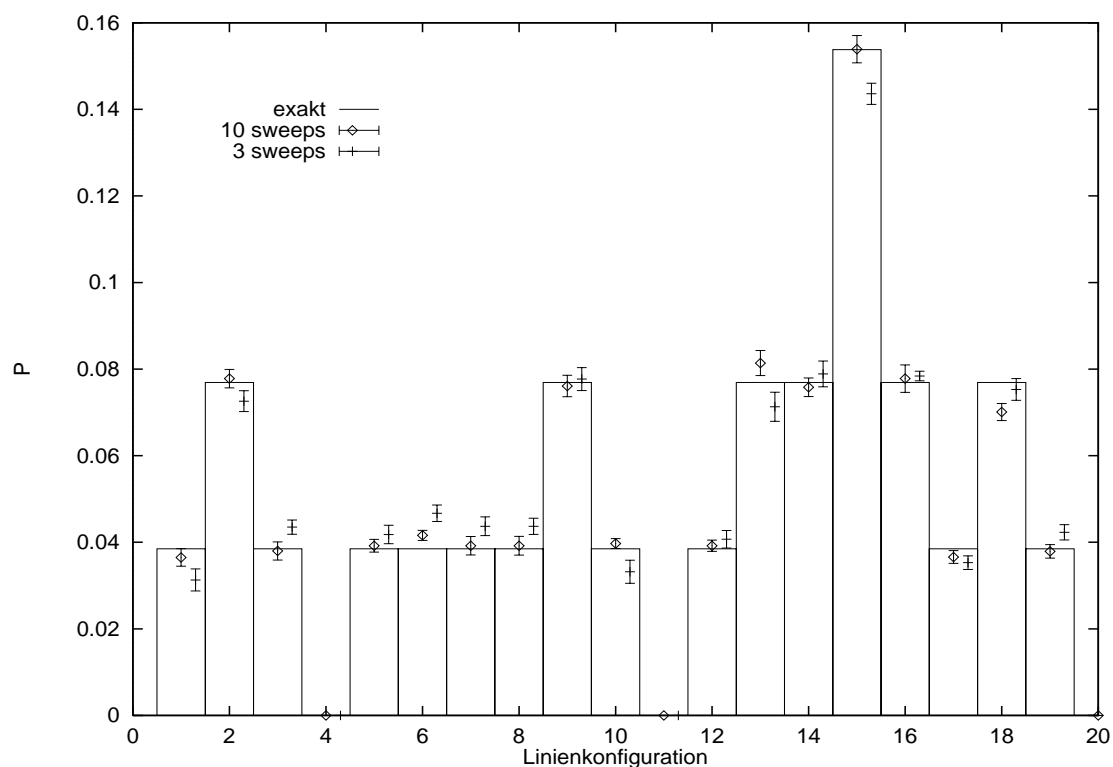


Abbildung 3.13: Dasselbe Beispiel wie Abbildung 3.10 bei $K = 0.5$, aber mit 10 und 3 sweeps.

stellt. Das Verfahren wird dann wie folgt durchgeführt:

1. Zufällig wird eine Zahl $i \in \{1 \dots n\}$ gezogen.
2. Mit der Wahrscheinlichkeit von je $\frac{1}{2}$ wird nun versucht, die Linie x_i einen Platz nach links oder rechts zu bewegen.
3. Nun wird wie in 2.3.1 festgestellt, ob die vorgesehene Bewegung zu einer erlaubten Kombination führt. Ist sie verboten, wird der Vorschlag verworfen.
4. Ist die Kombination erlaubt, wird sie mit einer relativen Wahrscheinlichkeit akzeptiert, die dem Verhältnis des Gewichts der neuen zu dem der alten Konfiguration entspricht.
5. Dieses Verfahren wird n -mal wiederholt.

Dies ist eine Anwendung des bekannten Metropolis-Verfahrens zu Simulation von Wahrscheinlichkeiten [Sok89].

Es genügt natürlich nicht, einen von diesen sogenannten „sweeps“ durchzuführen, sondern es müssen jedesmal hinreichend viele sweeps durchgeführt werden, um sicherzustellen, daß die Endkonfiguration von der Startkonfiguration unabhängig ist.

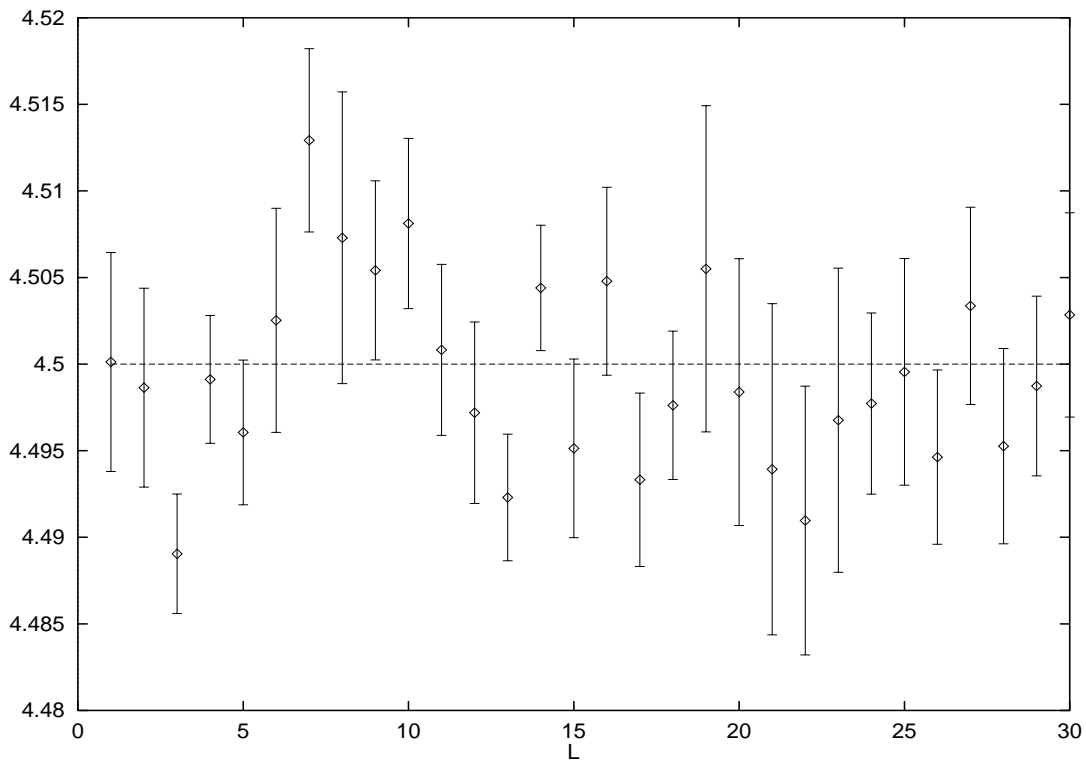


Abbildung 3.14: Ergebnis des Transfermatrix-Monte-Carlo-Verfahrens bei $K = 0.5$ am Beispiel $N = 6$, $n = 3$. Es wurden 10 Läufe zu je 1000 Iterationen für jeden Wert von L durchgeführt. Die stochastische Iteration wurde mit 20 sweeps simuliert. Der exakte Wert ist 4.5.

Als Beispiel soll wieder der zentrale Block einer Transfermatrix mit $N = 6$, $n = 3$ dienen. Die Startkonfiguration ist $(1, 3, 5)$. Dies ist einer der beiden Grundzustände des Modells, d.h. der Zustand trägt bei niedriger Temperatur ein sehr hohes Gewicht, und die Probleme treten dabei deutlicher zutage als bei einem „unwichtigen“ Zustand. Mit den Abbildungen 3.10 und 3.11 soll zunächst gezeigt werden, daß es tatsächlich erforderlich ist, im ersten Schritt eine Linie zufällig herauszugreifen. Eine sequentielle Bearbeitung aller Linien führt zu einer Verfälschung der Wahrscheinlichkeiten. Das liegt daran, daß die Linien sich gegenseitig in ihren Bewegungen blockieren und damit einige Kombinationen bei sequentieller Bearbeitung schwerer erreichbar sind.

Wieviele sweeps hinreichend sind, wurde in Abbildung 3.13 betrachtet. Bei 10 sweeps liegt ein Wert (Konfiguration 18) um deutlich mehr als die doppelte Länge des Fehlerbalkens neben dem richtigen Wert und der Wert bei Konfiguration 6 liegt wegen des sehr kleinen Fehlers auch signifikant falsch. Bei 3 sweeps wird die Verteilung gar nicht mehr richtig simuliert.

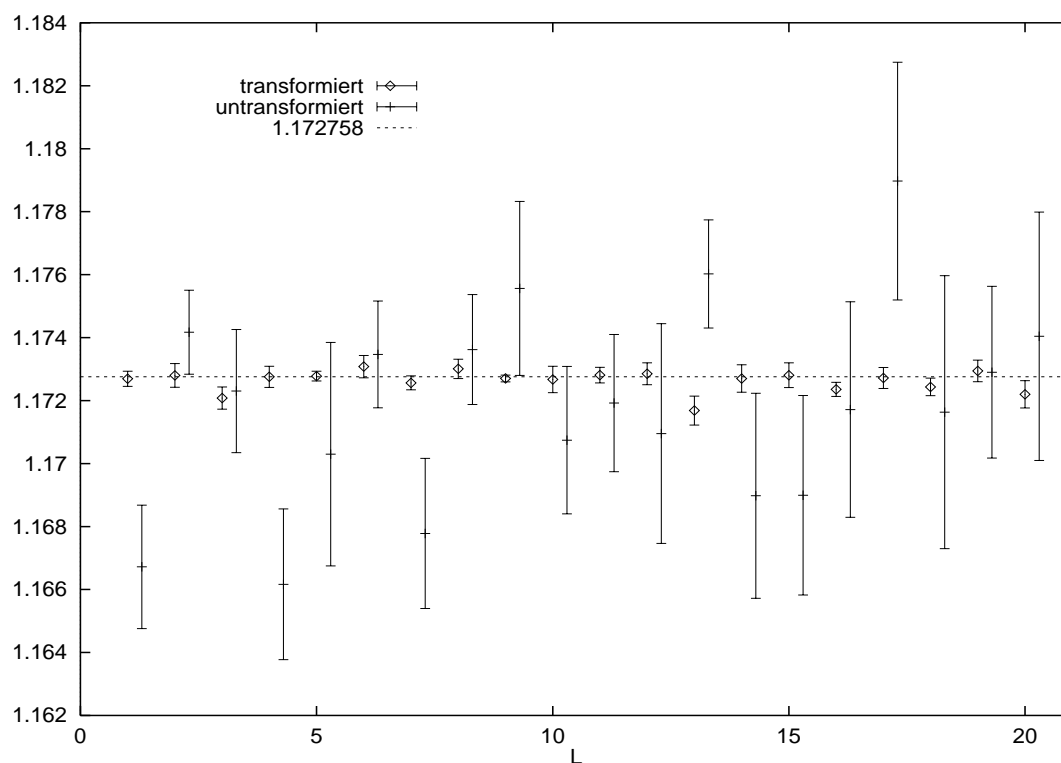


Abbildung 3.15: Der Effekt einer Ähnlichkeitstransformation mit einem gut geratenen Eigenvektor bei $K = 1.5$.

Implementierung

Die beiden obigen Verfahren wurden mit der Methode mit fester Läuferzahl zusammen getestet. In Abbildung 3.14 ist das Ergebnis einer Rechnung mit 6 Läufern zu sehen. Die Rechenzeit betrug etwa 60 Minuten. Der Zeitaufwand für dieses Verfahren ist erheblich größer, aber mit einem schnelleren Rechner besteht nun prinzipiell die Möglichkeit, erheblich größere Gitter anzugehen. Die stochastische Iteration skaliert linear mit der Gitterbreite M , die anderen Teile des Algorithmus sind von der Läuferzahl und nicht mehr von der Matrixdimension abhängig.

3.5 Varianzreduktion

Auf die Transfermatrix kann man eine Ähnlichkeitstransformation anwenden,

$$\tilde{T} := CTC^{-1}, \quad C_{ij} := (\varphi_0)_i \delta(i, j),$$

mit einer diagonalen Matrix C , die eine Multiplikation der Transfermatrix mit dem Eigenvektor zu λ_0 darstellt. Die Spaltensummen der transformierten Matrix sind

$$\sum_i \tilde{T}(i, j) = \sum_i C_i T(i, j) C_j^{-1} = \lambda_0 C_j C_j^{-1} = \lambda_0,$$

weil T symmetrisch ist, also die linken und rechten Eigenvektoren identisch sind. Da die Spaltensummen für alle Spalten konstant sind, ist \tilde{T} proportional zu einer stochastischen Matrix. Das bedeutet, daß in einem stochastischen Prozeß die Gewichte alle gleich sind und das Varianzproblem entfällt. Man hat sozusagen die optimale Form eines „importance sampling“.

Wenn es nun gelingt, den Eigenvektor φ_0 näherungsweise zu bestimmen oder zu erraten, kann man die Varianz deutlich reduzieren. Im Falle niedriger Temperaturen ($K > 1$) wird der Eigenvektor in der Konfigurationsbasis von den beiden Grundzuständen dominiert. Die anderen Komponenten haben nur sehr kleine Einträge. Deshalb wurde ein geratener Eigenvektor nach einem einfach zu implementierenden Rezept verwendet. Alle Einträge außer den beiden Grundzustandskonfigurationen werden als $1/\sqrt{(\text{Dimension})}$ gewählt, die Einträge für die beiden Grundzustände als 1. Dadurch braucht der geschätzte Eigenvektor nicht gespeichert zu werden, sondern kann bei der Berechnung des Matrixeintrags im Programm einfach mit berücksichtigt werden.

Anhand desselben Beipfels wie im Abschnitt 3.3 wird die Wirkung der Transformation in Abbildung 3.15 veranschaulicht. Dabei wurde die Methode mit fester Läuferzahl verwendet und zu jedem Wert von L ein stochastischer Prozess mit 3000 Iterationen mit 6 Läufer 10 mal wiederholt, um die statistischen Fehler zu erhalten.

3.6 Ein erstes Transfermatrix-Monte-Carlo Resultat

Anhand eines Beispiels bei $K = 0.5$, also in dem Bereich, wo durch die Rechnungen in [DdV95] ein Vergleich des Ergebnisses möglich ist, soll ein erstes Resultat des lokalen stochastischen Verfahrens mit variabler Läuferzahl gezeigt werden. Aus der Formel zur Näherung der Korrekturen der freien Energie für endlich breite Gitter aus Abschnitt 2.4 kann man den führenden Eigenwert berechnen. Bei $N = 30$ ist zu erwarten, daß die Näherung ziemlich genau ist.

Es wurden 100 Läufer verwendet und je Wert von L 10 mal 1000 Iterationen durchgeführt. Die Rechenzeit auf einer Sun SPARC betrug etwa 5 Tage. Der zweite Lauf wurde auf einer anderen Sun Workstation gerechnet. Die größte Block der Transfermatrix, der hier verwendet wird, hat die Dimension 155 117 520. Man sieht an Abbildung 3.16, daß die Ergebnisse richtig liegen, die Fehler aber noch recht groß sind. In [NB96] werden Läuferzahlen von 2500 bis 5000 verwendet. Daran wird deutlich, daß die Implementation noch deutlich optimiert werden muß, um Resultate mit ausreichender Statistik zu gewinnen. Außerdem wird dort [NB96] ein erheblicher Aufwand betrieben, um den Eigenvektor zu λ_0 zu nähern und die Varianz durch eine Ähnlichkeitstransformation zu reduzieren.

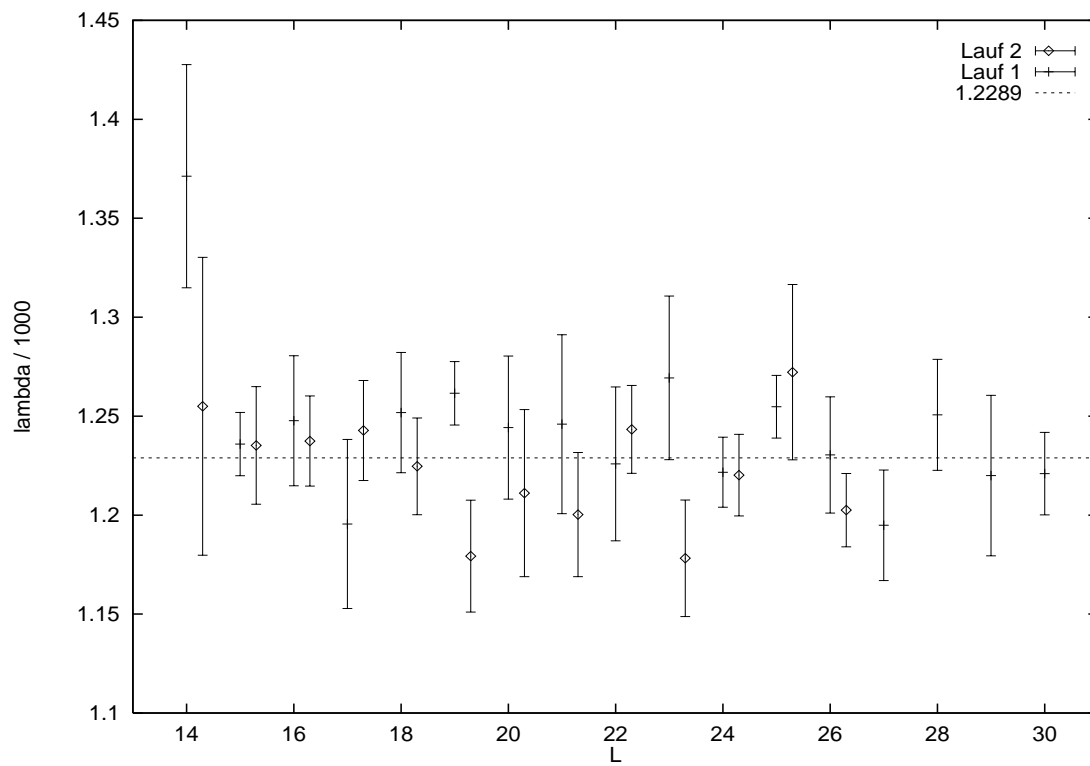


Abbildung 3.16: Zwei Ergebnisse des Transfermatrix-Monte-Carlo-Verfahrens bei $N = 30$ und $K = 0.5$. Die gestrichelte Linie zeigt den Wert für den Eigenwert, der aus der Korrekturformel in Abschnitt 2.4 berechnet wurde.

Kapitel 4

Korrelationsfunktionen

In diesem Kapitel sollen Paarkorrelationsfunktionen betrachtet werden. Wie schon in der Einleitung erwähnt, divergiert die Korrelationslänge für alle $K \leq 1$. Hier wird nur der antiferroelektrische Bereich $K > 1$ betrachtet, weil die Korrelationslänge hier einen thermodynamischen Limes besitzt. Dies ist der Bereich niedriger Temperaturen des Modells. Auf endlichen Gittern wird man die Divergenz für $K \searrow 1$ natürlich nicht beobachten können, aber bei etwas größerem K ist ein Vergleich mit der Korrelationslänge im thermodynamischen Limes schon möglich. Außerdem wird erörtert, wie eine sinnvolle Definition einer Paarkorrelationsfunktion im endlichen Sechs-Vertex-Modell aussehen könnte.

4.1 Korrelationslänge im thermodynamischen Limes

In der Einleitung wurde mittels des Transfermatrixformalismus Gleichung (0.5) hergeleitet. Wählt man $g_1 = g_2 =: g$, so erhält man

$$\langle g(c_i)g(c_{i+l}) \rangle = \sum_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^l |\langle \varphi_i, G\varphi_0 \rangle|^2 \quad (4.1)$$

$$= |\langle \varphi_0, G\varphi_0 \rangle|^2 + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^l |\langle \varphi_1, G\varphi_0 \rangle|^2 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_0} \right)^l |\langle \varphi_2, G\varphi_0 \rangle|^2 + \dots \quad (4.2)$$

Der Grundzustand des Sechs-Vertex-Modells entartet im thermodynamischen Limes, so daß $\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \rightarrow -1$. Deshalb ist im Sechs-Vertex-Modell der nächstgrößte Eigenwert λ_2 bestimmend für die Korrelationslänge.

K	1.1	1.2	1.5	2.0	3.0	5.0	10.0	50.0
ξ	87.52412	12.18075	2.044419	0.788592	0.364747	0.180400	0.080149	0.0147213

Tabelle 4.1: Die Korrelationslänge für einige K entsprechend Gleichung (4.5).

BAXTER [Bax82] gibt für das Verhältnis $\frac{\lambda_2}{\lambda_0}$ im thermodynamischen Limes, reduziert auf das symmetrische Sechs-Vertex-Modell, folgende Formel an:

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_0} = 4x \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1 + x^{4m}}{1 + x^{4m-2}} \right)^4, \quad (4.3)$$

wobei

$$x := \exp(-\Lambda), \quad \Lambda := \operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{2} \exp(4K K_c) - 1 \right).$$

Die Korrelationslänge ist im allgemeinen definiert als

$$\xi := \frac{1}{\log \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_2} \right)}. \quad (4.4)$$

Setzt man (4.3) in (4.4) ein, erhält man

$$\frac{1}{\xi} = -2 \log \left(2\sqrt{x} \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1 + x^{4m}}{1 + x^{4m-2}} \right)^2 \right). \quad (4.5)$$

Überraschenderweise enthält BAXTERS Ergebnis den Faktor 2 vor dem Logarithmus nicht, seine Korrelationslänge ist also doppelt so groß wie die hier angegebene.

4.2 Spektrum der Transfermatrix

Das Spektrum der Transfermatrix des Sechs-Vertex-Modells hat bei endlichen Gitterbreiten einen größten nicht entarteten Eigenwert. Der zugehörige Eigenvektor hat positive Einträge und entspricht im wesentlichen einer symmetrischen Kombination der beiden Grundzustände des Modells. Alle anderen Eigenwerte sind betragsmäßig kleiner und häufen sich bei 0. Zur besseren Übersicht sollen die Eigenwerte bei periodischen Randbedingungen mit λ_i^j bezeichnet werden. Dabei bezeichnet j den Block der Transfermatrix, aus dem der Eigenwert stammt; $j = 0$ ist der Hauptblock, $j = 1$ der erste Nebenblock usw.. i numeriert die betragsmäßige Ordnung der Eigenwerte eines Blocks. Die Nebenblöcke treten jeweils zweimal auf, so daß alle Eigenwerte darin wenigstens zweifach entartet sind.

Wenig unterhalb von λ_0^0 befindet sich der zu einer antisymmetrischen Kombination der beiden Grundzustände des Modells gehörige Eigenwert λ_1^0 , der im thermodynamischen Limes betragsmäßig mit λ_0^0 entartet. $\log \left| \frac{\lambda_0^0}{\lambda_1^0} \right|$ kann dementsprechend im endlichen Gitter als Tunnellänge der beiden Grundzustände betrachtet werden.

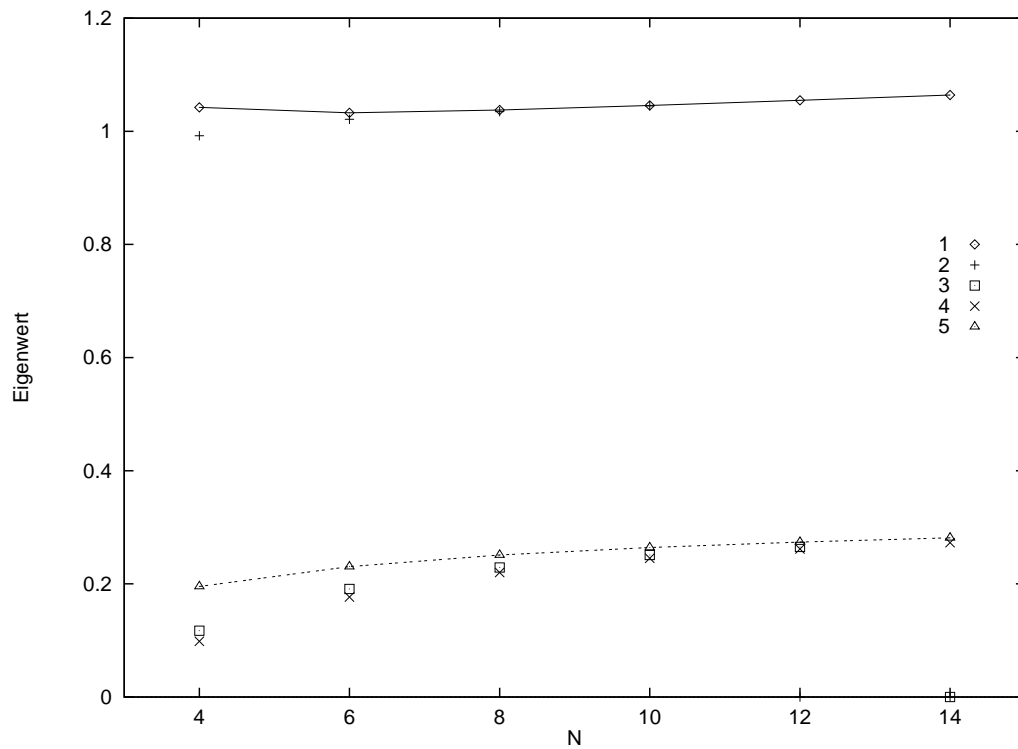


Abbildung 4.1: Die Beträge einiger Eigenwerte des Spektrums der Transfermatrix bei $K = 2.0$ und periodischen Randbedingungen in Abhängigkeit von der Gitterbreite N . (1) = λ_0^0 , (2) = $-\lambda_1^0$, (3) = $-\lambda_2^0$, (4) = λ_3^0 , (5) = λ_0^1

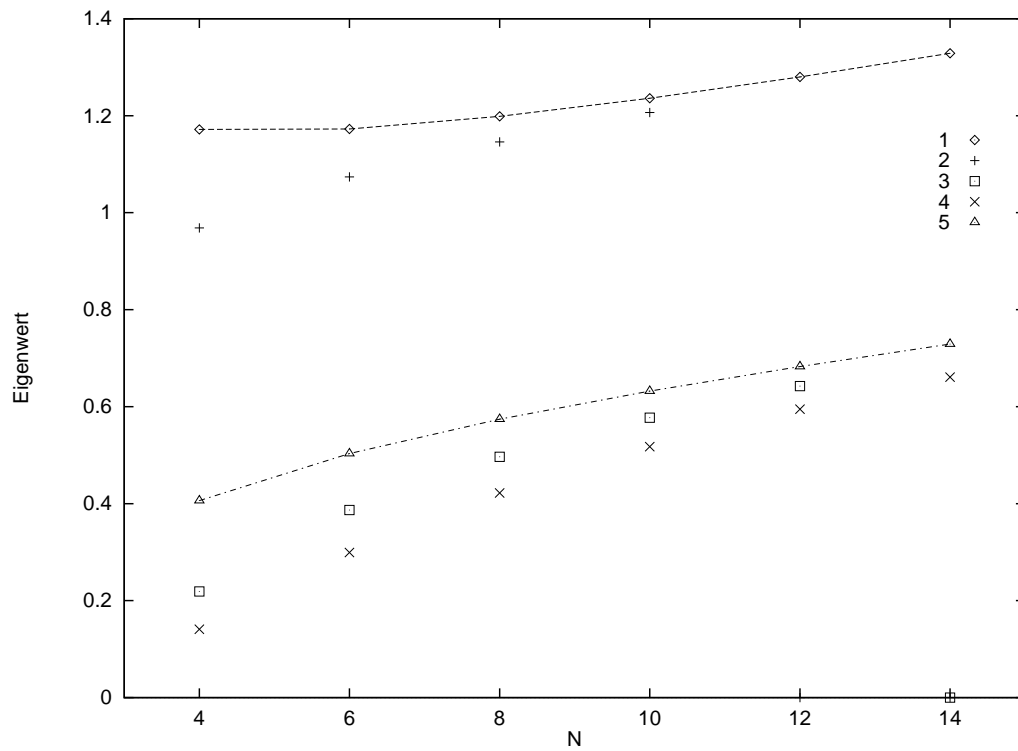


Abbildung 4.2: Dieselben Eigenwerte bei $K = 1.5$. Die Bezeichnung ist wie in Abbildung 4.1.

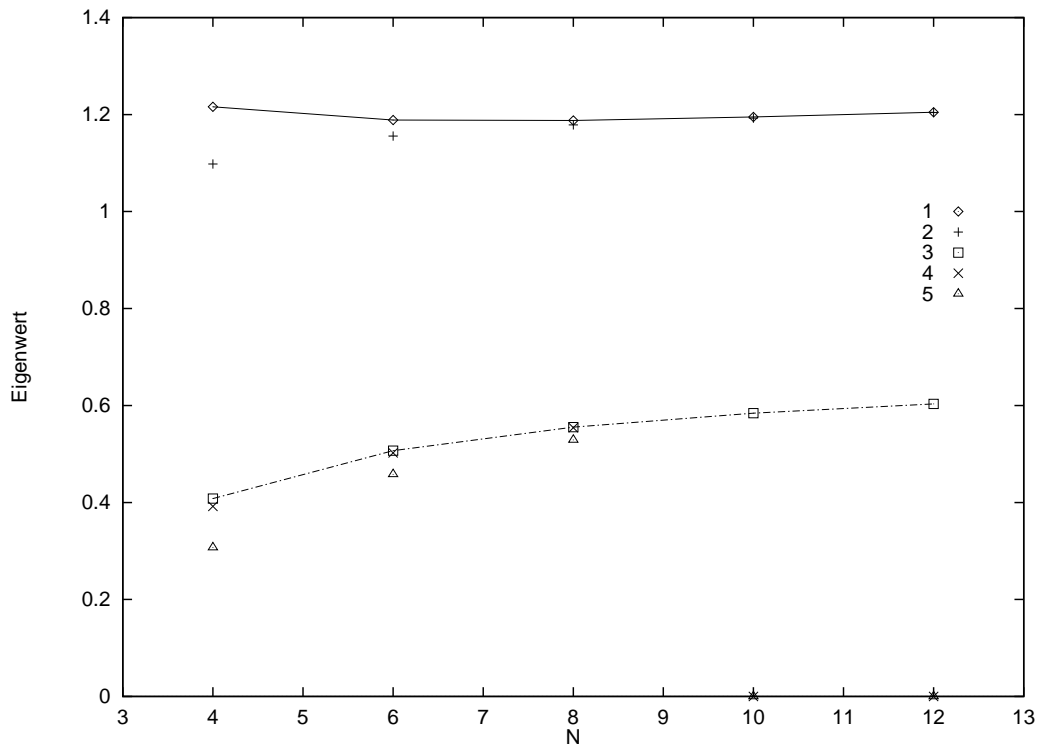


Abbildung 4.3: Der Betrag einiger Eigenwerte des Spektrums der Transfermatrix bei $K = 2.0$ und freien Randbedingungen. (1) = λ_0 , (2) = $-\lambda_1$, (3) = $-\lambda_2$, (4) = λ_3 , (5) = λ_4

i	Eigenwert λ_i^0	Parität	Rotation r
0	1.0326526068686	1	0
1	-1.0211337745832	-1	3
2	-0.1909179687500	1	3
3	0.1767757483149	1	0
4	0.1226145996972	-1	
5	0.1226145996972	-1	
6	-0.1127929687500	1	
7	-0.1127929687500	1	
8	0.0512695312500	-1	0
9	-0.0448798386577	-1	3
10	0.0068802385665	1	0
11	-0.0214327533975	-1	3
12	-0.0034179687500	1	
13	-0.0034179687500	1	
14	-0.0034179687500	1	
15	-0.0034179687500	1	
16	-0.0034179687500	1	
17	-0.0034179687500	1	
18	0.0033619628028	-1	
19	0.0033619628028	-1	

Tabelle 4.2: Spektrum des zentralen Blocks der Transfermatrix für $N = 6$ und $K = 2.0$.

i	Eigenwert λ_i	Parität
0	1.1887479182007	1
1	-1.1557897312774	-1
2	0.5069821138419	-1
3	-0.5024171643457	1
4	-0.4580809801340	-1
5	0.4499644890346	1
6	0.2811752583176	1
7	-0.2774956292641	-1
8	-0.2047384482555	-1
9	0.2021549823921	1
10	-0.1489659399445	
11	0.1486809171417	
12	0.1430733209110	
14	-0.1427747933737	
14	-0.1048725982436	
15	0.1031897909797	

Tabelle 4.3: Die 16 größten Eigenwerte der Transfermatrix bei $K = 2.0$ und freien Randbedingungen.

Ein ganzes Stück darunter befindet sich eine Gruppe von etwa 4 Eigenwerten, die relativ dicht beieinander liegen und sich mit wachsender Gittergröße auf den Eigenwert λ_0^1 zubewegen, der im endlichen Fall der insgesamt drittgrößte, und damit für die Korrelationslänge maßgeblich ist. Für $K = 2.0$ und $K = 1.5$ ist dieses Verhalten in den Abbildungen 4.1 bzw. 4.2 dargestellt.

In Tabelle 4.2 sind die Eigenwerte des zentralen Blocks am Beispiel vollständig aufgelistet. In der dritten Spalte sind die Eigenwerte des Paritätsoperators angegeben. Die Eigenwerte des Rotationsoperators R können als

$$R\psi = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}r\right)\psi, \quad r \in \{0, \dots, N-1\},$$

geschrieben werden, weil R in der Konfigurationsbasis ein Operator ist, der die Basis permutiert. In der mit Rotation überschriebenen Spalte sind die Werte r von R bei denjenigen Zuständen angegeben, die Eigenzustände des Rotationsoperators sind. Im allgemeinen sind die Eigenzustände der Transfermatrix keine Eigenzustände von R . Dies ist aber der Fall, wenn der Zustand nicht entartet ist, denn da R und T kommutieren, können sie simultan diagonalisiert werden. Weil T symmetrisch ist, müssen die Eigenvektoren zu nicht entarteten Eigenwerten reell sein. Daraus folgt, daß nicht entartete Zustände nur $r = 0$ oder $r = \frac{N}{2}$ haben können. Die übrigen Eigenwerte von R sind nicht reell; bei einer simultanen Diagonalisierung können die Eigenvektoren der Transfermatrix zu entarteten Eigenwerten in den entsprechenden Unterräumen noch komplex sein.

Aus diesem Grund fehlt auch der Wert zu λ_2^0 für $N = 14$ in den Abbildungen. Die

$\langle \varphi, G\varphi_0 \rangle$					
freie Randbedingungen				periodische Randb.	
φ	$g(c) = \sum_i c_i c_{i+1}$	$g(c) = \sum_i c_i c_{i+2}$	$g(c) = \sum_i c_i$	φ	$g(c) = \sum_i c_i c_{i+1}$
φ_0	-5.18987381	4.88100885	0.00000000	φ_0^0	-5.84935544
φ_1	0.00000000	0.00000000	0.00000000	φ_1^0	0.00000000
φ_2	0.00000000	0.00000000	-0.43986705	φ_0^1	0.00000000
φ_3	0.28740089	-0.02052669	0.00000000	φ_0^1	0.00000000
φ_4	0.00000000	0.00000000	0.33209934	φ_2^0	0.00000000
φ_5	1.26017502	-2.13197271	0.00000000	φ_3^0	0.76339776

Tabelle 4.4: Die Skalarprodukte, die die Koeffizienten in der Reihe in Gleichung (4.1) bilden, für die im Text diskutierten Beispiele. Die Eigenvektoren sind nach der betragsmäßigen Größe der entsprechenden Eigenwerte absteigend angeordnet. φ_0^1 tritt zweimal auf, weil es zwei Nebenblöcke mit demselben Eigenwert gibt.

Werte wurden mit einer durch Rotationssymmetrie reduzierten Matrix (vergleiche Abschnitt 2.1) berechnet, entsprechend fehlt dieser Eigenwert. Ebenso kann λ_1^0 mit einer durch Ausnutzung der Parität reduzierten Matrix nicht berechnet werden.

Betrachtet man nun das Spektrum bei $N = 6$ mit freien Randbedingungen, so sieht es auf den ersten Blick ähnlich aus wie bei periodischen Randbedingungen (Tabelle 4.3). Die beiden Grundzustände und die einiges darunter liegende Gruppe von vier zusammenliegenden Eigenwerten sind auch hier zu sehen. Es gibt aber wesentliche Unterschiede. Zunächst einmal zerfällt die Transfermatrix nicht mehr in diagonale Blöcke, da die Linienenerhaltung bei freien Randbedingungen nicht gilt. Auch enthält die Transfermatrix erheblich weniger „0“-Einträge. Ein Rotationsoperator auf den Linienkonfigurationen kann nicht sinnvoll definiert werden, so daß auch diese Möglichkeit der Reduktion der Transfermatrix entfällt. Auffällig ist auch, daß der Eigenwert λ_2 im Gegensatz zum Fall mit periodischen Randbedingungen ungerade Parität hat. Dies gibt einen ersten Hinweis darauf, daß es einen Zusammenhang zwischen Korrelationslänge und Randbedingungen gibt.

Im Abbildung 4.3 sind die führenden Eigenwerte für Gitterbreiten bis $N = 12$ gezeigt. Die Eigenwerte für $N = 10$ und $N = 12$ sind mit der Powermethode mit Orthogonalisierung berechnet (siehe Abschnitt 2.3.2). Insgesamt sieht man, daß die Annäherung der Eigenwerte bei kleinen Gittern schneller erfolgt als im Fall der periodischen Randbedingungen.

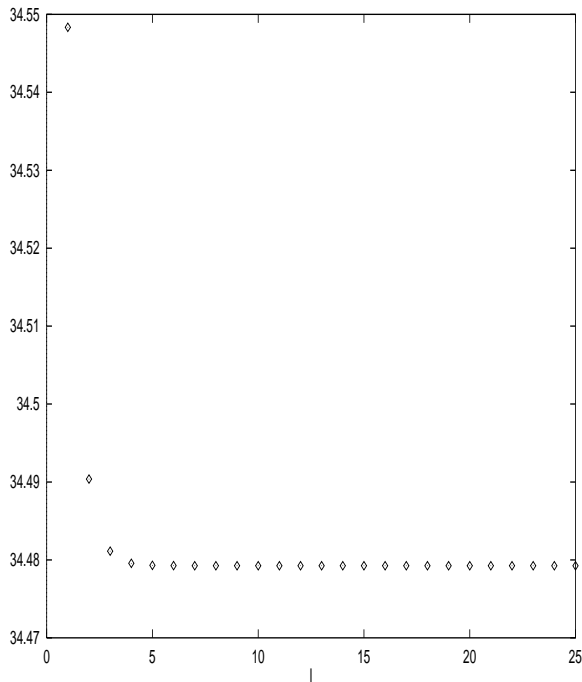


Abbildung 4.4: Beispiel für eine Korrelationsfunktion. $g = \sum_i c_i c_{i+1}$, periodische Randbedingungen.

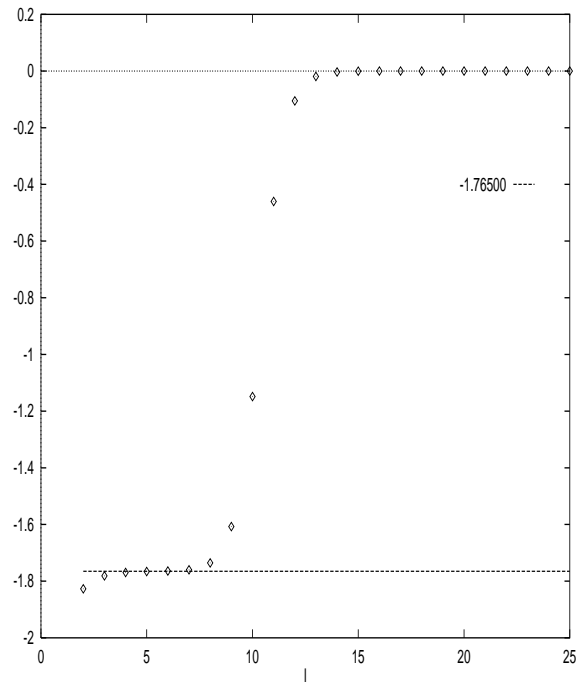


Abbildung 4.5: Die aus der Rechnung von Abbildung 4.4 gewonnene inverse Korrelationslänge $-1/\xi$.

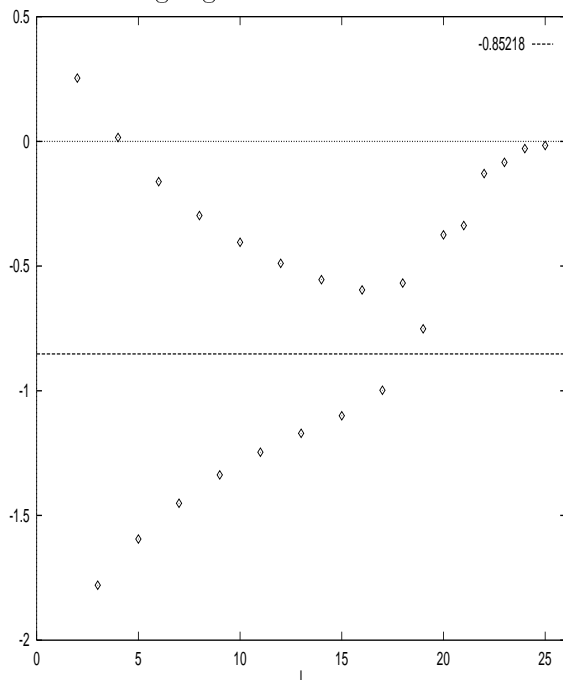


Abbildung 4.6: $-1/\xi$ bei freien Randbedingungen und $g = \sum_i c_i$.

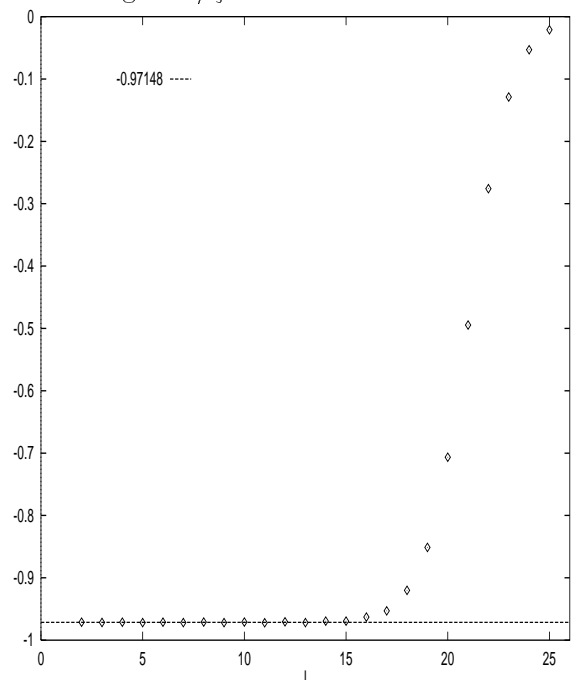


Abbildung 4.7: $-1/\xi$ bei freien Randbedingungen, $g = \sum_i c_i c_{i+2}$.

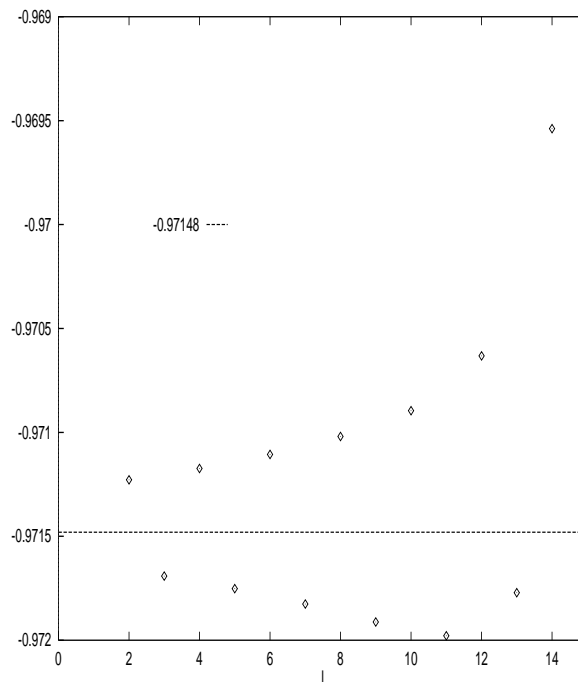


Abbildung 4.8: Vergrößerter Ausschnitt aus Abbildung 4.7.

4.3 Korrelationsfunktionen mit direkter Transfermatrixmultiplikation

Wenn man ein relativ kleines Gitter betrachtet, kann man die Paarkorrelation

$$\langle g(c_i)g(c_{i+l}) \rangle = \frac{\text{Spur } GT^l GT^{M-l}}{Z} \quad (4.6)$$

auch direkt durch Ausführung der Matrixmultiplikation berechnen. Ist zudem die Korrelationslänge klein, so genügt es, einen Streifen des Gitters zu betrachten, der hinreichend lang gegenüber der Korrelationslänge ist, so daß die Effekte, die durch die endliche Länge des Streifens verursacht werden, vernachlässigt werden können.

Am Beispiel eines Streifens der Breite $N = 6$ und der Länge $M = 50$ bei $K = 2.0$, also in einem kalten Zustand des Modells, sollen die Probleme, die bei der Definition einer sinnvollen Korrelationsfunktion für ein endliches Gitter auftreten, im einzelnen betrachtet werden.

Für die konkrete Rechnung wählt man in Gleichung (4.6) $i = 0$ und definiert dann

$$C_g(l) := \langle g(c_0)g(c_{0+l}) \rangle, \quad l \in \{1, \dots, \frac{M}{2}\}. \quad (4.7)$$

Wegen der periodischen Randbedingungen in Richtung der Transfermatrixiteration erhält man auf der zweiten Hälfte des Gitters nur ein Spiegelbild der Funktion.

In Abbildung 4.4 ist ein typisches Ergebnis einer solchen Rechnung zu sehen. Um daraus die Korrelationslänge zu gewinnen, wird der konstante Anteil, $C_g(\frac{M}{2})$, subtrahiert und die Steigung in einer logarithmischen Auftragung berechnet. Nach Definition der Korrelationslänge (4.4) erhält man damit

$$-\frac{1}{\xi} = \log \left(C_g(l) - C_g\left(\frac{M}{2}\right) \right) - \log \left(C_g(l-1) - C_g\left(\frac{M}{2}\right) \right). \quad (4.8)$$

In Abbildung 4.5 ist das entsprechende Resultat zu Abbildung 4.4 zu sehen. Im Bereich des Plateaus kann die Korrelationslänge abgelesen werden. Die gepunktete Linie entspricht der Korrelationslänge, die man aus den entsprechenden Eigenwerten des Spektrums berechnet (vergleiche auch Tabelle 4.4). Der Abfall auf 0 ist ein numerisches Artefakt ohne physikalische Bedeutung, das aus der endlichen Rechengenauigkeit resultiert.

Periodische Randbedingungen

Anhand von Tabelle 4.2 sieht man, daß eine Korrelationsfunktion eine gerade Funktion sein muß, wenn man nicht die Tunnellänge messen will. Außerdem bemerkt man, daß es aufgrund der Blockstruktur der Transfermatrix keine Korrelationsfunktion geben kann, deren Korrelationslänge von dem Eigenwert λ_0^1 bestimmt wird. Die Projektion $\langle \varphi_i^1, G\varphi_0^0 \rangle$ (siehe Gleichung 4.1) ist 0 für alle Eigenvektoren, die nicht zu Eigenwerten des zentralen Blocks der Matrix gehören.

Der nächstgrößte Eigenwert des zentralen Blocks ist negativ und die Projektion $\langle \varphi_2^0, G\varphi_0^0 \rangle$ ist ebenfalls 0 für verschiedene gerade Funktionen g . Eine gerade Korrelationsfunktion wird daher erst durch λ_3^0 bestimmt. Dies ist das Beispiel, das in Abbildung 4.5 zusammen mit dem direkt aus dem Eigenwert berechneten ξ gezeigt ist. Als Korrelationsfunktion wurde $g(c) := \sum_{i=1}^N c_i c_{i+1}$ gewählt. Im thermodynamischen Limes werden diese Probleme alle durch die vielfältige Entartung des Spektrums gelöst, im endlichen Fall kann man so keine vernünftige Korrelationsfunktion mit periodischen Randbedingungen definieren, die das ganze Sechs-Vertex-Modell und nicht nur den zentralen Block berücksichtigt.

Freie Randbedingungen

Hier sieht die Situation grundsätzlich anders aus. Durch die freien Randbedingungen besitzt die Transfermatrix keine Blöcke mehr, es muß also von vornherein die gesamte Transfermatrix betrachtet werden. Die Eigenwerte λ_1 und λ_2 haben dieselbe Parität, so daß es nicht möglich ist, durch die Parität der Korrelationsfunktion die beiden zu trennen. Durch die Wahl einer geeigneten Korrelationsfunktion, nämlich $g(c) = \sum_{i=1}^N c_i$, kann man trotzdem erreichen, daß $\langle \varphi_1, G\varphi_0 \rangle = 0$ und $\langle \varphi_2, G\varphi_0 \rangle \neq 0$. Das Ergebnis (Abbildung 4.6) ist leider auch recht unbefriedigend, da die Projektion auf

den Eigenvektor zu λ_4 in derselben Größenordnung liegt und das an sich richtige Ergebnis von einer Oszillation überlagert wird.

Wählt man $g(c) = \sum_{i=1}^N c_i c_{i+2}$ (Abbildung 4.7), kann man erzwingen, daß λ_5 bestimmend für die Korrelationslänge ist. Bei genauerer Betrachtung sieht man noch eine sehr kleine Oszillation, die von höheren Eigenwerten stammt. (Abbildung 4.8) Da die Eigenwerte im Spektrum recht dicht beieinander liegen, ist der Fehler hier nicht so groß wie bei periodischen Randbedingungen.

Vergleicht man die Abbildungen 4.5 und 4.7, so sieht man, daß sich die Korrelationslängen bei periodischen und bei freien Randbedingungen ungefähr um einen Faktor 2 unterscheiden. Zudem ergibt sich aus der Diskussion, daß eine physikalisch vernünftige Definition der Korrelationslänge freie Randbedingungen voraussetzen sollte. Der Faktor 2 in der Korrelationslänge in Baxters Rechnung kann so erklärt werden. Damit werden die Artefakte beseitigt, die aus der Rechnung mit periodischen Randbedingungen resultieren.

Physikalisch läßt sich das leicht am BCSOS-Modell verstehen. Der Grundzustand einer Linienkonfiguration des BCSOS-Modells ist, abgesehen von der vorgeschriebenen Differenz nächster Nachbarn um 1, flach. Die erste Anregung ist eine zusätzliche Stufe der Höhe 1. Bei periodischen Randbedingungen muß es dann notwendigerweise noch eine zweite Stufe der Höhe 1 in der Linienkonfiguration geben, die bei freien Randbedingungen nicht auftritt. Damit läßt sich ein Faktor 2 in der Korrelationslänge erklären.

Die physikalische Interpretation ist, daß bei periodischen Randbedingungen keine elementaren Einteilchenzustände existieren, sondern nur gebundene Zweiteilchenzustände. Im thermodynamischen Limes, der natürlich bei tiefen Temperaturen schneller erreicht wird als bei hohen Temperaturen, entkoppeln die Zweiteilchenzustände, und die Masse geht gegen das Doppelte der Masse des Einteilchenzustandes, den man auf Gittern mit freien Randbedingungen sehen kann.

Da alle bei periodischen Randbedingungen definierbaren Korrelationsfunktionen sowieso nur den zentralen Block, also den Teil des Sechs-Vertex-Modells, der isomorph zum BCSOS-Modell ist, berücksichtigen, scheint diese Definition insbesondere für ein endliches Sechs-Vertex-Modell ungeeignet.

Bei freien Randbedingungen hat man die konfigurationsweise Isomorphie von BCSOS- und Sechs-Vertex-Modell ohne Einschränkungen. Die Definition der Korrelationslänge in dieser Situation ist die physikalisch sinnvollste und entspricht auch der von BAXTER angegebenen Korrelationslänge.

Trotzdem sind sowohl bei numerischen Rechnungen als auch bei analytischen Berechnungen im thermodynamischen Limes die periodischen Randbedingungen aus technischen Gründen unverzichtbar.

In den Tabellen 4.5 und 4.6 ist zu sehen, daß das Verhältnis von ξ_f zu ξ_p tatsächlich

N	4	6	8	10	12	∞
ξ_f	0.9161	1.1735	1.3135	1.3966	1.4488	1.5772
ξ_p	0.5972	0.6668	0.7046	0.7272	0.7418	0.78859
ξ_f/ξ_p	1.53	1.75	1.86	1.92	1.95	—

Tabelle 4.5: Die Korrelationslänge mit freien und periodischen Randbedingungen bei $K = 2.0$ für verschiedene Gittergrößen.

K	5.0	10.0	20.0
ξ_∞	0.180400	0.080150	.037966
ξ_f	0.34320853	0.15668893	0.07511095
ξ_p	0.17536389	0.07914526	0.03773878
ξ_f/ξ_p	1.95712206	1.97976385	1.99028577

Tabelle 4.6: Die Korrelationslänge für $N = 6$ bei verschiedenen K im sehr kalten Bereich. Zum Vergleich ist die Korrelationslänge im thermodynamischen Limes ξ_∞ mit eingetragen.

sowohl mit wachsender Gitterbreite N als auch auf schmalen Gittern bei tiefen Temperaturen gegen 2 geht.

Resumée

Der Versuch, die Bethe-Gleichungen für ein endliches Sechs-Vertex-Modell durch numerische Verfahren zu lösen, ist nicht gelungen. Die Behandlung der gekoppelten nichtlinearen Gleichungssysteme hat sich als zu schwierig herausgestellt.

Auf eine Bemerkung von ANDREW LEANARD [Lie67] geht die Beobachtung zurück, daß das Eismodell (d. h. alle $\varepsilon_i = 0$) äquivalent zum kombinatorischen Drei-Farben-Problem ist. Die Fragestellung dabei ist, wieviele Möglichkeiten es gibt, die Quadrate eines rechtwinkligen zweidimensionalen Gitters mit drei Farben einzufärben, ohne daß zwei benachbarte Plaketten die gleiche Farbe haben. Man kann die Äquivalenz leicht sehen, indem man das BCSOS-Modell (Abschnitt 0.7) betrachtet und die Höhenvariablen statt aus \mathbf{Z} aus $\mathbf{Z}/3\mathbf{Z}$ wählt. Da die Differenz des rechten und linken Nachbarn einer Plakette nur 0 oder 2 sein kann, tragen auch modulo 3 benachbarte Plaketten verschiedene Zahlen, wobei man dann die Farben 0, 1, 2 erhält. Weil man eine Plakette frei belegen kann, ist die Anzahl der Färbungsmöglichkeiten 3^Z ($\varepsilon_i = 0$).

Die abgesehen von den zusätzlichen Gewichten kombinatorische Natur des Problems läßt vermuten, daß tiefere Einsichten nötig sind, wenn man wirklich einer Lösung für endliche Gitter näherkommen will.

Die in den Kapiteln 2 und 3 besprochenen numerischen Methoden, die alle die Transfermatrix verwenden, führen zu Ergebnissen, die bis zu einer Gitterbreite von $N = 20$ exakt berechnet werden konnten, darüber hinausgehend ist das Transfermatrix-Monte-Carlo-Verfahren recht vielversprechend, dem abgesehen von der Rechenzeit, die benötigt wird, um einen hinreichend kleinen statistischen Fehler zu erhalten, kaum prinzipielle Grenzen gesetzt sind.

Mit den so gewonnenen Verfahren konnte die Untersuchung des Spektrums und der sich daraus ergebenden Diskussion der Korrelationsfunktionen zur Definition einer Korrelationslänge für endliche Gitter bewerkstelligt werden. Dabei zeigt sich insbesondere der Einfluß der Randbedingungen auf die Korrelationslänge, der auch im thermodynamischen Limes vorhanden ist.

Literaturverzeichnis

- [Abr86] D. B. Abraham. *Surface Structure and Phase transitions*, in: Phase transitions and critical phenomena, Vol. 10, C. Domb und J. L. Lebowitz, Hrsg., Seite 281–326. Academic Press, 1986.
- [Bax82] R. J. Baxter. *Exactly Solved models in Statistical Mechanics*. Academic Press Limited, London, 1982.
- [Bet31] H. A. Bethe. *Z. Phys.*, 71:205, 1931.
- [DdV95] C. Destri and H. J. de Vega. Unified Approach to Thermodynamic Bethe Ansatz and Finite Size Corrections for Lattice Models and Field Theories. *Nucl. Physics B*, 438, 1995. (hep-th / 9407117).
- [DST93] J. Davenport, Y. Siret, and E. Tournier. *Calcul formel, Systèmes et algorithmes de manipulations algébriques*. Masson, Paris, 1993.
- [dVW84] H. J. de Vega and F. Woynarovich. Method for Calculating Finite Size Corrections in Bethe Ansatz Systems: Heisenberg Chain and Six-Vertex-Model. *Nuclear Physics B*, 251:439–455, 1984.
- [dVW90] H. J. de Vega and F. Woynarovich. Solution of the Bethe ansatz equation with complex roots for finite size: the spin $S \geq 1$ isotropic and anisotropic chains. *Phys. A: Math. Gen.*, 23:1613–1626, 1990.
- [Gro88] Siegfried Großmann. *Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik*. AULA-Verlag, vierte Auflage, 1988.
- [Het84] J. H. Hetherington. Observations on the statistical iteration of matrices. *Physical Review A*, 30:2713–2719, 1984.
- [HMP94] M. Hasenbusch, M. Marcu, and K. Pinn. High precision renormalization group study of the roughening transition. *Physica A*, 208:124, 1994.
- [HP96] M. Hasenbusch and K. Pinn. cond-mat/9605019, erscheint in *J. Phys. A*, 1996.
- [KT73] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C*, 6:1181, 1973.

- [Lie67] Elliott H. Lieb. Residual Entropy of Square Ice. *Phys. Rev.*, 162:162–172, 10 1967.
- [Lie71] Elliott H. Lieb. *Models in Statistical Mechanics*, in: Statistical Mechanics and Quantum Field Theory, C. De Witt, R. Stora, Hrsg., Seite 281–326. Gordon and Breach, New York, 1971.
- [Lor92] Falko Lorenz. *Einführung in die Algebra*. BI-Wissenschafts-Verlag, zweite Auflage, 1992.
- [NB96] M. P. Nightingale and H. W. J. Blöte. Transfer-Matrix Monte Carlo Estimates of Critical Points in the Simple Cubic Ising, Planar and Heisenberg Models. *cond-mat / 9602089*, 2 1996.
- [Nig90] M. P. Nightingale. *Transfer Matrices, Phase Transitions, and Critical Phenomena: Numerical Methods and Applications*, in: Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems, Vladimir Privman, Hrsg., Seite 287–352. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1990.
- [Nig96] M. P. Nightingale. private E-Mail, 9 1996.
- [Ons44] L. Onsager. Crystal Statistics. I, A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder-Transition. *Phys. Rev.*, 65:117, 1944.
- [Par88] Giorgio Parisi. *Statistical Field Theory*. Addison-Wesley Publishing Company, erste Auflage, 1988.
- [Pin93] Klaus Pinn. Bethe Ansatz for Beginners. unveröffentlicht, 1 1993.
- [Pin95] Klaus Pinn. *Monte Carlo Studies of Ising Model Interfaces and Solid-On-Solid Models*. Habilitationsschrift, Westfälische Wilhelms-Universität, 1995.
- [PTVF94] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, Cambridge, New York, Melbourne, zweite verbesserte Auflage, 1994.
- [Rem92] Reinhold Remmert. *Funktionentheorie 1*. Springer-Verlag, dritte Auflage, 1992.
- [RF94] Hartmann Römer and Thomas Filk. *Statistische Mechanik*. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, erste Auflage, 1994.
- [Rie90] Erwin Riedel. *Anorganische Chemie*. de Gruyter, Berlin, zweite Auflage, 1990.
- [Sem89] I. N. Bronstein K. A. Semendjajew. *Taschenbuch der Mathematik*. Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/Main, 24. Auflage, 1989.

- [Sok89] Alan D. Sokal. Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms. Cours de Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, 1989.
- [Tho79] Colin J. Thompson. *Mathematical Statistical Mechanics*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, erste Auflage, 1979.
- [vB77] Henk van Beijeren. Exactly Solvable Model for the Roughening Transition of a Crystal Surface. *Physical Review Letters*, 38:993–996, 1977.
- [Zur50] Rudolf Zurmühl. *Matrizen, Eine Darstellung für Ingenieure*. Springer, Berlin, 1950.

Ich danke Klaus Pinn für die freundliche und verlässliche Betreuung bei der Anfertigung dieser Arbeit, meiner Familie, deren vielfältige Unterstützung mir dieses Studium ermöglicht hat, Johannes Göttker-Schnetmann für die konsequente Durchsicht der Arbeit und die vielen erfrischenden Diskussionen, sowie W. Jorde für seine Unterstützung.

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbständig und ohne andere als die angegebenen Hilfsmittel angefertigt zu haben.

Münster, im Dezember 1996

