5 Statistische Analyse von Monte–Carlo–Daten

5.1 Notation

Wir betrachten einen Satz von Observablen $\{A_i\}$ und "messen" sie auf den Konfigurationen $\{\Phi^{(n)}, n = 1..N\}$ einer MC–Simulation. So bekommen wir einen Datensatz

$$A_i(n) \equiv A_i[\Phi^{(n)}] \qquad n = 1..N \tag{5.1}$$

Die **Datenmittel** (*sample averages*)

$$\bar{A}_i = \frac{1}{N} \sum_n A_i(n) \tag{5.2}$$

sollen Schätzungen (*estimators*) der **Boltzmann–Mittelwerte** sein, die mit $\langle .. \rangle$ bezeichnet werden:

$$\bar{A}_i \simeq \langle A_i \rangle$$

Denken wir uns ein **Ensemble von MC–Läufen** (Markov–Ketten) und bezeichnen die zugehörigen Mittelwerte mit $\langle\langle .. \rangle\rangle$, dann ist

$$\begin{aligned} \langle\langle \bar{A}_i \rangle\rangle &= \frac{1}{N} \sum_n \langle\langle A_i(n) \rangle\rangle \\ &= \langle A_i \rangle \end{aligned} \tag{5.3}$$

Nach Konstruktion der Markov–Kette tritt nämlich, wie in Glg.(4.12) gezeigt wurde, jede einzelne Konfiguration gerade mit der Boltzmann–Verteilung auf, und für eine Observable, die von nur einer Konfiguration $\Phi^{(n)}$ abhängt, gilt

$$\langle\langle A_i(n) \rangle\rangle = \langle A_i \rangle \tag{5.4}$$

So folgt Glg.(5.3), und sie zeigt, dass die Schätzung $\bar{A}_i$ *im Mittel* richtig ist (*unbiased estimator*).
Die in einem Markov–Prozess erzeugten Konfigurationen sind statistisch voneinander **abhängig** – es bestehen **Autokorrelationen**. Zwischen je zwei Größen $A_i(n)$ und $A_j(n')$ definieren wir die (Auto–)Korrelationsfunktion

$$\Gamma_{ij}(n - n') = \langle\langle A_i(n) A_j(n') \rangle\rangle_c \tag{5.5}$$
$$= \Gamma_{ji}(n' - n) \tag{5.6}$$

Sie hängt, wie schon in der Schreibweise angedeutet, nur vom Abstand der Konfigurationen in der Kette ab – ein Markov–Prozess ist "translations–invariant" in der (Markov–)Zeit.

Damit lassen sich die statistischen Schwankungen der Schätzungen, d.h. die (Ko–)Varianzen im Markov–Ensemble ausdrücken:

$$\Rightarrow \quad \langle\langle A_i(n)\bar{A}_j\rangle\rangle_c = \frac{1}{N}\sum_{n'}\Gamma_{ij}(n-n') \tag{5.7}$$

$$\Rightarrow \quad \langle\langle \bar{A}_i\bar{A}_j\rangle\rangle_c = \frac{1}{N^2}\sum_{nn'}\Gamma_{ij}(n-n') \tag{5.8}$$

$$= \frac{1}{N}S_{ij} \tag{5.9}$$

$$\text{mit} \quad S_{ij} \equiv \frac{1}{N}\sum_{nn'}\Gamma_{ij}(n-n')$$

$$= \Gamma_{ij}(0) + \sum_{n=1}^{N-1}(1-n/N)[\Gamma_{ij}(n)+\Gamma_{ji}(n)] \tag{5.10}$$

Glg.(5.9) ist das entscheidende Resultat für die Bestimmung der statistischen Fehler von MC–Resultaten. Es bleibt aber noch die Aufgabe, $\Gamma_{ij}(n)$ und damit S_{ij} aus dem Datensatz zu gewinnen.

5.2 Bedeutung der Autokorrelationen

Der Einfachheit halber betrachten wir hier nur eine Observable A und eine sehr lange Messreihe ($N \to \infty$).
Die Theorie der Markov–Prozesse zeigt, dass die Autokorrelationen für große Abstände (in der Kette) exponentiell abfallen:

$$\Gamma(n) \sim e^{-n/\tau} \qquad n \to \infty \tag{5.11}$$

mit der **exponentiellen** Autokorrelationszeit τ.
Für die Fehleranalyse brauchen wir die Summe

$$S = \Gamma(0) + 2\sum_{n=1}^{\infty}\Gamma(n)$$

$$\equiv 2\tau_{int}\,\Gamma(0) \tag{5.12}$$

und definieren so die **integrierte** Autokorrelationszeit τ_{int}:

$$2\tau_{int} \equiv 1 + 2\sum_{n=1}^{\infty}\Gamma(n)/\Gamma(0) \tag{5.13}$$

Bei rein exponentiellem Verhalten wäre

$$\Gamma(n) = \Gamma(0)\,e^{-n/\tau} \tag{5.14}$$

$$\Rightarrow \quad S = \Gamma(0) + 2\sum_{n=1}^{\infty}\Gamma(n)$$

$$
\begin{aligned}
&= \Gamma(0)\left[1 + \frac{2e^{-1/\tau}}{1-e^{-1/\tau}}\right] \\
&= \Gamma(0)\coth\frac{1}{2\tau} \\
\Rightarrow \quad 2\tau_{int} &= \coth\frac{1}{2\tau} && (5.15) \\
\Rightarrow \quad \tau_{int} &\simeq \tau \quad \text{für} \quad \tau \gg 1 && (5.16)
\end{aligned}
$$

Was die Fehlerrechnung betrifft, ergibt sich die Varianz des Mittelwerts $\bar{A}$ zu

$$
\begin{aligned}
\sigma_A^2 &= \frac{1}{N}S \\
&= \frac{2\tau_{int}}{N}\Gamma(0) && (5.17)
\end{aligned}
$$

Bei unkorrelierten Daten hätte man einfach $\Gamma(0)/N$ erhalten. Die Autokorrelationen vergrößern also den Fehler, und es sieht aus, als hätte man nur

$$
N_{eff} = \frac{N}{2\tau_{int}} \qquad (5.18)
$$

unabhängige Messungen gemacht.

5.3 Bestimmung der Autokorrelationen

Zur Bestimmung von $\Gamma_{ij}(n)$ verwendet man folgende Schätzung:

$$
\begin{aligned}
\hat{\Gamma}_{ij}(n) &\equiv \frac{1}{N-n}\sum_{n'=1}^{N-n}[A_i(n+n') - \bar{A}_i][A_j(n') - \bar{A}_j] && (5.19) \\
& \qquad n = 0..(N-1) && (5.20)
\end{aligned}
$$

Bias:

$$
\begin{aligned}
\langle\langle\hat{\Gamma}_{ij}(n)\rangle\rangle &= \Gamma_{ij}(n) \\
&\quad - \frac{1}{N(N-n)}\sum_{n'=n+1}^{N}\sum_{n''}\Gamma_{ij}(n'-n'') \\
&\quad - \frac{1}{N(N-n)}\sum_{n'=1}^{N-n}\sum_{n''}\Gamma_{ji}(n'-n'') \\
&\quad + \frac{1}{N^2}\sum_{n'n''}\Gamma_{ij}(n'-n'') \\
&= \Gamma_{ij}(n) - \frac{1}{N}\Gamma_{ij}(0) - \ldots \\
&= \Gamma_{ij}(n) + \mathcal{O}(N^{-1}) && (5.21) \\
\langle\langle\hat{\Gamma}_{ij}(0)\rangle\rangle &= \Gamma_{ij}(0) - \frac{1}{N}S_{ij} && (5.22)
\end{aligned}
$$

Varianz:

$$
\begin{aligned}
\langle\langle \hat\Gamma_{ij}(n)^2\rangle\rangle_c &= \frac{1}{(N-n)^2}\sum_{n',n''=1}^{N-n}\Big\{\Gamma_{ii}(n'-n'')\Gamma_{jj}(n'-n'') \\
&\qquad +\Gamma_{ij}(n+n'-n'')\Gamma_{ij}(n+n''-n') \\
&\qquad +\Gamma_{ijij}(n+n',n',n+n'',n'') \\
&\qquad +\mathcal{O}(N^{-1})\Big\} \\
&= \frac{1}{N-n}\Big\{\Gamma_{ii}(0)\Gamma_{jj}(0) \\
&\qquad +2\sum_{n'=1}^{N-n-1}\left[1-n'/(N-n)\right]\Gamma_{ii}(n')\Gamma_{jj}(n')\Big\} \\
&\quad +\ldots+\mathcal{O}((N-n)^{-2})
\end{aligned}
\tag{5.23}
$$

Bias und Varianz der Schätzung $\hat\Gamma_{ij}(n)$ sind also jeweils $\mathcal{O}(N^{-1})$, jedenfalls für $n \ll N$. Das ist in Ordnung, schließlich handelt es sich hier um die "Fehler der Fehler".

Anmerkung: man kann nicht einfach S_{ij} Glg.(5.10) schätzen, indem man $\hat\Gamma_{ij}$ für Γ_{ij} einsetzt:

$$
\begin{aligned}
&\hat\Gamma_{ij}(0)+\sum_{n=1}^{N-1}(1-n/N)[\hat\Gamma_{ij}(n)+\hat\Gamma_{ji}(n)] \\
&= \frac{1}{N}\sum_{n=-N+1}^{N-1}\sum_{n'}{}'[A_i(n+n')-\bar A_i][A_j(n')-\bar A_j] \\
&= \frac{1}{N}\sum_{n'n''}[A_i(n'')-\bar A_i][A_j(n')-\bar A_j] \\
&= 0
\end{aligned}
$$

mit $\sum'_{n'}$ über $n' \in [1,N]\cap[1-n,N-n]$. Die Schätzwerte $\hat\Gamma_{ij}(n)$ schwanken stark, ihre Summe wird verfälscht vom (negativen) Bias bei großen n. Deshalb muss die Summation in S_{ij} Glg.(5.10) an geeigneter Stelle abgebrochen werden, z.B. wenn die Summanden wachsen oder negativ werden oder wenn sie, verglichen mit ihren statistischen Schwankungen, nicht mehr signifikant erscheinen.

5.4 Fehler–Fortpflanzung

Schätzung für eine **Funktion** $F(A)$ der statistischen Variablen $A \equiv \{A_i\}$:

$$\hat F = F(\bar A) \tag{5.24}$$

Entwicklung um die exakten Werte $\mathring{A}_i = \langle A_i\rangle$:

$$\hat F = \mathring{F} + \sum_i \mathring{F}_i\,[\bar A_i - \mathring{A}_i]$$

$$
\begin{aligned}
& +\frac{1}{2} \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_{ij} \, [\bar{A}_i - \overset{\circ}{A}_i][\bar{A}_j - \overset{\circ}{A}_j] + ... \\
\text{mit} \quad \overset{\circ}{F} \;&\equiv\; F(\overset{\circ}{A}) \\
F_i(A) \;&\equiv\; \frac{\partial F(A)}{\partial A_i}
\end{aligned}
$$

Bias:

$$
\begin{aligned}
\langle\langle \hat{F} \rangle\rangle \;&=\; \overset{\circ}{F} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_{ij} \, \langle\langle \bar{A}_i \bar{A}_j \rangle\rangle_c + ... \\
&=\; \overset{\circ}{F} + \frac{1}{2N} \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_{ij} \, S_{ij} + \mathcal{O}(N^{-2}) \qquad (5.25)
\end{aligned}
$$

Varianz:

$$
\begin{aligned}
\langle\langle \hat{F}^2 \rangle\rangle_c \;&=\; \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_i \, \langle\langle \bar{A}_i \bar{A}_j \rangle\rangle_c \, \overset{\circ}{F}_j + ... \\
&=\; \frac{1}{N} \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_i \, S_{ij} \, \overset{\circ}{F}_j + \mathcal{O}(N^{-2}) \qquad (5.26)
\end{aligned}
$$

Zur praktischen Durchführung der Fehlerrechnung schätzt man die partiellen Ableitungen

$$
\overset{\circ}{F}_i \;\approx\; F_i(\bar{A}) \qquad (5.27)
$$

aus den Daten ab, ebenso die $\Gamma_{ij}(n)$ mit Glg.(5.20). Letztere summiert man mit Glg.(5.10) (und einer geeigneten Abbruchbedingung) zur Kovarianzmatrix S_{ij}, um schließlich die Varianz (5.26) des Funktionswerts (5.24) zu bestimmen.

5.5 Jackknife

Durch Weglassen jeweils einzelner Datenwerte aus der Sequenz (*jackknife*) bildet man *komplementäre* Mittelwerte $\{J_i\}$:

$$
\begin{aligned}
J_i(n) \;&=\; \frac{1}{N-1} \sum_{n' \neq n} A_i(n') \qquad (5.28) \\
&=\; \frac{1}{N-1} [N\bar{A}_i - A_i(n)] \qquad (5.29) \\
\Rightarrow \quad \bar{J}_i \;&=\; \bar{A}_i \qquad (5.30) \\
\Rightarrow \quad J_i(n) - \bar{J}_i \;&=\; -\frac{1}{N-1} [A_i(n) - \bar{A}_i] \qquad (5.31)
\end{aligned}
$$

Die Jackknife–Datenfolgen $\{J_i(n)\}$ haben also dieselben Mittelwerte wie die $\{A_i(n)\}$, aber ihre Schwankungen sind um den Faktor $(N-1)$ reduziert.

Kovarianzen:

$$
\begin{aligned}
\langle\langle J_i(m) J_j(n) \rangle\rangle_c &= \frac{1}{(N-1)^2} \langle\langle [N\bar{A}_i - A_i(m)][N\bar{A}_j - A_j(n)] \rangle\rangle_c \\
&= \frac{1}{(N-1)^2} \Big\{ N S_{ij} \\
&\qquad - \sum_{n'} [\Gamma_{ij}(m-n') + \Gamma_{ij}(n'-n)] \\
&\qquad + \Gamma_{ij}(m-n) \Big\} \qquad (5.32) \\
&= \frac{1}{N} S_{ij} + \mathcal{O}(N^{-2}) \qquad (5.33) \\
\Rightarrow \quad \langle\langle J_i(m) \bar{J}_j \rangle\rangle_c &= \frac{1}{(N-1)^2} \Big\{ N S_{ij} \\
&\qquad - \sum_{n'} \Gamma_{ij}(m-n') - S_{ij} \\
&\qquad + \frac{1}{N} \sum_{n'} \Gamma_{ij}(m-n') \Big\} \\
&= \frac{1}{N-1} \left\{ S_{ij} - \frac{1}{N} \sum_{n'} \Gamma_{ij}(m-n') \right\} \qquad (5.34) \\
\Rightarrow \quad \langle\langle \bar{J}_i \bar{J}_j \rangle\rangle_c &= \frac{1}{N} S_{ij} \qquad (5.35)
\end{aligned}
$$

Letzteres stimmt mit $\langle\langle \bar{A}_i \bar{A}_j \rangle\rangle_c$ Glg.(5.9) überein, wie es sein muss.
Auf der Basis der Jackknife-Sequenz $\{J(n)\}$ kann man eine Schätzung für die **Funktion** $F(A)$ formulieren, die eine Alternative zu Glg.(5.24) darstellt:

$$
\begin{aligned}
\hat{F} &= \overline{F(J)} \qquad (5.36) \\
&= \frac{1}{N} \sum_n F(J(n))
\end{aligned}
$$

Um ihre Eigenschaften zu diskutieren, entwickelt man um die exakten Werte $\mathring{J}_i = \mathring{A}_i = \langle A_i \rangle$:

$$
\begin{aligned}
\hat{F} &= \mathring{F} + \frac{1}{N} \sum_{ni} \mathring{F}_i \, [J_i(n) - \mathring{J}_i] \\
&\quad + \frac{1}{2N} \sum_{nij} \mathring{F}_{ij} \, [J_i(n) - \mathring{J}_i][J_j(n) - \mathring{J}_j] + \dots \\
\text{mit} \quad \mathring{F} &\equiv F(\mathring{J}) = F(\mathring{A}) \\
F_i(A) &\equiv \frac{\partial F(A)}{\partial A_i}
\end{aligned}
$$

In führender Ordnung in N^{-1} stimmen Bias und Varianz mit denen der

Schätzung $F(\bar{A})$ Glg.(5.24) überein:

$$\begin{aligned}
\langle\langle \hat{F} \rangle\rangle &= \overset{\circ}{F} + \frac{1}{2N} \sum_{nij} \overset{\circ}{F}_{ij} \, \langle J_i(n) J_j(n) \rangle_c + ... \\
&= \overset{\circ}{F} + \frac{1}{2N} \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_{ij} \, S_{ij} + \mathcal{O}(N^{-2}) \qquad (5.37) \\
\langle\langle \hat{F}^2 \rangle\rangle_c &= \frac{1}{N^2} \sum_{mnij} \overset{\circ}{F}_i \, \langle J_i(m) J_j(n) \rangle_c \, \overset{\circ}{F}_j + ... \\
&= \frac{1}{N} \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_i \, S_{ij} \, \overset{\circ}{F}_j + \mathcal{O}(N^{-2}) \qquad (5.38)
\end{aligned}$$

Damit ist zunächst noch nichts gewonnen.
Der Wert der Jackknife–Methode liegt nun darin, dass man die explizite Fehlerrechnung, wie sie in Teil 5.4 beschrieben wurde, überhaupt nicht mehr braucht. Vielmehr kann die Fehleranalyse *a posteriori* durchgeführt werden, auf Basis der Datenreihe $\{F(J(m))\}$ allein. Eine genauere Betrachtung von Glg.(5.38) zeigt nämlich, dass die Autokorrelationsfunktionen $\Gamma_{ij}(n)$ dort nur in "projizierter" Form eingehen:

$$\begin{aligned}
\sum_{ij} \overset{\circ}{F}_i \, S_{ij} \, \overset{\circ}{F}_j &= \frac{1}{N} \sum_{mn} \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_i \, \Gamma_{ij}(m-n) \, \overset{\circ}{F}_j \\
&= \frac{1}{N} \sum_{mn} \Gamma_F(m-n) \\
\text{mit} \quad \Gamma_F(n) &\equiv \sum_{ij} \overset{\circ}{F}_i \, \Gamma_{ij}(n) \, \overset{\circ}{F}_j \qquad (5.39) \\
&= \Gamma_F(-n) \\
\Rightarrow \quad \langle\langle \hat{F}^2 \rangle\rangle_c &= \frac{1}{N} S_F + \mathcal{O}(N^{-2}) \qquad (5.40) \\
\text{mit} \quad S_F &= \frac{1}{N} \sum_{mn} \Gamma_F(m-n) \\
&= \Gamma_F(0) + 2 \sum_{n=1}^{N-1} (1 - n/N) \Gamma_F(n) \qquad (5.41)
\end{aligned}$$

Die $\Gamma_F(n)$ wiederum kann man schätzen mit

$$\hat{\Gamma}_F(n) = \frac{(N-1)^2}{N-n} \sum_{n'=1}^{N-n} [F(J(n'+n)) - \overline{F(J)}][F(J(n')) - \overline{F(J)}] \qquad (5.42)$$

Zur Kontrolle überzeugt man sich (nach einiger Rechnung [s. Anh. H]), dass Bias und Varianz von $\hat{\Gamma}_F(n)$ beide $\mathcal{O}(N^{-1})$ sind:

$$\langle\langle \hat{\Gamma}_F(n) \rangle\rangle = \Gamma_F(n) + \mathcal{O}(N^{-1}) \qquad (5.43)$$

$$\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{\Gamma}_F(n)^2\rangle\rangle_c \\
&= \frac{1}{N-n}\left\{\Gamma_F(0)^2 + 2\sum_{n'=1}^{N-n-1}[1-n'/(N-n)]\,\Gamma_F(n')^2\right\} + \ldots
\end{aligned} \tag{5.44}$$

Zur statistischen Bestimmung von $F(A)$ bildet man also aus den $\{A_i(n)\}$ zuerst die Jackknife–Komplemente $\{J_i(n)\}$ und daraus die Sequenz der Funktionswerte $\{F(J(n))\}$. Auf dieser Grundlage schätzt man den Mittelwert $F(A)$ mit (5.36) und die Autokorrelationen $\Gamma_F(n)$ mit (5.42). Letztere summiert man (mit geeigneter Abbruchbedingung) zur integrierten Autokorrelation S_F Glg.(5.41) und findet damit die Varianz (5.40) des gemittelten Funktionswerts.

5.6 Block-Mittelwerte

Die bisher beschriebenen Schritte erlauben eine korrekte Auswertung von MC–Datenreihen. Während es aber für eine naive Fehlerrechnung ausreichen würde, von jeder Observablen die Summe und die Summe der Quadrate der Einzelwerte zu akkumulieren, braucht man für die Schätzung der Autokorrelationen die gesamte Datenreihe. Das führt bei langen Simulationen mit vielen Observablen zu unhandlichen Datensätzen.
Als Ausweg bietet es sich an, die Datensequenz in N_B Blöcke der Länge L aufzuteilen (auch *binning* genannt) und Block–Mittelwerte zu bilden:

$$N = N_B L \tag{5.45}$$

$$B_i(b) = \frac{1}{L}\sum_{n=(b-1)L+1}^{bL} A_i(n) \qquad b = 1..N_B \tag{5.46}$$

$$\Rightarrow \quad \bar{B}_i = \bar{A}_i \tag{5.47}$$

(Eine möglicher Rest wird bei der Auswertung einfach weggelassen.)
Die Blockwerte $B_i(b)$ bilden die Basis der statistischen Auswertung. Für ihre (Ko)varianzen findet man:

$$\begin{aligned}
\langle\langle B_i(b)B_j(b)\rangle\rangle_c &= \frac{1}{L^2}\sum_{n=1-L}^{L-1}(L-|n|)\Gamma_{ij}(n) \\
&= \frac{1}{L}\sum_{n=1-L}^{L-1}(1-|n|/L)\Gamma_{ij}(n)
\end{aligned} \tag{5.48}$$

$$\langle\langle B_i(b+k+1)B_j(b)\rangle\rangle_c = \frac{1}{L^2}\sum_{n=1}^{2L-1}\min(n, 2L-n)\Gamma_{ij}(kL+n) \qquad k \geq 0 \tag{5.49}$$

Wie man sieht, sind die Block–(Ko)varianzen (zwischen $B_i(b)$ und $B_j(b)$) um einen Faktor L reduziert, das ist nicht überraschend, schließlich handelt es sich um Mittelungen über L Werte.

Wenn die Blocklänge L größer ist als die Autokorrelationszeit, dann sind in der Sequenz aufeinanderfolgende Blöcke korreliert $\sim L^{-2}$, siehe Glg(5.49) mit $k = 0$. Zwischen weiter auseinander liegenden Blockwerten wird die Autokorrelation exponentiell klein, etwa $\mathcal{O}(e^{-L/\tau})$.
In grober Näherung könnte man also annehmen, die Blockwerte seinen frei von Autokorrelationen, und eine naive Fehlerrechnung benutzen. Besser wäre es, noch die Autokorrelationen aufeinander folgender Blöcke mitzunehmen. Dann müsste man aber jeweils prüfen, ob die Blöcke wirklich lang genug sind, um die Annahme $L \gg \tau$ zu rechtfertigen. Für eine unproblematische Handhabung ist es daher am besten, die in den vorangehenden Abschnitten beschriebene Analyse von (auto–)korrellierten Daten in vollem Umfang (einschließlich Jackknife für Funktionen der Observablen) auf die Sequenz der Blockwerte anzuwenden – in der Regel ist die Autokorrelationsanalyse auf diesem Niveau deutlich einfacher als in der ungeblockten Datenreihe.

5.7 Programmpaket `stat5`

Eine Implementierung der genannten Verfahren steht in Form des Programmpakets `stat5` in Fortran und C auf der Webseite zur Verfügung. Die Struktur ist "gekapselt" (wie bei objekt–orientierter Progammierung): alle Aktionen sind als Funktionsaufrufe angelegt, ein direkter Zugriff auf die intern gespeicherten Daten ist nicht vorgesehen.
Die statistischen Observablen denke man sich mit `ivar = 1..nvar` durchnummeriert, und jede soll in maximal `nbmax` Blöcken gespeichert werden. Das initialisiert man mit

```
[call] clear5(nvar, nbmax)
```

Einen neuen Wert `value` für die Variable `ivar` akkumuliert man mit

```
[call] accum5(ivar, value)
```

Die Anzahl der Akkumulierungen jeder Observablen wird intern gezählt, und damit man `nbmax` nicht überschreitet, werden zuvor die Blöcke je zu zweit zusammengeschoben. Die Größe der Blöcke ist also immer eine Potenz von 2, und ihre Anzahl variiert zwischen `nbmax/2` und `nbmax` (außer am Anfang). Ein Wert von `nbmax = 500` ist demnach vernünftig.
Die jeweils aktuellen Resultate kann man (ohne die internen Daten zu verändern) mit folgenden Funktionen abrufen:

```
aver5(ivar)
sigma5(ivar)
tau5(ivar)
tauint5(ivar)
```

Man erhält so für jede Observable den Mittelwert $\bar{A}$ (5.2), den Fehler σ_A und die integrierte Autokorrelationszeit τ_{int} nach Glg.(5.17) und eine (fiktive)

exponentielle Autokorrelationszeit τ, die mit Glg.(5.15) aus τ_{int} abgeleitet ist.
Darüber hinaus gibt es noch Aufrufe für die Jackknife–Analyse einer Funktion der Observablen sowie zum Abspeichern der internen Daten in eine Datei und dem analogen Wieder–Einlesen.
Einzelheiten dazu in `stat5.readme`.