

Computational Physics, Aufgabenblatt 7

Kevin Sedlacek, Mona Kalthoff

Abgabe: 16. Juni 2017

1 Bifurkationsdiagramme

Im Folgenden werden die **logistische Abbildung** und die **kubische Abbildung**

$$\text{logistische Abbildung:} \quad f(x) = rx(1-x) \quad (1)$$

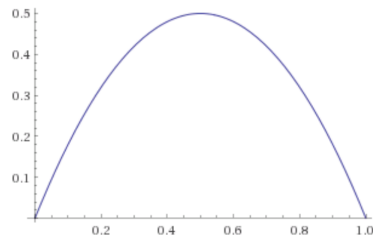
$$\text{kubische Abbildung:} \quad f(x) = rx - x^3 \quad (2)$$

bzw. ihre iterierten Darstellungsformen

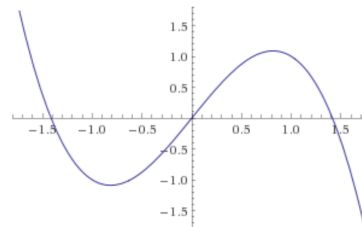
$$\text{logistische Abbildung:} \quad x_{n+1} = rx_n(1-x_n) \quad x_n \in [0,1] \quad (3)$$

$$\text{kubische Abbildung:} \quad x_{n+1} = rx_n - x_n^3 \quad x_n \in [-\sqrt{1+r}, \sqrt{1+r}] , \quad (4)$$

welche in Abbildung 1 dargestellt sind, betrachtet. Nun sollen die Fixpunkte beider Abbildungen in Abhängigkeit von r ermittelt werden.



(a) logistische Abbildung



(b) kubische Abbildung

Abbildung 1: Graf der logistischen Abbildung für $r = 2$ und der kubischen Abbildung für $r = 2$

Zur Interpretation der Ergebnisse ist es zunächst notwendig sich den **Bannachschen Fixpunktsatz** ins Gedächtnis zu rufen. Dieser besagt, dass wenn F eine Abbildung ist, die einen Bannachraum auf sich selbst abbildet, Lipschitz-stetig ist, falls

$$\|F(x) - F(y)\| < L \|x - y\| \quad (5)$$

mit einer Lipschitzkonstanten L ist. Die Abbildung ist eine Kontraktion, wenn $L < 1$ ist. Eine kontrahierende Abbildung zeichnet sich dadurch aus, dass sie genau einen Fixpunkt besitzt, und für jeden Startwert aus dem Bannachraum gegen diesen Fixpunkt konvergiert. Ist die Abbildung

durch eine eindimensionale Abbildung mit einer Abbildungsvorschrift $f(x)$, dann ist die Abbildung eine Kontraktion wenn $|f'(x)| < 1$ für alle x gilt. Wir berechnen daher zunächst die Ableitungen

$$\text{logistische Abbildung:} \quad f'(x) = r(1 - 2x) \quad (6)$$

$$\text{kubische Abbildung:} \quad f'(x) = r - 3x^2 \quad (7)$$

Hier wird deutlich, dass die logistische Abbildung für $x \in [0,1]$ die Relation $\max(|f'(x)|) = |r|$ erfüllt, und somit für $r < 1$ eine Kontraktion ist. In Abbildung 2 sind die Fixpunkte der logistischen Abbildung in Abhängigkeit von r aufgetragen. Es wird deutlich, dass die logistische Abbildung für $r < 1$ tatsächlich nur einen Fixpunkt aufweist, nämlich bei $x_F = 0$. Oberhalb von $r = 1$ treten mindestens zwei Fixpunkte auf, wobei der Fixpunkt bei $x_F = 0$ instabil ist, und nicht von unserem Algorithmus erfasst wird. Um diesen Fixpunkt ebenfalls zu erreichen hätten wir die Iteration exakt bei $x_0 = 0$ starten müssen. Ob ein Fixpunkt stabil ist lässt sich über

$$f'(x_F) < 1 \rightarrow \text{stabil} \quad (8)$$

$$f'(x_F) > 1 \rightarrow \text{instabil} \quad (9)$$

überprüfen. Ab $r = 3$ ist bei der logistischen Abbildung auch der zweite Fixpunkt instabil, es kommen jedoch zwei weitere stabile Fixpunkte hinzu. Im weiteren Verlauf wird deutlich, dass für jeden Fixpunkt der instabil wird, zwei stabile Fixpunkte hinzukommen, was einer Bifurkation entspricht. Oberhalb von $r = 4$ und unterhalb von $r = 0$ liegt x_{n+1} nicht mehr in $[0,1]$, daher wird die Iterationsvorschrift hier ungültig und wir betrachten lediglich das Intervall $0 < r < 4$.

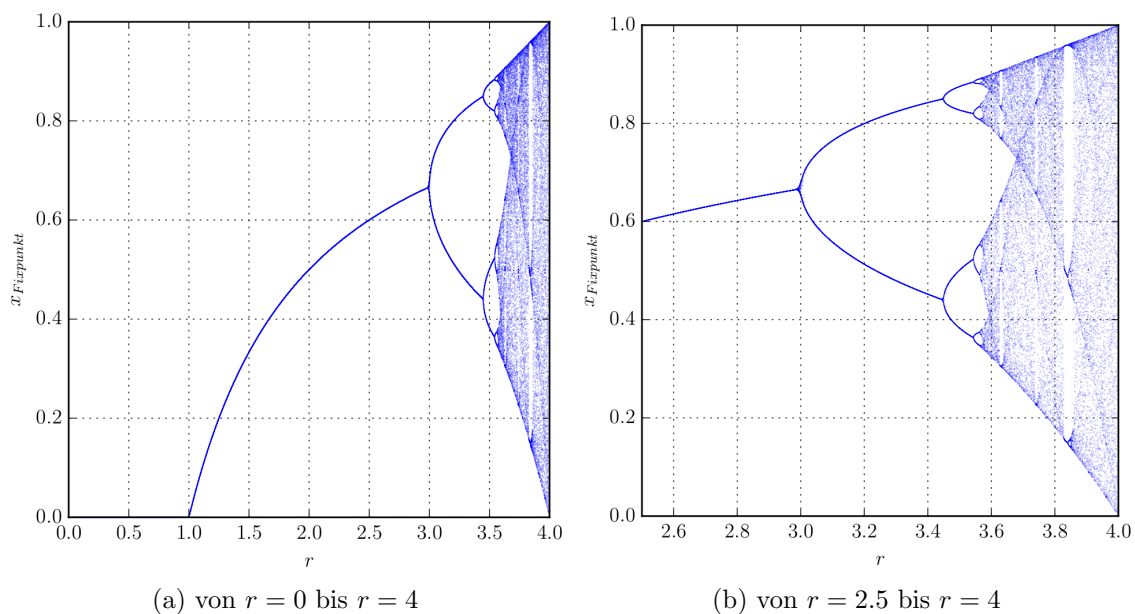
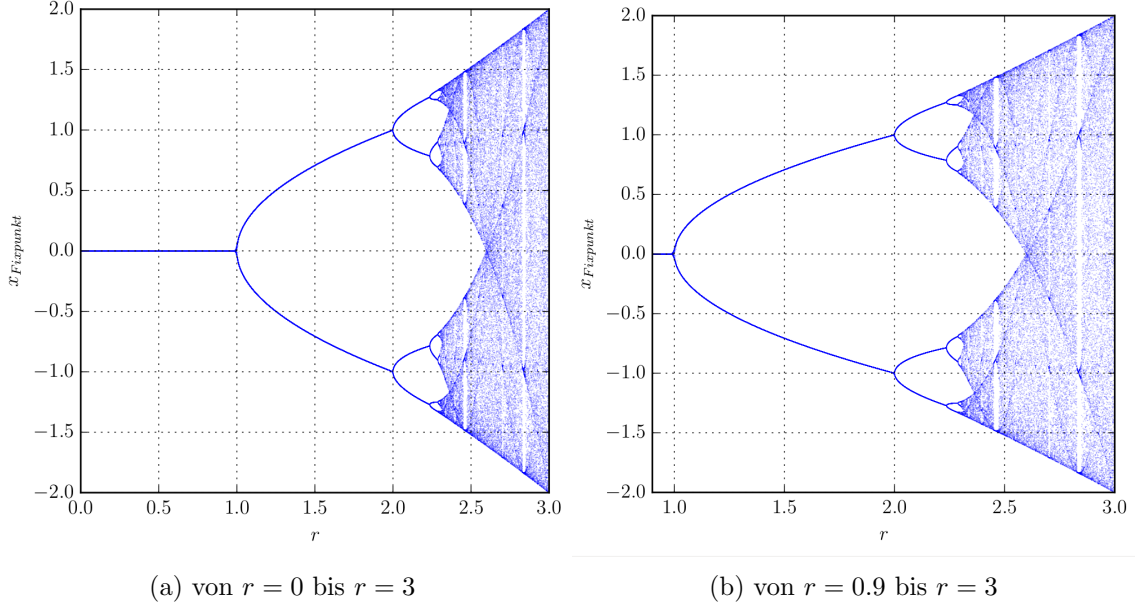


Abbildung 2: Bifurkationsdiagramm der logistischen Abbildung $x_{n+1} = rx_n(1 - x_n)$

Für die kubische Abbildung können ähnliche Überlegungen angestellt werden. Hier wird der Definitionsbereich $x_n \in [-\sqrt{1+r}, \sqrt{1+r}]$ genau dann nicht verlassen, wenn $0 < r < 3$ gilt.


 Abbildung 3: Bifurkationsdiagramm der kubischen Abbildung $x_{n+1} = rx_n - x_n^3$

Die Ableitung der kubische Abbildung

$$f'(x) = r - 3x^2. \quad (10)$$

hat den Definitionsbereich $0 < x^2 < r + 1$, dann ist das Maximum der Ableitung gegeben durch

$$\max(|r - 3x^2|) = \max(r, |r - 3r - 3|) \quad (11)$$

$$= \max(r, |-2r - 3|) \quad (12)$$

$$= \max(r, 2r + 3), \quad (13)$$

und da für $r > -3$ gilt, dass $2r + 3 > r$ ist, ergibt sich das Maximum zu

$$\max(|r - 3x^2|) = 2r + 3 \stackrel{!}{<} 1 \rightarrow r < -1. \quad (14)$$

Die gesamte Rechnung ist jedoch nur für $r > 0$ legitim, somit ist die Abbildung nirgendwo für alle x kontrahierend, sondern nur dann wenn der Startwert x_0 hinreichend nah am Fixpunkt liegt. Trotzdem kann mittels der Iteration nachgewiesen werden, dass für $r < 1$ nur ein Fixpunkt vorliegt. Bei $r = 1$ kommt es zur ersten Bifurkation, welche an $r = 2$ von weiteren gefolgt wird. Das komplette Bifurkationsdiagramm ist in Abbildung 3 dargestellt.

2 Magnetisierung des Ising-Modells

Im folgenden soll die Transzendente Gleichung

$$m = \tanh\left(\frac{H + k_B T_c \cdot m}{k_B T}\right) \quad (15)$$

für die Magnetisierung m im Ising-Modell, mit dem externen Feld H numerisch über das **Newton-Raphson-Verfahren** bestimmt werden. Da dies ein Verfahren zur Nullstellensuche vom Typ $f(x) = 0$ ist, formen wir zunächst um:

$$f(m) = m - \tanh\left(\frac{H + k_B T_c \cdot m}{k_B T}\right) = m - \tanh\left(\frac{\frac{H}{k_B T_c} + \frac{k_B T_c}{k_B T_c} \cdot m}{\frac{k_B T}{k_B T_c}}\right) = m - \tanh\left(\frac{\frac{H}{k_B T_c} + m}{\frac{T}{T_c}}\right) \quad (16)$$

und betrachten dann

$$f(m) = m - \tanh\left(\frac{\frac{H}{k_B T_c} + m}{\frac{T}{T_c}}\right) = 0. \quad (17)$$

Im Newton-Raphson verfahren wird die Nullstelle m^* über die Iteration

$$m_{n+1} = m_n - \frac{f(m_n)}{f'(m_n)} \quad (18)$$

ermittelt. Wir berechnen daher zunächst die analytische Ableitung

$$f'(m) = 1 - \frac{1}{\frac{T}{T_c}} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\frac{H}{k_B T_c} + m}{\frac{T}{T_c}}\right) = 1 - \frac{1}{\frac{T}{T_c}} \frac{2}{\cosh\left(2 \cdot \frac{\frac{H}{k_B T_c} + m}{\frac{T}{T_c}}\right) + 1}. \quad (19)$$

Um dies Übersichtlicher zu gestalten setzten wir $\tilde{T} = \frac{T}{T_c}$ und $\tilde{H} = \frac{H}{k_B T_c}$. Dann ergibt sich für die Funktion und die Ableitung

$$f(m) = m - \tanh\left(\frac{\tilde{H} + m}{\tilde{T}}\right) \quad (20)$$

$$f'(m) = 1 - \frac{1}{\tilde{T}} \frac{2}{\cosh\left(2 \cdot \frac{\tilde{H} + m}{\tilde{T}}\right) + 1} \quad (21)$$

und die Iteration ergibt sich zu

$$m_{n+1} = m_n - \frac{m_n - \tanh\left(\frac{\tilde{H} + m_n}{\tilde{T}}\right)}{1 - \frac{1}{\tilde{T}} \frac{2}{\cosh\left(2 \cdot \frac{\tilde{H} + m_n}{\tilde{T}}\right) + 1}}. \quad (22)$$

Diese Iteration wird von der Funktion *Newton_Raphson_Iterate* so lange aufgerufen, bis die Differenz $|m_{n+1} - m_n| < m_{\text{krit}}$ mit $m_{\text{krit}} = 0.0001$ erfüllt. Nun kann es aber passieren, dass die Funktion mehr als eine Nullstelle, also mehrere Lösungen hat. Um möglichst viele Lösungen zu erfassen ermitteln wir die Lösung der Iteration für 3 bis 4 verschiedene Startwerte.

Ein weiteres Problem des Newton-Raphson-Verfahrens ist, dass der Startwert m_0 nicht zu weit von der Nullstelle entfernt liegen darf, da das Verfahren in diesem Fall nicht zwangsläufig konvergiert. Ein Verfahren welches zwangsläufig in einen Fixpunkt konvergiert ist das Verfahren der Intervall-Halbierung. Wir implementieren daher zunächst die Funktion *Startwert_select*, welche mittels der

Intervall-Halbierung eine grobe Lösung bestimmt, und diese als Startwert an die Newton-Raphson-Iteration übergibt. Zunächst wird nun der Wert für das externe Feld H als konstant angenommen, wobei $\tilde{H} \in \{0, 0.1, 0.5\}$ gewählt wird, und die Temperatur \tilde{T} zwischen null und 3 variiert.

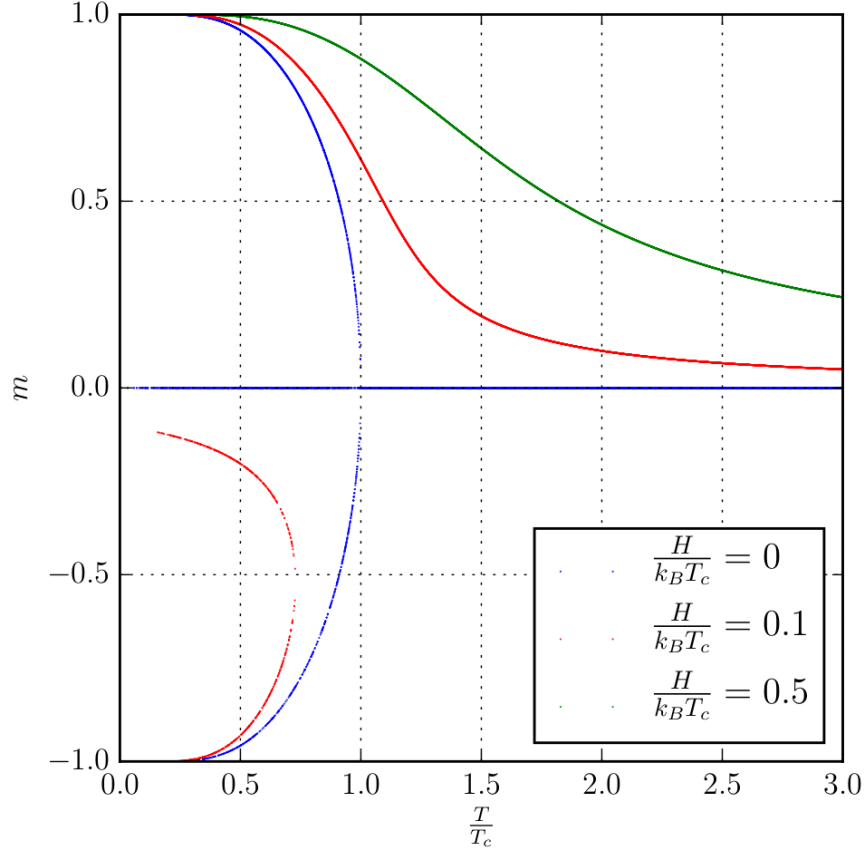


Abbildung 4: Magnetisierung m im Isingmodell bei variabler Temperatur für drei verschiedene Externe Magnetfelder $\tilde{H} \in \{0, 0.1, 0.5\}$. Die Schrittweite beträgt $\Delta\tilde{T} = 0.001$

Für $\tilde{H} = H = 0$, also ein verschwindendes externes Magnetfeld, entspricht das numerische Ergebnis exakt der Erwartung. In diesem Fall gibt es oberhalb der kritischen Temperatur nur eine einzige stabile Lösung mit $m = 0$, es liegt also ein Paramagnet (keine magnetische Ordnung) vor. Unterhalb kommt es jedoch zu einer Bifurkation und eine magnetische Ordnung kann existieren. Für $H > 0$ entsprechen die beiden oberen Kurven ebenfalls der Erwartung, denn ein nicht verschwindendes Magnetfeld induziert auch oberhalb der kritischen Temperatur eine magnetische Ordnung. Nur die negative Lösung für $\tilde{T} < 1$ bei $\tilde{H} = 0.1$ können wir uns nicht erklären.

Als nächstes wurde die Temperatur konstant gehalten und das externe Feld variiert. Das Ergebnis ist in Abbildung 5 dargestellt. Entspricht die Temperatur der kritischen Temperatur ($\tilde{T} = 1$), so ist die Steigung im Koordinatenursprung annähernd 1 und bereits sehr kleine externe Felder führen zu starken Magnetisierungen. Die Funktion geht asymptotisch schnell gegen $m = \pm 1$. Diese

Asymptotik tritt auch bei Temperaturen oberhalb von T_c auf, eine vollständige Magnetisierung wird jedoch erst bei stärkeren externen Feldern erreicht. Unterhalb der kritischen Temperatur hat die Transzendente Gleichung für die Magnetisierung jedoch bei kleinen externen Feldern bis zu drei verschiedene Lösungen, weshalb die Schrittweite hier deutlich feiner gewählt werden musste. Es wird deutlich, dass selbst ein positives externes Feld zu einer negativen Magnetisierung führen kann. Dies entspricht der Deutung der roten Kurve für $m < 0$ in 4, für die wir schon zuvor keine Erklärung wussten.

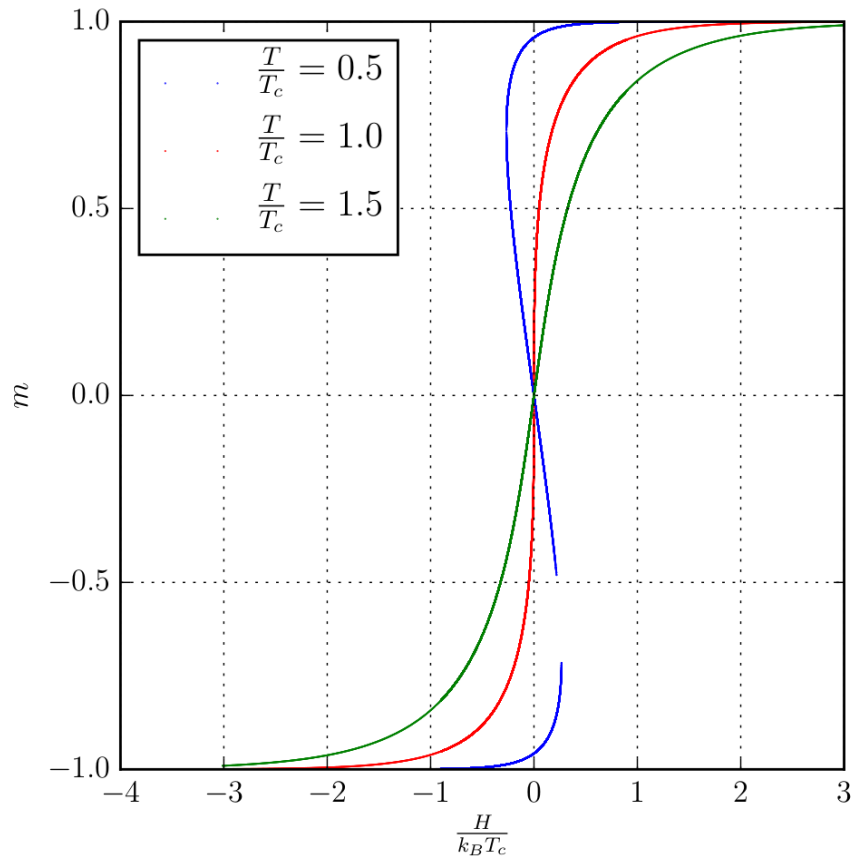


Abbildung 5: Magnetisierung m im Isingmodell bei variablem externen Feld für drei verschiedene Temperaturen $\tilde{T} \in \{0.5, 1.0, 1.5\}$. Die Schrittweite beträgt $\Delta\tilde{H} = 0.001$ und im Fall mehrerer Lösungen $\Delta\tilde{H} = 0.00001$