Vorlesung über Simulationsmethoden in der Physik (Computerphysik II) WS2012/13
Dr. Gerd Schröder-Turk mit Dipl.-Phys. Matthias Hoffmann

Blatt 3 – Perkolationsmodelle und das Finite Size Scaling

Zur Bearbeitung in den verbleibenden Übungsstunden des Semesters
Zur Abgabe bis Ende Februar 2013

Aufgabe 1: Hoshen-Kopelman Algorithmus zur Clusteridentifikation

Betrachten Sie ein Quadratgitter der Größe $L \times L$. Jeder Platz des Gitters kann besetzt oder unbesetzt sein. Ein Cluster sei eine zusammenhängende Menge von besetzten Gitterplätzen (Zwei Gitterplätze hängen zusammen, wenn sie sich in genau einer der beiden Koordinaten x und y um ± 1 unterscheiden). Schreiben Sie ein Programm, mit dem Sie alle Cluster von besetzten Gitterplätzen identifizieren bzw. nummerieren können. Benutzen Sie dazu den Hoshen-Kopelman Algorithmus (oder eine seiner Varianten), dessen Beschreibung Sie in der Literatur finden. Stellen Sie Ihre Ergebnisse visuell dar, z.B. für Zufallskonfigurationen.

Aufgabe 2: Site Perkolation auf dem Quadratgitter

Betrachten Sie das "Site Perkolations" Modell auf einem Quadratgitter in der Ebene. Auf einem Gitter der Größe $L \times L$ sei jeder Platz mit Wahrscheinlichkeit p besetzt. Ein Cluster heißt perkolierend, wenn mindestens ein Gitterplatz der obersten ($y = 0$) und der ein Gitterplatz der untersten Gitterreihe ($y = L - 1$) Teil des Clusters ist. Überzeugen Sie sich (und mich) durch numerische Simulation, dass dieses Modell bei $p_c \approx 0.592$ einen Perkolationsübergang hat, durch die folgenden Schritte.

(a) Schreiben Sie ein Programm, dass Konfigurationen des Site Perkolationsmodells erzeugt und graphisch darstellt. Die Clusteridentizierung soll mittels des Hoshen-Kopelman Algorithmus durchgeführt werden.

(b) Berechnen Sie durch statistische Simulation die Perkolationswahrscheinlichkeit P, d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass der Mittelpunkt des Gitters –oder ein anderer Punkt, siehe Stauffer(1995), Seite 29– teil des perkolierenden Clusters ist. Alternativ kann auch die Grösse f_{perc} untersucht werden, die den Anteil der Gitterpunkte in perkolierenden Clustern geteilt durch die Gesamtzahl der Gitterplätze darstellt. Stellen Sie $P(p)$ bzw. $f_{perc}(p)$ als Diagramm dar, für verschiedene Systemgrößen $L = 10, 100, 1000$. Die Zahl M der Realisierungen, aus denen Sie die statistischen Schätzwerte für P bzw. f_{perc} bestimmen, sollte dabei variabel gewählt werden; Sie können M auch dynamisch so festlegen, dass der statische Fehler kleiner als ein gewünschter maximaler Fehler ist.

(c) Diskutieren Sie das beobachtete Verhalten bzgl. des Perkolationsüberganges.

Aufgabe 3: Fraktale Dimension des perkolierenden Clusters

Demonstrieren Sie, dass die perkolierenden Cluster im Site Perkolationsmodell an der kritische Perkolationsschwelle, d.h. bei $p = p_c \approx 0.592746$, eine fraktale Dimension von $D_f \neq 2$ haben, durch die folgenden Schritte

(a) Simulieren Sie das Site-Perkolations-Modell bei $p = p_c$. Identifizieren Sie in Ihren Simulationen jeweils den größten Cluster und überprüfen Sie, ob er perkoliert. Stellen Sie den größten Cluster graphisch dar.

(b) Bestimmen Sie dann die Funktion $M(R)$, d.h. die Masse (=Zahl der besetzten Gitterplätze) in konzentrischen Kreisschalen der Breite ΔR im Radius R um den Schwerpunkt des größten Clusters. Wählen Sie einen sinnvollen Wert für den Parameter ΔR.

(c) Untersuchen Sie Mittelwerte der Funktion $M(R)$ für viele Realisierungen und bestimmen Sie durch Anpassung (Fit) einer Potenzfunktion die fraktale Dimension D_f. Berücksichtigen Sie dabei lediglich die Realsierungen mit perkolierenden Clustern, und untersuchen Sie evtl. auch Systeme mit unterschiedlicher Größe L.

(d) Diskutieren Sie die numerischen Probleme und die Signifikanz des gefundenen Wertes von D_f. Vergleichen Sie den Wert mit den in der Literatur bekannten Werten.

Beachten Sie auch die alternative Methode zur Bestimmung der fraktalen Dimension, die in Stauffer (1995) auf S. 69ff. beschrieben wird. In diesem Buch wird anstelle von D_f der Buchstabe D verwendet.

Aufgabe 4: Divergenz der mittleren Clustergröße am kritischen Punkt

Betrachten Sie die mittlere Clustergröße $S = \sum_s = 1^{L^2} \frac{w_s\, s}{/} p$, so wie sie in der Vorlesung und in Stauffer (1995) auf Seite 22 definiert ist. Diese Größe divergiert am kritischen Perkolationspunkt p_c.

(a) Wiederholen Sie die Überlegungen aus der Vorlesung und zeigen Sie, dass S im 1D Modell bei $p_c = 1$ divergiert.

(b) Bestimmen Sie in Ihren Simulationen des 2D Site Perkolationsmodell die Größe S als Funktion von p in der Nähe von p_c, durch geeignete Mittelung über Systeme verschiedener Größe. Bei dieser Untersuchung sollen nur nicht-perkolierende Cluster untersucht werden, siehe Stauffer (1995) S. 39.

(c) Überprüfen Sie, ob Ihre Daten mit der Hypothese $S \propto |p - p_c|^\gamma$ verträglich sind und bestimmen Sie γ. Vergleichen Sie insbesondere Ihren Wert von γ mit dem in der Literatur bekannten Werten.

Aufgabe 5: Korrelations- oder 2-Punkt-Zusammengehörigkeitsfunktion

Die Korrelationsfunktion $g(r)$ (auch 2-Punkt-Zusammengehörigkeitsfunktion) ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Gitterpunkt im Abstand r von einem besetzten Clusterpunkt zu demgleichen Cluster gehört. Für $r = 0$ ist $g(0)$ natürlich 1. In der nicht-perkolierenden Phase ist $g(\infty) = 0$. Am kritischen Punkt gehorcht $g(r)$ einem Potenzgesetz mit kritischem Exponenten β/ν. Berechnen Sie $g(r)$ am kritischen Punkt und bestimmen Sie durch Fitten einen Schätzwert für β/ν. Vergleichen Sie diesen mit den in der Literatur bekannten Werten.