(Vorführung des Ising-Simulationsprogramms aus [**?**])

Das Programm (zugänglich durch die dem Buch beiliegende Diskette/CD oder die Homepage der Autoren bei der Universität Würzburg) zeigt, wie typische Gleichgewichts-Konfigurationen des Systems aussehen; die scheinbar vorhandene Dynamik kommt *ausschließlich* vom Algorithmus her und hat nichts mit physikalischer Dynamik zu tun. Plötzliches „Abschrecken“ des Systems aus hoher Temperatur illustriert dabei ein allgemeines Problem simpler Monte-Carlo-Verfahren: obwohl der wahre Gleichgewichts-Zustand bei tiefer Temperatur ein vollständig polarisierter („alles schwarz“ oder „alles weiß“) ist, bleibt die Simulation meist recht hartnäckig bei einem Zustand mit koexistierenden großen schwarzen und weißen Bereichen hängen. Tricks, um aus solchen „Nebenminima“ (wenn man das Auffinden des Gleichgewichts-Zustands einmal als Optimierungsproblem betrachtet) möglichst schnell herauszukommen, bilden die hauptsächliche intellektuelle Herausforderung bei der Konstruktion verbesserter Monte-Carlo-Verfahren. Dabei werden z.B. in raffinierten Algorithmen nicht nur einzelne Spins, sondern ganze Ansammlungen („Cluster“) von Spins geflippt (vgl. Kap. 11.6).

In Abb. 1 sieht man das Resultat einer Simulation eines 32×32-Systems. Ausgehend von einem voll magnetisierten Anfangs-Zustand wurde die Relaxation des Metropolis-Algorithmus zum Gleichgewichts-Zustand (oder auch nicht) für tausend MCS beobachtet, für $\frac{T}{T_c} = 2, 1.5, 1.1, 1.05, 1.02$. Für hohe T relaxiert die Magnetisierung sehr schnell gegen null und fluktuiert dann nur noch wenig. Bei sinkender Temperatur wachsen sowohl die Fluktuationen als auch die Relaxations„zeiten“ (Noch einmal: MCS haben *nichts* mit echter Zeit zu tun!) stark an. Wegen des oben erwähnten „Ergodensatzes“ über stochastische Matrizen können wir aber durchaus die „Zeit“-Mittelung über die MCS als Approximation für die gewünschte Schar-Mittelung benutzen. Dass die Schwankungen für $T \to T_c$ divergieren, ist zu erwarten, denn Schwankungen hängen ja bekanntlich mit entsprechenden (verallgemeinerten) Suszeptibilitäten zusammen:

$$c = \frac{1}{N}\frac{1}{k_B T^2}(\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2) \tag{27}$$

(Wärmekapazität pro Spin)

$$\chi = \frac{1}{N}\frac{1}{k_B T}(\langle M^2\rangle - \langle M\rangle^2) \tag{28}$$

(magnetische Suszeptibilität pro Spin). Genau so werden diese Größen auch berechnet; nicht etwa durch numerische Differentiation von $\langle E\rangle$ nach T oder dergleichen. (Kann man als zusätzlichen Konsistenztest machen, wenn man hinreichend viele T-Werte hat.)

Nun einmal ein paar Ergebnisse, für Simulationen ohne externes Feld, und Systemgrößen $N\times N, N = 8, 16, \cdots, 128$ (Abb. 2). Die Temperatur wurde einmal erhöht, einmal erniedrigt; der Ausgangszustand war entsprechend im einen Fall voll polarisiert, im anderen Fall zufällig. Die beiden Sätze von Resultaten unterscheiden sich nicht wesentlich; das mag an der relativ großen Zahl von MCS liegen: 10^4 zum Equilibrieren, 10^5 zum Messen, für jedes T. Man sieht, dass die Singularitäten um so besser „herauskommen“, je größer das System ist. (Bekanntlich kann kein endliches System je einen echten Phasenübergang haben.) Die Abhängigkeit von der Systemgröße werden wir gleich noch etwas näher diskutieren. Die Magnetisierung und die spezifische Wärme fluktuieren für $T < T_c$ ziemlich wild, während die innere Energie sehr unempfindlich ist. (Kein Wunder, dass die anderen Größen fluktuieren, wenn die Energie sich von einer Konfiguration zur anderen nur wenig ändert!) Die Suszeptibilität

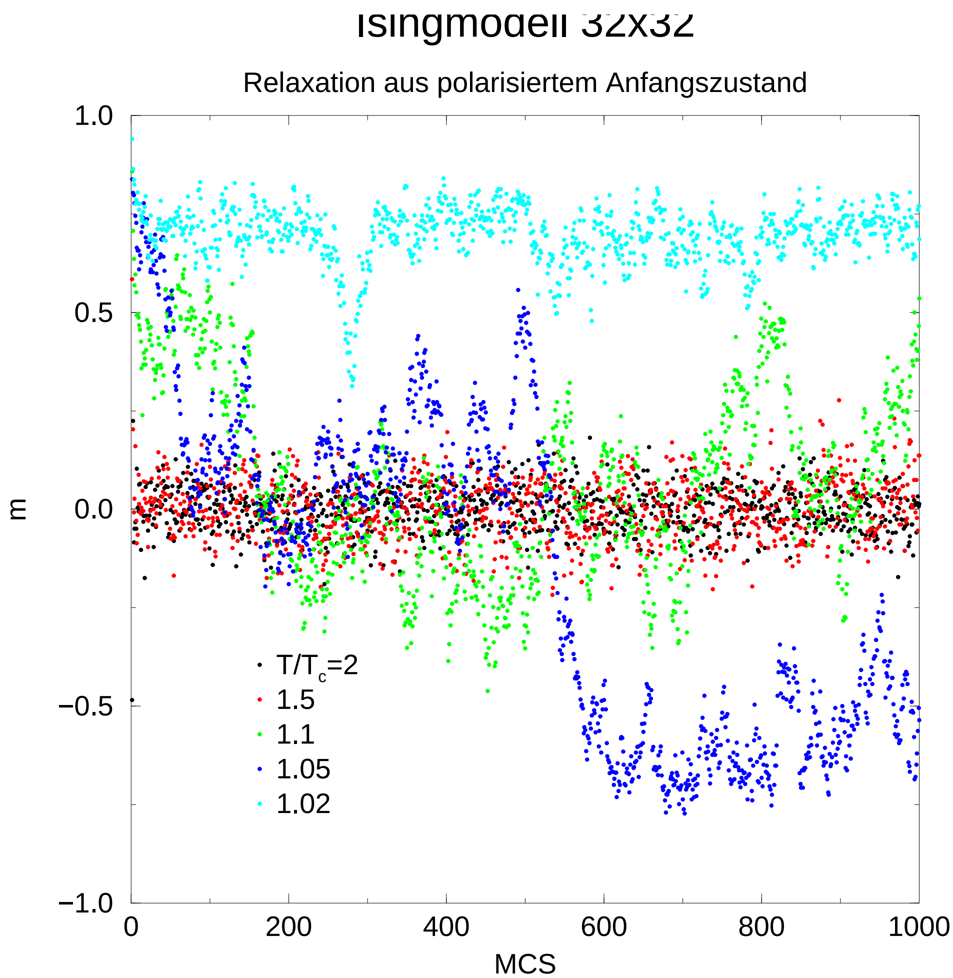

Abbildung 1: Isingmodell 32 × 32; Relaxation aus Anfangszustand bei verschiedenen Temperaturen

zeigt eine überzeugende scharfe Singularität bei T_c (Abb. 3). Man kann versuchen, durch Variation von h bei $T = T_c = 2.269185 J/k_B$ den Exponenten δ (erwartet: $\delta = 15$) zu bestimmen; das kommt für ein 64×64-System gar nicht so schlecht hin (Abb. 4). Das Magnetfeld hindert das System daran, allzu wild zu fluktuieren; außer wenn es sehr klein wird. Ebenfalls für ein 64×64-System habe ich versucht, den Ordnungsparameter-Exponenten β zu bestimmen (Abb. 4); man sieht auch hier, dass für $T \to T_c$ die Fluktuationen lästig werden.

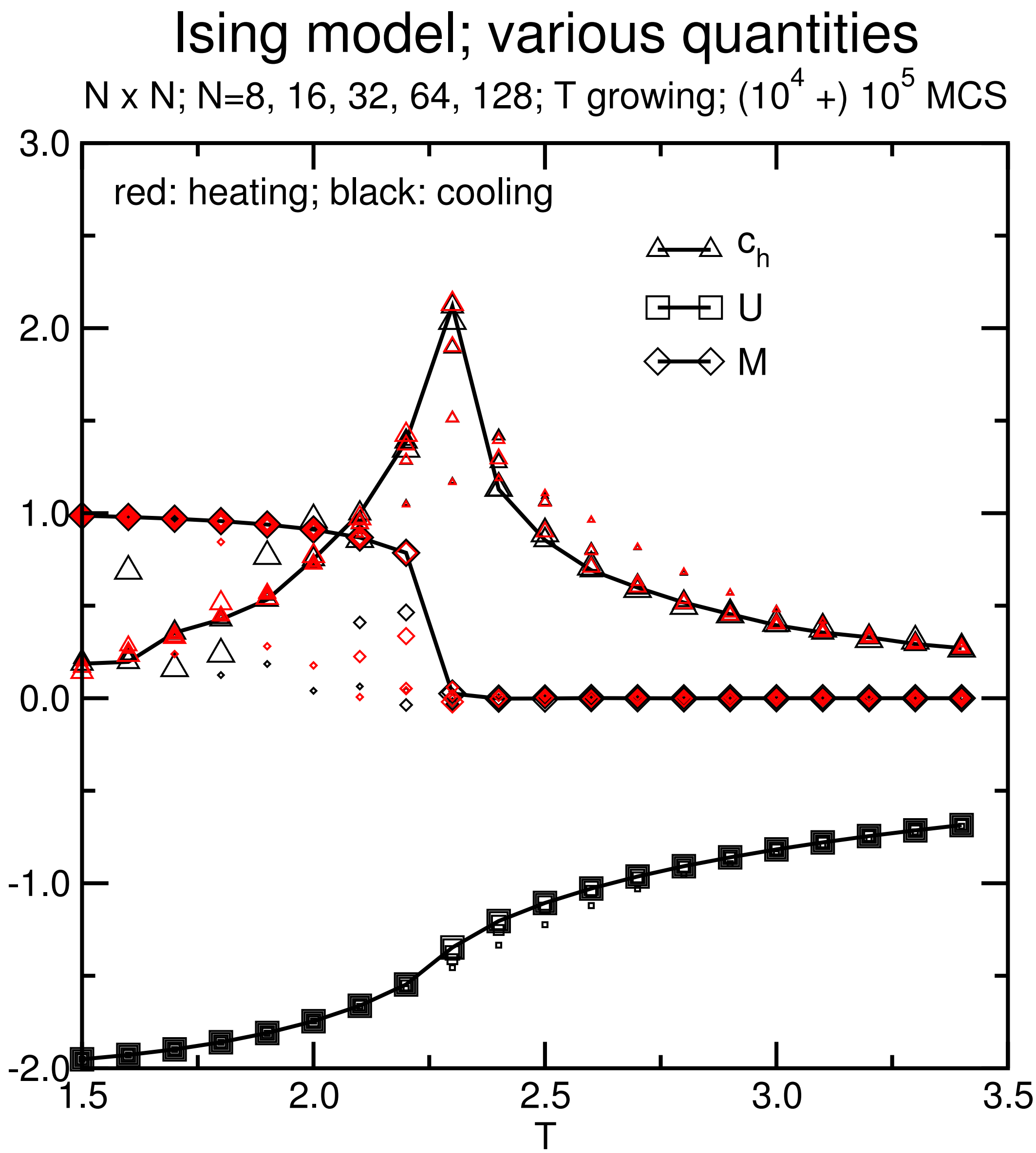

Abbildung 2: Isingmodell: Innere Energie, Magnetisierung, Wärmekapazität. Kleine Symbole entsprechen kleinen Systemen.

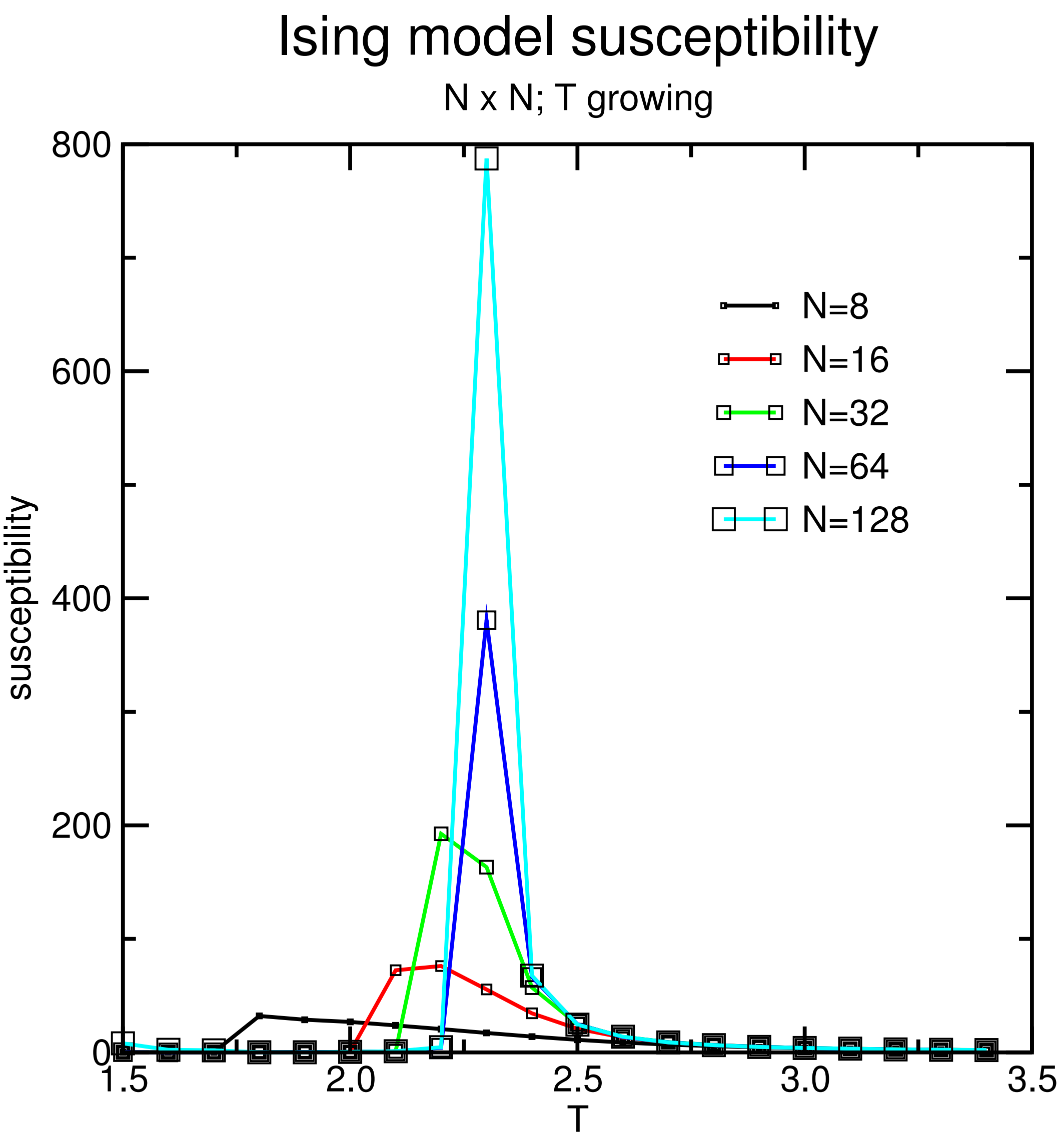

Abbildung 3: Isingmodell: Suszeptibilität

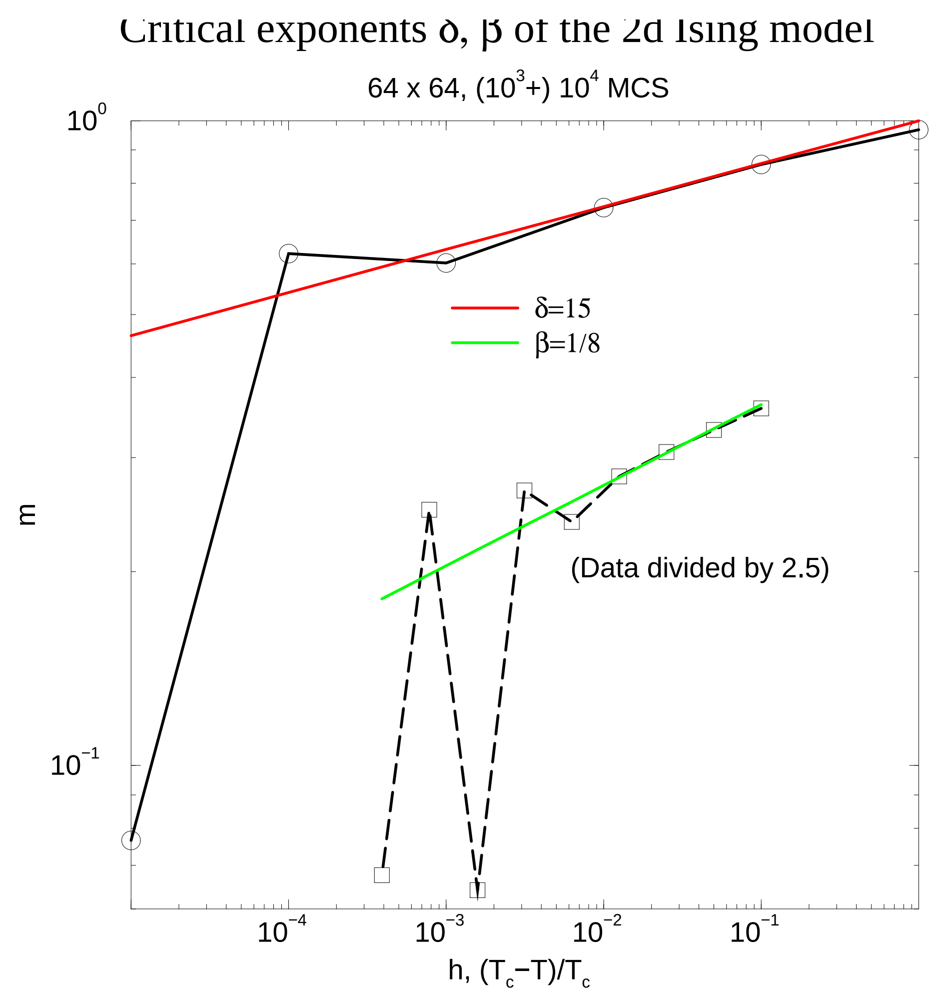

Abbildung 4: Zur Bestimmung der kritischen Exponenten β und δ des zweidimensionalen Isingmodells