

Isingmodell, Phasenübergang, Clusterbildung, Evolution

(Betreuer Klaus Morawetz, Institut für Physik, Raum 546, Tel. 33146)

Ziel:

Das zweidimensionale Isingmodell wird numerisch einmal durch ein stochastisches Modell im kanonischen Ensemble (Metropolis Algorithmus) und zum Vergleich durch ein deterministisches Modell im mikrokanonischen Ensemble (Q2R) gelöst. Durch den Vergleich können Unterschiede in den Ensembles sowie zwischen stochastischer und deterministischer Beschreibung studiert werden. In einem zweiten Schritt wird durch einen Clustererkennungsalgorithmus der Phasenübergang analysiert. Als Vergleich dient die existierende analytische Onsager Lösung. Als Zusatz kann ein Evolutionsmodell studiert werden.

Probabilistisches Ising Modell

Ein zweidimensionales $n \times n$ Gitter wird mit Werten 1 (spin auf) oder -1 (spin ab) entsprechend einer gewählten Wahrscheinlichkeit p belegt. Die Wechselwirkung wird nur mit den nächsten Nachbarn durch eine Energiekonstante J beschrieben. Bei $J > 0$ ist die Energie kleiner, wenn die Spins parallel ausgerichtet sind. Im Falle $J < 0$ ist die Energie kleiner, wenn die Spins antiparallel ausgerichtet sind. In jedem Zeitschritt wird zufällig ein Platz ausgewählt. Ein Spinflip an diesem Platz würde die Energie um $\Delta E = 2 \times (\text{Wert an der Stelle}) \times (B + J \times \text{Gesamtspin der Nachbarn})$ ändern, wobei B und J die gegebenen Feldstärke und Energiekonstante in $1/k_B T$ Einheiten ist. Die Entscheidung über einen Spinflip wird nach dem Metropolis Schema getroffen:

- Falls die Energieänderung negativ ist, oder
- Im Falle positiver Energie nur falls $e^{-\Delta E} > \text{Random}[0, 1]$

Nach jedem n^2 -ten Schritt (MonteCarlo Schritt) werden globale Eigenschaften wie die Magnetisierung (Differenz zwischen auf- und ab-Spins) analysiert. Dieses garantiert, daß jeder Gitterplatz mit gleicher Wahrscheinlichkeit ausgewählt wurde. Mit Hilfe eines Clustererkennungsalgorithmus wird die Clusterverteilung ermittelt. Beispiel: ($n = 50, B/kT = 0, \dots, J/kT = -0.1, 0.1, p = 0.2$, 250.000 Flip Operationen (entspräche 100 MC Schritten)).

Variante:

Anstatt einen Spinflip auszuführen kann ein Spintausch mit dem nächsten Nachbarn erfolgen. Dieses modelliert ein Gittergas, welches ein wichtiges Modell zellulärer Automaten darstellt und für Clusterentstehung wichtig ist.

Deterministisches Q2R Ising Modell

Hierbei erfolgt der Spinflip nur, wenn die Nachbarn die gleiche Anzahl Spin-auf und Spin-ab vorweisen, so daß die Energie durch den Flip nicht geändert wird (Mikrokanonisches Ensemble). Mit Hilfe der gleichen globalen Variablen soll mit dem probabilistischen Modell verglichen werden.

Clustererkennung (Hoshen-Kopelman Algorithmus)

Der Algorithmus besteht darin, die zusammenhängenden Gebiete (z.B. Spin auf) in einem $n \times n$ Gitter u mit einer gleichen Zahl zu markieren, so daß die Anzahl der Cluster sowie deren Größe abgelesen werden kann. Das Ergebnis steht nach Ablauf des Algorithmus in einem Gitter ul . Dazu wird an das Gitter u , welches aus $(0,1)$ Elementen bestehe, eine Nullspalte links und eine Nullreihe oben angefügt. Gleichzeitig wird ein $n + 1 \times n + 1$ Gitter ul mit Nullen gefüllt und eine leere Liste ulp angelegt. Jetzt wird in dem Gitter u von der Position $(2,2)$ angefangen von links nach rechts jeweils mit der 2. Spalte beginnend getestet und folgender Algorithmus durchgeführt:

- Ist $u(i, j) = 0$, gehe zum nächsten Platz
- Enthält $u(i, j)$ eine Zahl:
 - Sind $u(i - 1, j) = u(i, j - 1) = 0$: setze $ul(i, j) = 1 + \text{Max}[ulp]$ und füge $\text{Max}(ul)$ in die Liste ulp ein
 - Ist nur einer der Plätze $u(i - 1, j) \neq 0$ oder $u(i, j - 1) \neq 0$: Besetze $ul(i, j) = ul(i - 1, j)$ oder $ul(i, j) = ul(i, j - 1)$ mit dem nichtverschwindenden Wert
 - Ist $u(i - 1, j) \neq 0$ und $u(i, j - 1) \neq 0$, wähle $a = ul(i - 1, j)$, $b = ul(i, j - 1)$ und:
 - * Setze $ul(i, j) = \text{Min}[ulp(a), ulp(b)]$
 - * Ersetze $ulp(\text{Max}[ulp(a), ulp(b)]) = \text{Min}[ulp(a), ulp(b)]$

Nachdem alle Plätze in u getestet wurden, werden in ul noch falsche Nummerierungen mit Hilfe der eindimensionalen Liste ulp korrigiert. Die Bedeutung von ulp besteht darin, daß die eventuell auftretende Zahl i in ul durch den Wert $ulp(i)$ ersetzt werden muß.

- Nun können die Zahlen in ul so geändert werden, daß sie ohne Lücken fortlaufend auftreten.

Zusatz: Darwinsche Evolution

Im Ko-evolutionsmodell werden in einem eindimensionalen Gitter Zufallszahlen vergeben, die die spezifischen Eigenschaften einer Spezies (Gitterplatz) beschreiben sollen. Die Spezies mit den ungünstigsten (niedrigsten) Werten wird zufällig durch den Mutationsdruck verändert. Dabei beeinflußt sie die beiden Nachbarwerte derart, daß diese ebenfalls zufällig verändert werden. Als Ergebnis entwickelt sich eine wechselwirkende Spezies im punktuellen Gleichgewicht, das heißt, daß Spezies, die sich lange nicht entwickelt haben in der Tendenz konstant bleiben und Spezies, die sich gerade verändern mit größerer Wahrscheinlichkeit weiter verändern. Statt "Überleben der Angepaßtesten" findet die "Entwicklung der am wenigsten Angepaßten" statt. Die Häufigkeit der Mutation für eine Spezies sowie die Verteilung der Abstände zwischen zwei Mutation ist zu bestimmen und das entsprechende Potenzgesetz zu finden.

Programmierung:

Es kann sich in existierende Mathematica notebooks eingearbeitet werden oder selbst nach Lösungen in C oder Fortran gesucht werden.

Literatur

Kerson Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley, N.Y., 1985

R. J. Gaylord, P. R. Wellin, *Computer Simulations with Mathematica*, Springer, N. Y., 1994

G. R. Grimmet *Percolation*, Springer, N. Y., 1989

Per Bak, Kim Sneppen, Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 4083